

**INFLUENCIA DE UNA IMPUREZA DONADORA D^0 SOBRE LA
MAGNETIZACIÓN DE ANILLOS CUÁNTICOS**

FABIAN RAMIREZ PRADA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2010**

**INFLUENCIA DE UNA IMPUREZA DONADORA D^0 SOBRE LA
MAGNETIZACIÓN DE ANILLOS CUÁNTICOS**

**TRABAJO DE GRADO
Para optar al título de físico**

FABIAN RAMIREZ PRADA

DIRECTOR:

Dr. LUIS FRANCISCO GARCÍA RUSSI



**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2010**

CONTENIDO

	Pág.
Introducción	11
1 Marco teórico	16
1.1 D^0 Confinada en un anillo cuántico delgado	16
1.2 Geometría del anillo cuántico	17
1.3 Oscilaciones de Aharonov-Bohm para un anillo de 1D	18
1.4 Hamiltoniano del sistema	23
1.5 Anillo cuántico magnetizado en presencia de una impureza Donadora D^0	24
Resultados y discusiones	28
Conclusiones	36
Bibliografías	62
Anexos	37

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.** Esquema de una donadora D^0 confinada en un anillo cuántico 17
- Figura 2.** Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un QR 1D 20
- Figura 3.** Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un anillo cuántico delgado con un electrón confinado en presencia de una impureza centrada ($\xi=0.0$) y con un radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$ 21
- Figura 3.1** Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un anillo cuántico delgado con un electrón confinado en presencia de una impureza descentrada ($\xi=0.2 a_0^*$) y con un radio de externo $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$ 22
- Figura 3.2** Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un anillo cuántico delgado con un electrón confinado en presencia de una impureza cada vez más descentrada del centro del anillo ($\xi=0.6 a_0^*$) y con un radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$ 22
- Figura 4.** Anillo cuántico con radio externo de $4 a_0^*$ y radio interno de $3.9 a_0^*$, impureza centrada ($\xi=0.0$) y sección transversal de $0.1 a_0^*$. 29
- Figura 4.1** Anillo cuántico con radio externo de $4 a_0^*$ y radio interno de $3.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 2°k , 1.3°k , 0.6°k . Donde la magnetización en función del campo magnético aumenta o disminuye de forma oscilatoria. 30

Figura 4.2 Anillo cuántico con radio externo de $4a_0^*$ y radio interno de $3.9a_0^*$, y sección transversal de $0.1a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 2°k , 1.3°k , 0.6°k . Donde la capacidad calorífica en función del campo magnético aumenta o disminuye en forma oscilatoria.

31

Figura 5. Anillo cuántico muy delgado con radio externo de $1a_0^*$ y radio interno de $0.9a_0^*$, impureza centrada ($\xi=0.0$) y sección transversal de $0.1a_0^*$ con valores negativos de la energía debido a que la expresión paramagnética predomina mas.

32

Figura 5.1 Anillo cuántico con radio externo de $1a_0^*$ y radio interno de $0.9a_0^*$, y sección transversal de $0.1a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 20°k , 13.3°k , 6.6°k . Donde la magnetización en función del campo magnético aumenta o disminuye en forma oscilatoria.

33

Figura 5.2 Anillo cuántico con radio externo de $1a_0^*$ y radio interno de $0.9a_0^*$, y sección transversal de $0.1a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 2°k , 1.3°k , 0.6°k . Donde la capacidad calorífica en función del campo magnético aumenta o disminuye en forma oscilatoria.

35

ANEXOS

Pág.

1. Efecto del campo magnético sobre una partícula cargada situada en un potencial central 37
2. Hamiltoniano adimensional de una partícula de masa m^* y carga q situada en un campo central $V(r)$ bajo la influencia de un campo magnético \vec{B} perpendicular al plano de movimiento 42
3. Hamiltoniano adimensional de una donadora neutra D^0 que posee un electrón que se mueve en un anillo de espesor w bajo el efecto de un campo magnético y metodología para solucionar la ecuación de Shrodinger 46
4. Momento dipolar magnético de un sistema de anillos cuánticos. 53
5. Método de Galerkin en el subespacio para la rotación de un electrón en un anillo cuántico unidimensional (1D) 56
6. Capacidad calorífica de un electrón confinado dentro de un anillo cuántico 59

Resumen

TITULO: Influencia de una impureza donadora D^0 sobre la magnetización de anillos cuánticos

AUTOR: Fabián Ramírez Prada

Palabras Claves: Anillo Cuánticos, Espectro energético, Magnetización.

Descripción

Se estudia el espectro energético de una donadora neutra formada por un electrón y un ión positivo, donde el electrón se encuentra confinado en un anillo cuántico delgado y el ión positivo estará localizado fuera del anillo bajo el efecto de un campo magnético perpendicular al plano del anillo y homogéneo en todos los puntos del espacio. Se tendrá en cuenta que debido al efecto Aharonov Bohm (AB), la magnetización de anillos cuánticos varía en función del campo magnético en forma oscilatoria, la presencia de una impureza descentrada conduce a una amortiguación de estas oscilaciones. Siguiendo el bien conocido procedimiento de la aproximación adiabática, hemos deducido una ecuación de onda unidimensional con condiciones periódicas, la cual describe los estados más bajos relacionados con la rotación de un electrón dentro del anillo. Por otro lado, se analizarán las curvas de la magnetización promedio para un conjunto de anillos cuánticos donde cada uno de ellos tendrá confinado un electrón y un número cuántico magnético correspondiente a cada anillo en función del campo magnético y a su vez estudiaremos como la magnetización promedio para un conjunto de anillos cuánticos se comporta al variar la temperatura del sistema. En este trabajo también se estudiará la energía calorífica transferida al sistema y el cambio de temperatura que experimenta a través de las curvas de la capacidad calorífica en función del campo magnético y observaremos como este novedoso efecto se comporta para un conjunto de anillos cuánticos delgados.

*proyecto de Grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física. Director: Luis Francisco García Russi

Abstract

TITLE: Influence of a neutral donor impurity on the magnetization of quantum rings

AUTHOR: Fabian Ramirez Prada

Key Words: Quantum Rings, Energy Spectrum, Magnetization.

Description

We study the energy spectrum of a neutral donor consisting of an electron and a positive ion, where the electron is confined in a quantum ring thin and the positive ion will be located outside the ring under the effect of a magnetic field perpendicular to the plane of the ring and uniform at all points of space. It will be noted that due to the Aharonov Bohm (AB), the magnetization of quantum rings varies by oscillating magnetic field as the presence of an impurity leads to a buffer offset of these oscillations. Following the well-known procedure of the adiabatic approximation we have deduced a one-dimensional wave equation with periodic conditions, which describes the lowest states related to the rotation of an electron inside the ring. On the other hand, will analyze the average magnetization curves for a set of quantum rings, where each inmate have an electron and a magnetic quantum number corresponding to each ring depending on the magnetic field and in turn will look like the average magnetization a set of quantum rings behaves when varying the temperature of the system. In this work we also consider the heat energy is transferred to the system and the temperature change experienced by the heat capacity curves as a function of magnetic field and observe how it behaves this novel effect for a set of thin quantum rings.

*proyecto de Grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física. Director: Luis Francisco García Russi

INTRODUCCIÓN

La nanotecnología es el estudio, diseño, creación, síntesis, manipulación y aplicación de materiales, aparatos y sistemas funcionales a través del control de la materia a nano escala, y la explotación de fenómenos y propiedades de la materia a nano escala. Nano es un prefijo griego que indica una medida del orden de nanómetros (1 nanómetro= 10^{-9} m). Cuando se manipula la materia a escala tan minúscula de átomos y moléculas, se presentan fenómenos y nuevas propiedades. Por lo tanto, los científicos utilizan la nanotecnología para crear materiales, aparatos y sistemas novedosos poco costosos con propiedades únicas.

La nanociencia [1] aparece en la década de los 80 con Eric Drexler que permitió el desarrollo de la nanotecnología, la cual ha construido nanomáquinas que son capaces de elaborar por sí mismas otros componentes de tamaño molecular. Richard Feynman es considerado el padre de la nanociencia, quién en 1959 propuso fabricar productos con base en un reordenamiento de átomos y moléculas. En 1959, el gran físico escribió un artículo que analizaba cómo los ordenadores trabajando con átomos individuales podrían consumir poca energía y conseguir velocidades asombrosas.

Los diversos progresos de la nanociencia producirán los grandes avances tecnológicos que cambiarán el mundo. Se cree que la nanotecnología nos conducirá a una segunda revolución industrial en el siglo XXI. Se supone que numerosos avances para muchas industrias y la fabricación de nuevos materiales con propiedades extraordinarias se podrán desarrollar. Entre otras aplicaciones se podrán obtener materiales más fuertes que el acero pero con solamente diez por ciento del peso. También se podrán hacer nuevas aplicaciones informáticas con componentes increíblemente más rápidos.

En 1959, dos físicos en Israel, Yakir Aharonov y David Bohm, [2] se dieron cuenta de que los electrones pueden llegar a sentir incluso campos electromagnéticos escondidos, es decir, campos que existen en algún lugar, pero que son nulos allí donde están los electrones. La mecánica cuántica indica que un electrón puede detectar la presencia de un campo desde un lugar donde éste es nulo.

El Efecto Aharonov-Bohm, [2] llamado algunas veces Efecto Ehrenberg-Siday-Aharonov-Bohm, es un fenómeno mecano-cuántico en el cual una partícula cargada eléctricamente presenta una interacción medible con un campo electromagnético a pesar de estar confinada en una región en la que tanto el campo eléctrico E como el campo magnético B son nulos. El efecto descubierto por Aharonov y Bohm aparece si se realiza el llamado experimento AB (de las iniciales de los dos físicos). La propuesta de los científicos es una modificación del experimento de la doble rendija con electrones. Esta experiencia consiste en hacer chocar electrones contra una pantalla detectora después de haber pasado por una pared con un par de aberturas en forma de rendijas. Los resultados son sorprendentes: los electrones no llegan a la pantalla como simples partículas, sino que interfieren con ellos mismos y forman patrones de interferencia típicos de las ondas. El patrón de interferencia en forma de franjas se reproduce tantas veces como repetamos el experimento. El efecto fue comprobado experimentalmente sólo un año después, en 1960. Bob Chambers, físico de la Universidad de Bristol (Inglaterra) utilizó un microscopio electrónico como cañón de electrones, una doble rendija microscópica y un hilo de hierro de medio milímetro de largo y una micra de diámetro, suficientemente estrecho como para actuar como una "bobina" y confinar un campo magnético en su interior. Al realizar el experimento de la doble rendija se observaron, efectivamente, los desplazamientos en el patrón de franjas de interferencia de los haces de electrones. Más recientemente, en el año 2004, el efecto Aharonov-Bohm ha sido utilizado para cambiar las características eléctricas de nanotubos de carbono, concretamente para convertirlos de metales a semiconductores y viceversa, con prometedoras aplicaciones en la electrónica.

El nacimiento de un nuevo paradigma sistemas de baja dimensionalidad (SBD) y el gran interés en este tema por parte de los investigadores está relacionado, en primer lugar con la fabricación de las llamadas nanoestructuras semiconductoras [3], en las cuales se ha logrado una cuidadosa variación de la composición en aleación de semiconductores a escala atómica. Tradicionalmente las composiciones de micropartículas que existen en forma natural, tales como átomos y moléculas no se incluyen en el círculo de SBD, pero en el desarrollo reciente el uso de moléculas y materiales biológicos ha quitado los límites entre el área de la ciencia física y las ciencias de la vida. En adición, hay sistemas de gran interés, por ejemplo en la física de semiconductores de alta temperatura, donde los efectos de la dimensionalidad reducida son esenciales. Muchos de los objetos del estudio de SBD: superredes, pozos, hilos y puntos cuánticos están actualmente de moda y forman parte de la investigación de la nano-ciencia y de la nano-tecnología.

Un sistema de baja dimensionalidad es una estructura donde el movimiento de las micropartículas tales como electrón fonón o fotón, etc, es restringido y el número de grados de libertad en sus movimientos dentro de la estructura es menor que en el mundo de tres dimensiones.

Las superredes consisten en un arreglo secuencial alternado de capas de dos o más tipos diferentes de semiconductores, con espesores en la escala de los nanómetros dentro del rango de longitud característica de ondas de Broglie de los portadores de carga, ocasionando así que los niveles energéticos se desdoblén dando lugar a la aparición de minibandas. Se dice que un nivel energético no pertenece a un solo elemento de la estructura si no a todo el conjunto. En este sentido la superred se comporta como un sólido artificial, pero con una periodicidad mayor que la de cualquier sólido en bloque. Estas heteroestructuras exhiben comportamientos nuevos e interesantes en sus propiedades eléctricas

magnéticas y de transporte. También tiene aplicaciones como sensores de campo magnético y en la fabricación de láseres.

Un pozo cuántico (o «*quantum well*» en inglés) es la denominación que recibe un pozo de potencial que confina, en dos dimensiones, partículas que originalmente tenían libertad para moverse en tres dimensiones, forzándolas a ocupar una zona restringida a un plano. Los efectos del confinamiento cuántico se producen cuando el espesor del *pozo cuántico* es comparable a la longitud de onda de De Broglie de las partículas portadoras de energía (generalmente electrones y huecos). Estos portadores de energía solo podrán tomar valores discretos de energía. La discretización de los niveles de energía es considerada, como una de las manifestaciones más interesantes de la mecánica cuántica.

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

Un punto cuántico, generalmente es una nanoestructura semiconductor que confina el movimiento, en las tres direcciones espaciales, de los electrones de la banda de conducción, los huecos de la banda de valencia o los excitones (pares de enlaces de los electrones de banda conducción de banda y los huecos de banda de valencia). Los puntos cuánticos pueden tener diferentes aspectos, como el de una pastilla plana, una pirámide, una lente, una montaña o un volcán. Los puntos cuánticos se aplican en la fabricación de diodos emisores de luz o LEDs.

De los puntos cuánticos se derivan los Anillos Cuánticos, donde los Anillos Cuánticos son llamadas aquellas estructuras que poseen simetría axial y presentan una cavidad semiconductor en la región comprendida entre su radio

interno y externo [4]. El movimiento de los portadores de carga se restringe generalmente en esta región y gracias a su simetría axial del sistema, este movimiento se puede expresar mediante el uso de coordenadas cilíndricas, las cuales describen los movimientos radial, axial y azimutal. A diferencia de las otras estructuras, los anillos cuánticos tienen otro tipo de topología, la cual conduce a un enriquecimiento de las propiedades físicas que pueden ser observadas en estas estructuras [5]. Particularmente, debido al confinamiento periódico en la dirección azimutal el comportamiento de los portadores de carga en esta estructura debe tener un carácter diferente en presencia de un campo magnético externo.

En la actualidad existen muchas técnicas de fabricación de puntos cuánticos, entre las cuales se pueden mencionar la epitaxia de haces moleculares (MBE, *Molecular Beam Epitaxy*), la deposición de vapor químico metal orgánico (MOCVD, *Metalorganic Chemical Vapor Deposition*) y otras técnicas que permiten depositar capas de un material determinado como el arseniuro de Galio (*GaAs*) o el arseniuro de aluminio (*AlAs*), sobre un sustrato determinado. También se utiliza la técnica de autoensamblaje o técnica de Stranski-Krastanov, que permite la obtención de puntos cuánticos denominados puntos cuánticos autoensamblados[6].

Un cálculo más simple que ilustra todas estas propiedades puede realizarse para un modelo de anillo 1D, en el límite cuando el ancho del anillo tiende a cero. Los niveles energéticos para un electrón, como se muestra en el siguiente párrafo, se encuentran de manera exacta, y las propiedades mencionadas anteriormente son evidentes. Como fue encontrado en el artículo [5], la ecuación de Schrödinger para 2 electrones en un anillo 1D, también se puede resolver en una forma exacta, y la solución encontrada, a pesar de que esta es mucho más complicada, conduce a las propiedades del anillo 1D con 1 electrón. Las propiedades específicas de los anillos cuánticos 1D en presencia de un campo magnético externo y específicamente las oscilaciones de la energía del estado base, se llaman OSCILACIONES DE AHARONOV-BOHM (AB).

El análisis del modelo 2D del anillo con uno y dos electrones [7-8], muestra que a medida que el ancho del anillo se incrementa y el anillo poco a poco se transforma en un disco (el radio interno se disminuye), las oscilaciones de AB se apagan. Es decir, los fenómenos de AB son evidentes solamente cuando el ancho del anillo es suficientemente pequeño en comparación con el radio de la línea central. Una de las tareas del análisis teórico es establecer las condiciones, cuando el efecto de AB se manifiesta. Como fue establecido en los trabajos publicados anteriormente [9-14], cualquier perturbación que rompe la simetría axial de los anillos uno- y bidimensionales, producida por ejemplo, por los defectos estructurales, por la presencia de un campo eléctrico o una impureza, también conducen a un aniquilamiento de las oscilaciones AB.

1. Marco Teórico

1.1 D^0 Confinada en un anillo cuántico delgado

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

la naturaleza dieléctrica del cristal. Cuando una impureza es introducida dentro de una heteroestructura, la situación se hace considerablemente más compleja e interesante que en el bloque, debido principalmente a la presencia de un potencial de confinamiento. El confinamiento geométrico trae consigo algunos efectos interesantes: por un lado se tiene que la energía de enlace y la forma de la función de onda dependen notoriamente de la forma y de las dimensiones de dicho confinamiento, y por otro lado, la energía de enlace y la función de onda dependen de la posición de la impureza dentro de la heteroestructura [15].

1.2 Geometría del anillo cuántico

En este trabajo se considera un anillo cuántico muy delgado como se muestra en la figura 1.

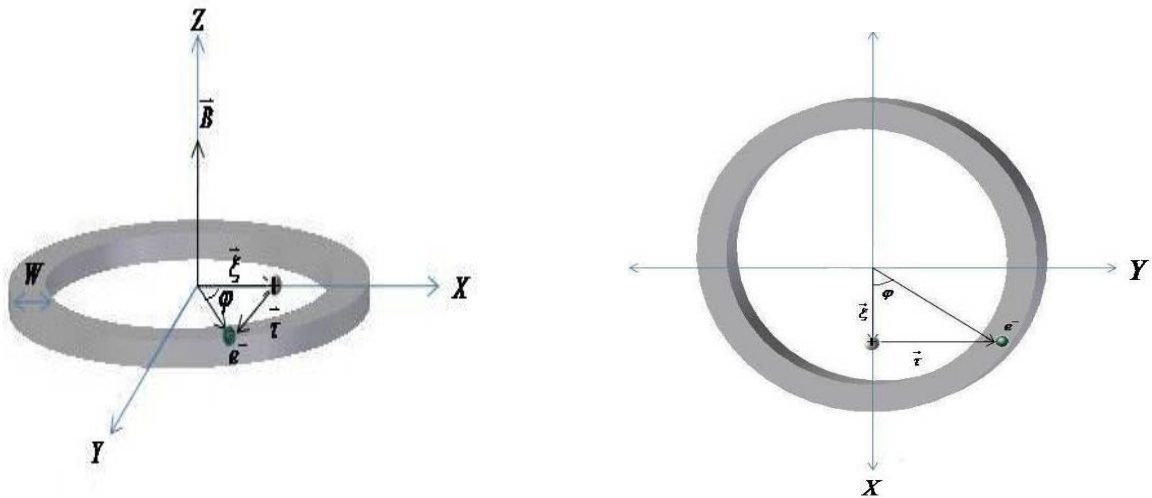


Figura 1. Esquema de una donadora D^0 confinada en un anillo cuántico

Una impureza donadora neutra D^0 puede describirse como un sistema compuesto por un centro cargado positivamente y un electrón. Supondremos que la impureza está localizada en el plano de simetría ($z=0$), y que su posición, a lo largo del eje x , está por la distancia ξ desde el origen de coordenadas, sin que se pierda la

generalidad en el problema, debido a la simetría que se tiene. El potencial de confinamiento dentro y fuera del anillo cuántico, se expresa en coordenadas cilíndricas, por la función $V(\rho, z, \varphi)$ que se expone a continuación:

$$V(\rho, z, \varphi) = \begin{cases} 0, & R_c - \frac{w}{2} < \rho < R_c + \frac{w}{2} \\ \infty, & \rho < R_c - \frac{w}{2}; \rho > R_c + \frac{w}{2} \end{cases} \quad (1)$$

Donde: $w \ll R_c$

Lo cual indica que el potencial es cero dentro del anillo cuántico, y presenta un valor infinito fuera del anillo cuántico. Para este modelo, se considerará que el electrón permanecerá siempre en el interior del anillo cuántico, debido a que el pozo de potencial actúa como una trampa para los portadores de carga.

1.3 Oscilaciones de Aharonov-Bohm para un anillo de 1D

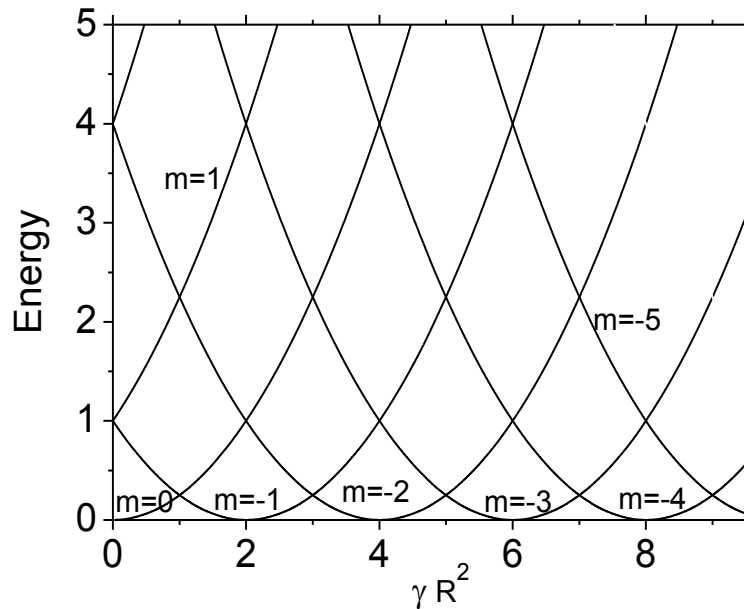
Para analizar el efecto AB en un anillo uniforme, es conveniente usar las coordenadas polares. En un anillo uniforme, sus radios interno $R_i(\varphi)$ y externo $R_e(\varphi)$ son constantes para diferentes ángulos, al igual como el ancho $W(\varphi)$ de su sección transversal, definida como la diferencia entre el radio externo e interno para determinado ángulo. Para analizar el movimiento del electrón confinado en este anillo en el marco de la aproximación adiabática, se plantea que la sección transversal tiene que ser muy pequeña $W(\varphi) \ll R_i(\varphi)$. Por lo tanto, podemos decir que el electrón estará circulando con un radio R casi constante (radio de la línea central) y podemos definir al anillo delgado, como aquel anillo que su mínimo de sección transversal sea mucho menor que su longitud mínima de radio interno [14].

Para explicar el efecto AB consideremos un modelo más sencillo con un potencial de confinamiento de barrera infinita, cero dentro de la región comprendida por el radio interno y externo e infinito por fuera. Este potencial solo depende de la coordenada azimutal, entonces la función de onda del electrón, con la masa efectiva m^* , en presencia del campo magnético es dependiente del número cuántico magnético m . Dada la solución más simple gracias a la simetría existente. $\Psi_m(\varphi) = e^{im\varphi}$. Mientras que la energía cinética correspondiente a este movimiento rotacional es $\frac{m^2}{R^2}$. De aquí en adelante utilizaremos las unidades adimensionales en las cuales las distancias se miden en unidades de radio de Bohr efectivo (a_0^* valor típico alrededor de 10 nm) y las energías en Rydberg efectivo (R_Y^* , valor típico alrededor 5 a 10 meV). El campo magnético externo y homogéneo, \vec{B} orientado a lo largo del eje de simetría está definido a través de su potencial vectorial $\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$, descrito en unidades adimensionales a través del parámetro $\gamma = \frac{\hbar\omega_p}{R_Y^*}$, donde $\omega_p = \frac{eB}{2m^*c}$ es la frecuencia ciclotrónica. El aporte del campo magnético a la energía total de electrón $E(\gamma)$ dentro del anillo de radio R tiene dos términos, uno es paramagnético γm , que ocasiona una disminución en la energía del electrón para los números cuánticos negativos ($m=1, 2, 3, \dots$) y el otro término es el diamagnético, que es proporcional a $\frac{\gamma^2 R^2}{4}$, produce un aumento de la energía del electrón.

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

La competencia entre estos dos términos conduce a una oscilación de la energía del estado base. El resultado de estas oscilaciones se manifiesta por la existencia de los números mágicos para dos efectos importantes: la energía del estado base

se anula para valores equidistantes de intensidad de campo magnético definidos por los números mágicos pares $\gamma_{2m} = \frac{2|m|}{R^2}$, la brecha entre el primer estado excitado se anula para valores equidistantes de intensidad de campo magnético definidos por los números mágicos impares $\gamma_{2m+1} = \frac{|2m+1|}{R^2}$. En este último caso debe observarse un efecto de transparencia del anillo ante el flujo magnético, debido a que el electrón no requiere la adición de energía para realizar la transición del estado base al estado excitado más cercano. Esta es la manera más clara de explicar el efecto Aharonov-Bohm para un anillo cuántico de forma circunferencial, con sección transversal uniforme y un electrón en su región de confinamiento.

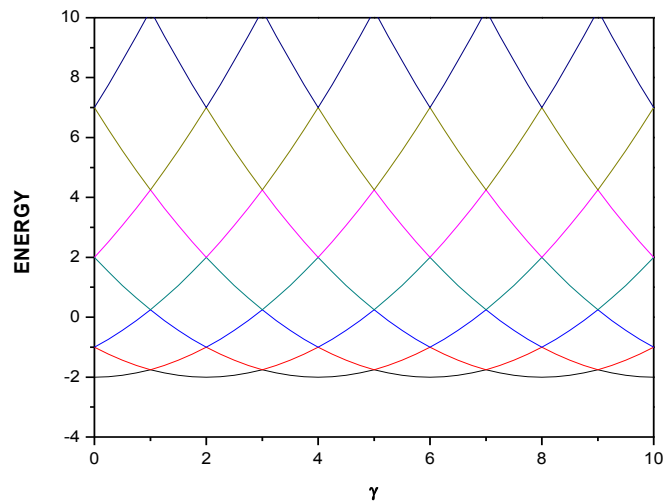


AUTOR: ILIA DAVIDOVICH MIKHAILOV

Figura 2. Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un QR 1D

Un conjunto de las propiedades de los anillos cuánticos 1D relacionados con los gráficos presentados en la Fig. 2, corresponde el efecto de Aharonov-Bohm.

Hay que notar que este efecto se presenta únicamente cuando el anillo es muy delgado. Por ejemplo, el análisis de los anillos 2D muestran que cuando el ancho del anillo se incrementa debido a disminución del radio interno, es decir, cuando el anillo paulatinamente se transforma en un disco, las AB oscilaciones desaparecen sucesivamente y se puede observar que en presencia de una impureza descentrada aparecen los estados localizados como se muestra en la Fig. 3, 3.1, 3.2,



AUTOR: FABIAN RAMIREZ PRADA

Figura 3. Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un anillo cuántico delgado con un electrón confinado en presencia de una impureza centrada ($\xi = 0.0$) y con un radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$

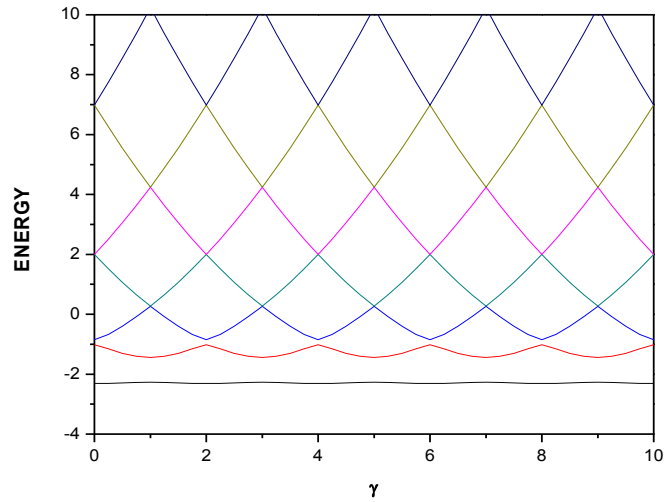


Figura 3.1 Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un anillo cuántico delgado con un electrón confinado en presencia de una impureza descentrada ($\xi=0.2 a_0^*$) y con un radio de externo $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$

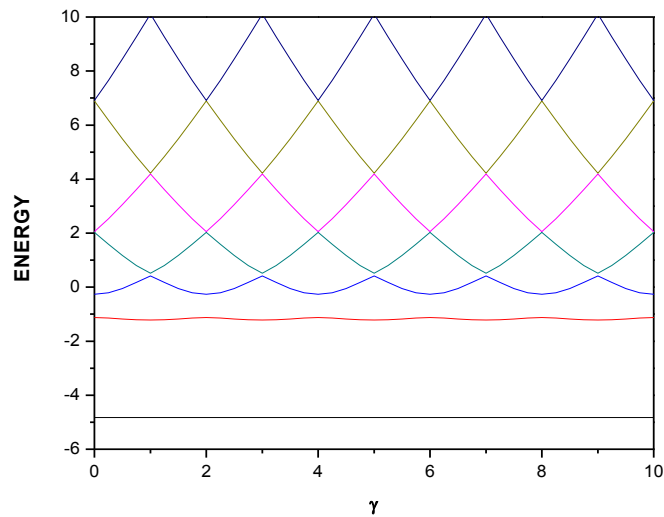


Figura 3.2 Oscilaciones de Aharonov-Bohm en un anillo cuántico delgado con un electrón confinado en presencia de una impureza cada vez más descentrada del centro del anillo ($\xi=0.6 a_0^*$) y con un radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$

1.4 Hamiltoniano del sistema

Este modelo consta de un electrón confinado dentro del anillo cuántico con una impureza cargada positivamente, la cual se encuentra fuera del anillo cuántico. En el marco de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano del sistema en presencia de un campo magnético en la dirección perpendicular al plano del anillo cuántico, en unidades adimensionales es:

$$\bar{H} = -\frac{1}{\bar{R}^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{2}{\sqrt{\tilde{\xi}^2 + \bar{R}^2 - 2\tilde{\xi}\bar{R} \cos \varphi + \frac{w^2}{12}}} + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \gamma^2 \bar{R}^2 \quad (3)$$

(Ver anexo 2)

Aquí el radio de Bohr $a_0^* = \hbar^2 \varepsilon / m^* e^2$, se utiliza como unidad de longitud, el Rydberg efectivo $Ry^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}}$ como unidad de energía y el parámetro $\gamma = e\hbar B / 2m^* c Ry^*$ como la unidad del campo magnético, siendo m^* , la masa efectiva de electrón y ε la constante dieléctrica. El potencial de confinamiento $V(\rho, z, \varphi)$ es igual a cero dentro del anillo cuántico, e infinito fuera del anillo cuántico.

1.5 Anillo cuántico magnetizado en presencia de una impureza donadora D^0

Dentro de los átomos de un material magnético se producen Momentos Dipolares Magnéticos al girar los electrones en sus órbitas. Adicionalmente los electrones, aún cuando no estén orbitando, tienen un Momento Dipolar intrínseco llamado spin. El spin es un efecto cuántico-relativista que no tiene análogo en la Física clásica; inicialmente se pensó que el electrón era una esfera cargada que estaba siempre girando y por eso se le llamó spin que en inglés significa giro; pero este modelo clásico no se adapta a los hechos experimentales, ya que actualmente se reconoce al electrón como una de las partículas elementales del universo y no hay evidencias de que los electrones tengan alguna estructura interna ni tamaño. Además no explica los valores discretos (cuánticos) de su Momento Magnético. El número que identifica el estado de spin del electrón solo puede tener dos valores: $+\frac{1}{2}$ ó $-\frac{1}{2}$.

Clásicamente podemos modelar todos los Momentos Dipolares Magnéticos, orbitales y/o de spin, como si fueran producidos siempre por corrientes, es decir, podemos simular el efecto magnético de cada átomo como un pequeño Momento Dipolar Magnético m .

Llamaremos al vector Magnetización M de un material como el Momento Dipolar Magnético por unidad de volumen. Si n es el número de átomos por unidad de volumen y cada átomo tiene un Momento Dipolar Magnético m , tenemos:

$$M = n m. \quad (4)$$

Debido a la composición química y a la agitación térmica, cada átomo tiene diferente momento magnético y en direcciones aleatorias, en ese caso m representa el promedio macroscópico de todos los átomos.

Ahora consideraremos un sistema con un solo electrón en simetría esférica y sin contribución orbital. El momento magnético P , es un vector cuantitativamente representado por la ecuación:

$$P = -g\mu_b S \quad (5)$$

Donde S es el momento angular del espín, g es la constante giromagnética y μ_b es el magnetón de Bohr ($\mu_b = \frac{e\hbar}{2m_e} = 0.93 \times 10^{-20} \text{ erg.gauss}^{-1}$).

La hamiltoniana que describe la interacción de este momento con el campo aplicado B viene dada por:

$$H = -PB = g\mu_b S \cdot B \quad (6)$$

Esta hamiltoniana al operar sobre el espín tiene dos valores cuyas energías son:

$E = m_i g \mu_b B$ Con $m_i = \pm \frac{1}{2}$ y la diferencia de energía es $\Delta E = g \mu_b B$. Cuando B es 25 kilogauss, esta diferencia para el electrón libre con $g = 2.0023$ es alrededor de 2.3 cm^{-1} , muy pequeña comparada con KT , la energía térmica (205 cm^{-1} a temperatura ambiente). Ambos estados estarán poblados pero con un ligero exceso el estado fundamental.

La magnitud de la proyección del momento magnético en la dirección del campo es μ_n para el electrón situado en el número cuántico n , viene dado por la derivada parcial de la energía en este estado E_n , respecto del campo aplicado:

$$\mu_n = -\frac{\partial E_n}{\partial B} = -m_s g \mu_b \quad (7)$$

Para determinar el momento magnético global de una muestra de un material, debemos considerar la suma de los momentos individuales de todos los estados según sus pesos indicados por las poblaciones de Boltzmann. Calcular la

probabilidad P_n , de estados discretos con energía E_n , en equilibrio térmico, se utiliza la expresión:

$$P_n = \frac{N_n}{N} = \frac{e^{\frac{-E_n}{KT}}}{\sum_n e^{\frac{-E_n}{KT}}} \quad (8)$$

Donde N_n representa la población del estado n , y N la población total de todos los estados existentes. Estas poblaciones contribuyen a la suma de los momentos magnéticos de los estados individuales los cuales conducen al momento magnético macroscópico total M que para una mol vale:

$$M = \frac{N \sum_{m_s=-1/2}^{1/2} \mu_n e^{-\frac{E_m}{k_B T}}}{\sum_{m_s=-1/2}^{1/2} e^{-\frac{E_m}{K_B T}}} \quad (9)$$

De manera análoga, el momento magnético de un conjunto de anillos cuánticos cada uno portando un electrón confinado, en diferentes niveles energéticos se puede expresar mediante:

$$\overline{M} = \frac{\sum_{m=0}^n p_m e^{-\frac{E_m}{KT}}}{\sum_{m=0}^n e^{-\frac{E_m}{KT}}} \quad (10)$$

Donde $p_m = \mu_b m$ (11) para valores de $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ m es denominado número cuántico magnético y μ_b es la constante denominada magnetón de Bohr. Si insertamos la expresión (11) en la expresión (10) tendremos:

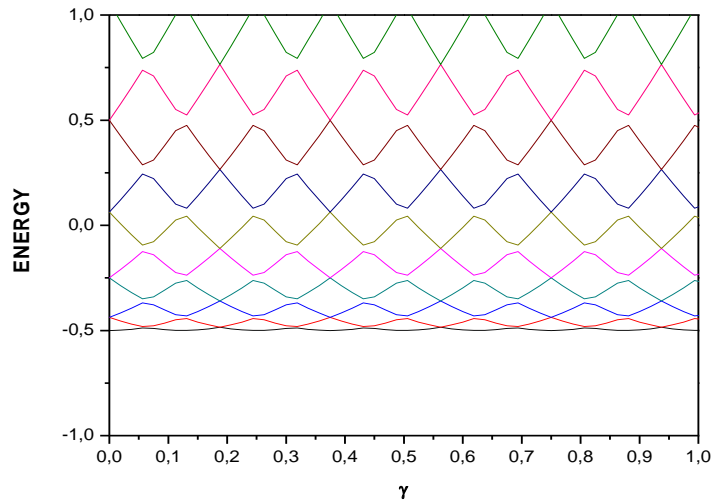
$$\frac{\overline{M}}{\mu_b} = \frac{\sum_{m=0}^n m e^{-\frac{E_m(\gamma)}{k_B T}}}{\sum_{m=0}^n e^{-\frac{E_m(\gamma)}{k_B T}}} \quad (12)$$

(Ver anexo 4.)

2. Resultados y discusiones

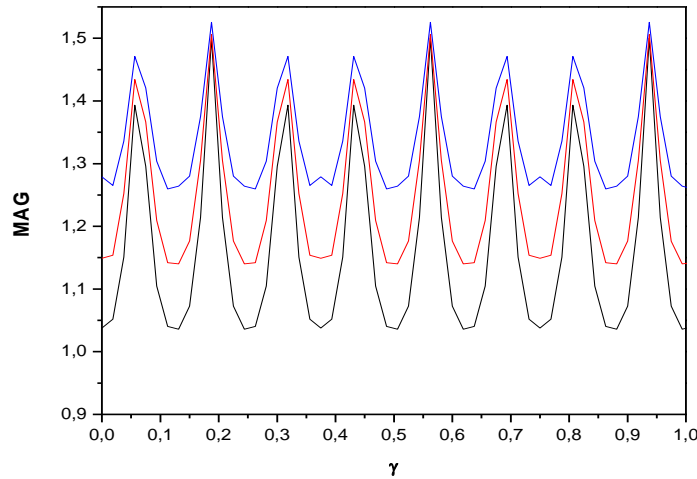
Analizaremos cómo se comportan las curvas de las oscilaciones de Aharonov Bohm para un conjunto de anillos cuánticos delgados en presencia de una donadora D^0 bajo el efecto de un campo magnético y como son afectadas estas curvas al descentrar la impureza. A su vez analizaremos la magnetización de este conjunto de anillos cuánticos delgados en función del campo magnético al ir variando la temperatura del sistema. También analizaremos cómo se comporta la capacidad calorífica en función del campo magnético de un conjunto de anillos cuánticos para varios valores de la temperatura.

Partimos de un anillo cuántico muy delgado con radio externo de $4a_0^*$ y radio interno de $3.9a_0^*$ esto significa que la sección transversal es de $0.1a_0^*$ y con la impureza centrada ($\xi=0.0$) ver figura 4 vemos como las oscilaciones de Aharonov Bohm se presentan en el anillo debido al incremento y disminución de la energía producidos por los campos diamagnético y paramagnético respectivamente.



AUTOR: FABIAN RAMIREZ PRADA

Figura 4. Anillo cuántico con radio externo de $4a_0^*$ y radio interno de $3.9a_0^*$, impureza centrada ($\xi=0.0$) y sección transversal de $0.1a_0^*$ Para el mismo anillo, con radio externo de $4a_0^*$ y radio interno de $3.9a_0^*$ esto significa que la sección transversal es de $0.1a_0^*$ y con la impureza centrada ($\xi=0.0$) ver figura 4.1 observamos las curvas de magnetización en función del campo magnético y vemos tres curvas diferente para tres valores de temperatura de 2°K , 1.3°K , 0.6°K y vemos como oscilan estas curvas en forma periódica para la figura 4.1. Teniendo en cuenta que la energía es proporcional a la temperatura podemos observar que en las oscilaciones de Aharonov Bohm para los números mágicos pares en los puntos equidistantes donde se presentan las corrientes persistentes, habrá una disminución del valor de la magnetización. Para los números mágicos impares donde el electrón no necesita una energía adicional para pasar de su estado base a su primer estado excitado (puntos de transparencia) habrá un incremento de la magnetización ya que su energía disminuye por lo tanto también lo hace la temperatura.



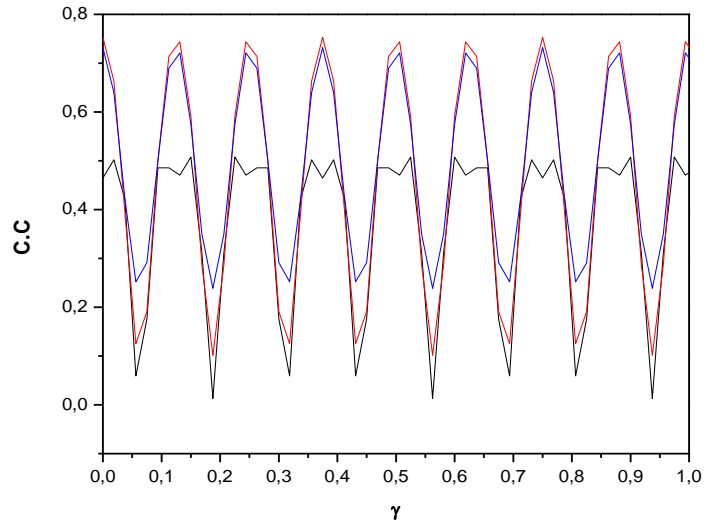
AUTOR: FABIAN RAMIREZ PRADA

Figura 4.1 Anillo cuántico con radio externo de $4a_0^*$ y radio interno de $3.9a_0^*$, y sección transversal de $0.1a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 2°k, 1.3°k, 0.6°k. Donde la magnetización en función del campo magnético aumenta o disminuye de forma oscilatoria.

Tomando el mismo anillo cuántico de radio externo $4a_0^*$ y radio interno de $3.9a_0^*$ y sección transversal de $0.1a_0^*$, con impureza centrada ($\xi=0.0$) y tres valores de temperatura de 2°K, 1.3°K, 0.6°K respectivamente para cada curva de la capacidad calorífica en función del campo magnético vemos como oscilan en forma periódica como se muestra en la figura 4.2.

Si observamos de nuevo las oscilaciones de Aharonov Bohm para el anillo cuántico ya mencionado vemos que para los puntos equidistantes de los números mágicos pares donde se presentan las corrientes persistentes la capacidad calorífica en esos puntos aumenta su valor a diferencia de sus puntos equidistantes de los números mágicos impares ya que en los puntos de transparencia el electrón no necesita de una energía adicional para saltar de su estado base a su primer estado excitado y por lo tanto si no hay incremento de la energía no habrá incremento de la temperatura por lo tanto existirá un

decaimiento de la capacidad calorífica para los tres valores de temperatura mostrados en la figura 4.2



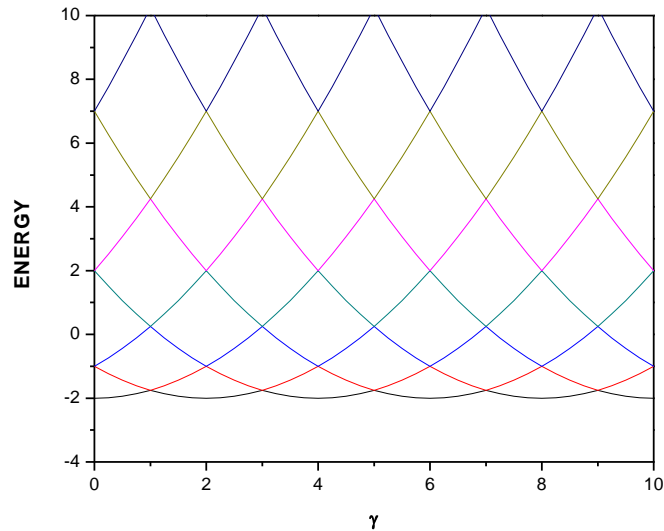
AUTOR: FABIAN RAMIREZ PRADA

Figura 4.2 Anillo cuántico con radio externo de $4a_0^*$ y radio interno de $3.9a_0^*$, y sección transversal de $0.1a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 2°K , 1.3°K , 0.6°K . Donde la capacidad calorífica en función del campo magnético aumenta o disminuye en forma oscilatoria.

A continuación estudiaremos otro anillo donde cambiaremos el radio externo y radio interno y su temperatura será a un mayor que en el caso anterior.

Partimos de nuevo de un anillo cuántico delgado con radio externo de $1a_0^*$ y radio interno de $0.9a_0^*$ esto significa que la sección transversal es de $0.1a_0^*$ y con la impureza centrada ($\xi=0.0$) ver figura 5. Vemos como las oscilaciones de Aharanov Bohm se presentan debido al crecimiento y disminución de la energía producidos por los campos diamagnéticos y paramagnéticos y al igual que el caso anterior vemos que para las oscilaciones de Aharanov Bohm se presenta valores

negativos de la energía debido a el termino paramagnético de la ecuación (2) predomina más que los otros dos términos de la misma ecuación.

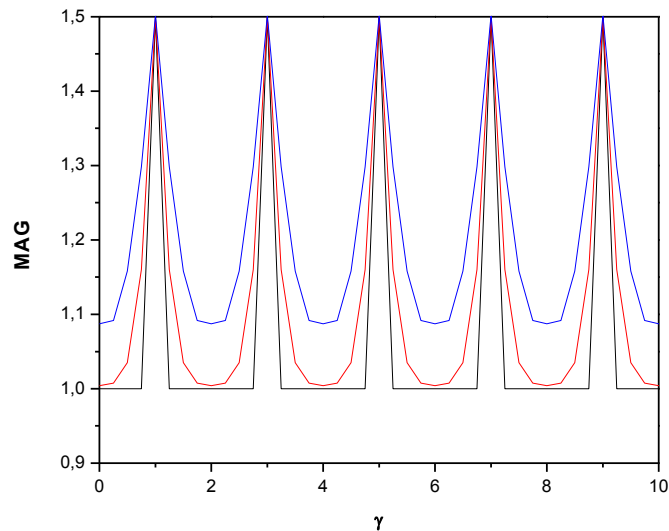


AUTOR: FABIAN RAMIREZ PRADA

Figura 5. Anillo cuántico muy delgado con radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, impureza centrada ($\xi=0.0$) y sección transversal de $0.1 a_0^*$ con valores negativos de la energía debido a que la expresión paramagnética predomina mas.

Para el mismo anillo con radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$ esto significa que la sección transversal es de $0.1 a_0^*$ y con la impureza centrada ($\xi =0.0$) ver figura 5.1 observamos las curvas de magnetización en función del campo magnético y vemos tres curvas diferente para tres valores de temperatura de 20°K , 13.3°K , 6.6°K y vemos como oscilan estas curvas en forma periódica Ver figura 5.1 podemos observar el mismo patrón de comportamiento que se observo en la grafica 4.1 donde las oscilaciones de la energía de la figura 5 en los puntos equidistantes para los números mágicos pares donde se presentan la corrientes

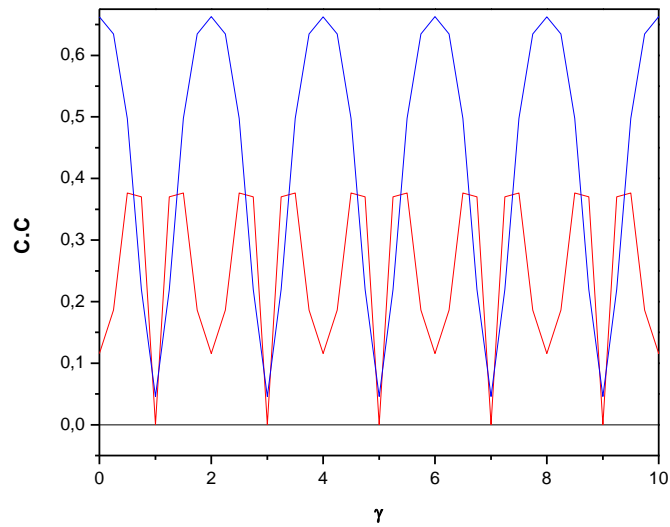
persistente, la magnetización disminuye de forma oscilatoria como se muestra en la figura 5 y para valores equidistantes de los números mágicos impares la magnetización aumenta ya que en los números mágicos impares se presentan los puntos de transparencia donde el electrón no necesita una energía adicional para pasar de su estado base a su primer estado excitado. Lo cual quiere decir que al no haber un incremento de la energía no habrá un incremento de la temperatura ya que la energía y la temperatura son directamente proporcionales y al disminuir la temperatura aumenta la magnetización.



AUTOR: FABIAN RAMIREZ PRADA

Figura 5.1 Anillo cuántico con radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 20°K , 13.3°K , 6.6°K . Donde la magnetización en función del campo magnético aumenta o disminuye en forma oscilatoria.

Tomando el mismo anillo cuántico de radio externo $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$ y sección transversal de $0.1 a_0^*$, con impureza centrada ($\xi=0.0$) y tres valores de temperatura de 20°K , 13.3°K , 6.6°K respectivamente para cada curva de la capacidad calorífica en función del campo magnético vemos como oscilan en forma periódica para los valores de 13.3°K , 6.6°K . Para la temperatura de 20°K permanece constante debido a que para esta temperatura no hay cambio de la energía debido a que es un valor más grande que en el caso anterior. Si tomamos las oscilaciones de Aharonov Bohm de la figura 5 observamos que para puntos equidistantes de los valores de los números mágicos pares donde se presentan las corriente persistentes la capacidad calorífica en esos puntos aumenta su valor a diferencia de los valores de los puntos equidistantes de los números mágicos impares la capacidad calorífica es menor debido a que en los puntos de transparencia no se requiere de energía para que un electrón pase de su estado base a su primer estado excitado y al no haber incremento de energía no habrá incremento de la capacidad calorífica y por esos en estos puntos de transparencia la capacidad calorífica en función del campo magnético disminuye. Ver figura 5.2



AUTOR: FABIAN RAMIREZ PRADA

Figura 5.2 Anillo cuántico con radio externo de $1 a_0^*$ y radio interno de $0.9 a_0^*$, y sección transversal de $0.1 a_0^*$ y con una impureza centrada ($\xi=0.0$) y para cada curva su respectiva temperatura de 2°k , 1.3°k , 0.6°k . Donde la capacidad calorífica en función del campo magnético aumenta o disminuye en forma oscilatoria.

CONCLUSIONES

Cuando se tiene la donadora neutra y su impureza centrada en el centro de un anillo cuántico delgado y su electrón confinado puede rotar a lo largo del anillo, al someter este sistema a un campo magnético perpendicular al plano del anillo homogéneo en todos los puntos del espacio se obtienen las oscilaciones de Aharonov-Bohm. Las intersecciones de las curvas con su vecina próxima generan las corrientes persistentes y los puntos de transparencia donde el electrón no necesita de una energía adicional para realizar una transición del estado base al primer estado excitado. Cuando la impureza se descentra, pero el electrón confinado rota a lo largo del anillo, en presencia del campo magnético perpendicular al plano del anillo, el electrón no rota si no que oscila dando por resultado los estados localizados, efecto que ocurre cuando la distancia entre el centro de la impureza y el electrón es muy pequeña.

En este trabajo se demostró como la magnetización en función del campo magnético aumenta cuando no hay incremento de la energía, debido a que no hay aumento de la temperatura ya que la energía y la temperatura son directamente proporcionales y al mismo tiempo se puede concluir que en la magnetización en función del campo magnético disminuye si hay un aumento de la temperatura para el conjunto de anillos cuánticos.

También se demostró que la capacidad calorífica en función del campo magnético para el conjunto de anillos cuánticos aumenta si hay un incremento de la energía para el sistema ya que al aumentar la energía también aumenta la temperatura del sistema y a su vez crece la capacidad calorífica y al disminuir la temperatura del sistema también lo hará la capacidad calorífica.

ANEXOS

1. Efecto del campo magnético sobre una partícula cargada y sobre un potencial central

Los niveles de energía de una partícula en un potencial central no dependen del número cuántico acimutal m . Esta dependencia tiene lugar cuando se sitúa la partícula en un campo magnético uniforme \vec{B} (Si \vec{B} es uniforme sus derivadas espaciales son nulas).

El Hamiltoniano de una partícula de masa m^* y carga q que se mueve en un campo central $V(r)$ bajo la influencia de un campo magnético B , se encuentra de la siguiente manera:

De la teoría del electromagnetismo clásico, el vector potencial \vec{A} correspondiente a un campo magnético uniforme se puede escribir como:

$$\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}) \quad (1)$$

Aplicando el operador $\vec{\nabla} \times$ por la izquierda, se sigue que:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{\nabla} \times \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times (\vec{B} \times \vec{r}) \quad (2)$$

Teniendo en cuenta que:

$$\vec{\nabla} \times (\vec{C} \times \vec{D}) = \vec{C}(\vec{\nabla} \cdot \vec{D}) - \vec{D}(\vec{\nabla} \cdot \vec{C}) + (\vec{D} \cdot \vec{\nabla})\vec{C} - (\vec{C} \cdot \vec{\nabla})\vec{D} \quad (3)$$

Se tiene:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \frac{1}{2} \vec{\nabla} \times (\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{2} [\vec{B}(\vec{\nabla} \cdot \vec{r}) - (\vec{B} \cdot \vec{\nabla})\vec{r}] = \frac{1}{2} [3\vec{B} - \vec{B}] = \vec{B} \quad (4)$$

Cuando la carga se sitúa en un campo magnético \vec{B} , su momento lineal \vec{p} se transforma en

$$\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \quad (5)$$

Siendo c la velocidad de la luz.

El Hamiltoniano de la partícula está dado por:

$$\vec{H} = \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 + V(r) = \hat{H}_0 - \frac{q}{2m^*c} (\vec{p} \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{p}) + \frac{q^2}{2m^*c^2} \vec{A}^2 \quad (6)$$

Donde

$$\vec{H}_0 = \frac{p^2}{2m^*} + V(r) \quad (7)$$

Que corresponde al Hamiltoniano de la partícula cuando el campo magnético \vec{B} no está presente.

El término $\vec{p} \cdot \vec{A}$ se calculo por analogía con el conmutador:

$$[\hat{p}, \hat{F}(x)] = -i\hbar \frac{d}{dx} \hat{F}(x) \quad (8)$$

Por tanto:

$$(\vec{p} \cdot \vec{A})|\psi\rangle = -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A})|\psi\rangle - i\hbar\vec{A} \cdot \vec{\nabla}|\psi\rangle = -i\hbar(\vec{\nabla} \cdot \vec{A})|\psi\rangle + \vec{A} \cdot \vec{p}|\psi\rangle \quad (9)$$

Téngase en cuenta que cuando $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ es válido el gauge de Coulomb y

$\vec{A} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{A}$, es decir:

$$\vec{p} \cdot \vec{A} - \vec{A} \cdot \vec{p} = -i\hbar(\nabla \cdot \vec{A}) = 0 \rightarrow \vec{A} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{A} \quad (10)$$

Considerando la ecuación (1), se tiene:

$$\vec{A} \cdot \vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r}) \cdot \vec{p} = \frac{1}{2}\vec{B} \cdot (\vec{r} \times \vec{p}) = \frac{1}{2}\vec{B} \cdot \vec{L} \quad (11)$$

Donde \vec{L} es el operador de momento angular orbital de la partícula.

Combinando las ecuaciones (10) y (11) se obtiene que:

$$\vec{A} \cdot \vec{p} = \vec{p} \cdot \vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \cdot \vec{L} \quad (12)$$

que al ser reemplazada en la ecuación (6), se obtiene:

$$\vec{H} = \hat{H}_0 - \frac{q}{m^*c} \vec{A} \cdot \vec{p} + \frac{q^2}{2m^*c^2} \vec{A}^2 = \hat{H}_0 - \frac{q}{2m^*c} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{2m^*c^2} \vec{A}^2 \quad (13)$$

$$\vec{H} = \hat{H}_0 - \vec{\mu}_L \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{2m^*c^2} \vec{A}^2 \quad (14)$$

donde:

$$\vec{\mu}_L = \frac{q}{2m^*c} \vec{L} = \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{L} \quad (15)$$

Siendo $\vec{\mu}_L$ el momento dipolar magnético orbital de la carga q , el cual se origina por el movimiento orbitante de la carga alrededor del centro del potencial, y μ_B se conoce con el nombre de magnetón de Bohr, dado por:

$$\mu_B = \frac{q\hbar}{2m^*c} \quad (16)$$

El término $-\vec{\mu}_L \cdot \vec{B}$ representa la energía resultante de la interacción entre el momento dipolar magnético orbital de la partícula $\vec{\mu}_L$ y el campo magnético \vec{B} . Nótese que si la carga q tiene un spin intrínseco el movimiento de spin podría originar un momento dipolar magnético de spin $\vec{\mu}_S = \frac{q\vec{S}}{2m^*c}$ el cual cuando interacciona con un campo magnético externo de \vec{B} genera un término de energía $-\vec{\mu}_S \cdot \vec{B}$ que debe ser adicionado al Hamiltoniano.

El cuadrado del potencial vectorial \vec{A} , se obtiene de la siguiente manera:

$$\vec{A}^2 = \frac{1}{4}(\vec{B} \times \vec{r}) \cdot (\vec{B} \times \vec{r}) = \frac{1}{4} [B^2 r^2 - (\vec{B} \cdot \vec{r})^2]$$

que permite escribir la ecuación (6) de la siguiente forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m^*} \vec{p}^2 + V(r) - \frac{q}{2m^*c} \vec{B} \cdot \vec{L} + \frac{q^2}{8m^*c^2} [B^2 r^2 - (\vec{B} \cdot \vec{r})^2] \quad (17)$$

que corresponde al Hamiltoniano de una partícula de carga q moviéndose en un potencial central $V(r)$ bajo la influencia de un campo magnético \vec{B} .

Teniendo en cuenta que en la representación de coordenadas o espacio de coordenadas:

$$\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla} \Rightarrow p^2 = -\hbar^2\nabla^2 \quad (18)$$

$$\vec{L} = -i\hbar\vec{r} \times \vec{\nabla} \quad (19)$$

Tomando \vec{B} en la dirección de z, $\vec{B} = B\vec{z}$, $\vec{L} = L_z\vec{z}$, $r^2 = \rho^2$, $q = -e$, la expresión

(17) puede escribirse como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(r) + \frac{eB}{2m^*c}L_z + \frac{1}{2}m^*\frac{e^2B^2\rho^2}{4m^{*2}c^2} \quad (20)$$

Teniendo en cuenta que la frecuencia de Larmor está dada por:

$$\omega_L = \frac{eB}{2m^*c}, \quad (21)$$

la expresión para el Hamiltoniano dada por la (20) se puede escribir como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(r) + \omega_L L_z + \frac{1}{2}m^*\omega_L^2\rho^2 \quad (22)$$

2. Hamiltoniano adimensional de una partícula de masa m^* y carga q situada en un campo central $V(r)$ bajo la influencia de un campo magnético \vec{B} perpendicular al plano de movimiento

El Hamiltoniano de una partícula de masa m^* y carga q que se mueve en un campo central $V(r)$ bajo la influencia de un campo magnético B , esta dado por:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(r) + \omega_L L_z + \frac{1}{2} m^* \omega_L^2 \rho^2 \quad (1)$$

Para encontrar el Hamiltoniano adimensional se suelen utilizar las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} r &= \tilde{r} a_0^*, \text{ siendo } a_0^* \text{ la unidad de longitud denominada radio de Bohr efectivo} \\ E &= \tilde{E} R_y^*; \text{ siendo } R_y^* \text{ la unidad de energia denominada Ridberg efectivo} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\rho = \tilde{\rho} a_0^* \Rightarrow \rho^2 = \tilde{\rho}^2 a_0^{*2}; \nabla^2 = \Delta; \Delta = \frac{1}{a_0^{*2}} \tilde{\Delta}; \rho = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (3)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}; \gamma = \frac{\hbar \omega_L}{R_y^*}; \tilde{V}(\tilde{r}) = \frac{V(\tilde{r})}{R_y^*} \quad (4)$$

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon r}; r = \tilde{r} a_0^*; V(\tilde{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon \tilde{r} a_0^*}; \tilde{V}(\tilde{r}) = \frac{V(\tilde{r})}{R_y^*} \quad (5)$$

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2}; R_y^* = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}; R_y^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} \quad (6)$$

$$r^2 = \tilde{r}^2 a_0^{*2}; \partial(r^2) = \partial(\tilde{r}^2 a_0^{*2}) = a_0^{*2} \partial(\tilde{r}^2) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial r^2} = \frac{\partial}{a_0^{*2} \partial(\tilde{r}^2)} \quad (7)$$

Con lo cual se consigue que:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} \tilde{\Delta} + V(\tilde{r}) + i\hbar\omega_L \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} m^* \omega_L^2 \tilde{\rho}^2 a_0^{*2} \quad (8)$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} \tilde{\Delta} + \tilde{V}(\tilde{r}) R_y^* + i\hbar\omega_L \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} m^* \omega_L^2 \tilde{\rho}^2 a_0^{*2} \quad (9)$$

Dividiendo por R_y^* , se obtiene la siguiente expresión para el Hamiltoniano adimensional:

$$\tilde{H} = \frac{\hat{H}}{R_y^*} = -\frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} \tilde{\Delta} + \tilde{V}(\tilde{r}) + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{\rho}^2 \quad (10)$$

Teniendo en cuenta la definición Ridberg efectivo, el primer término se reduce a:
 $\tilde{\Delta}$

El segundo término corresponde al potencial electrostático adimensional, el cual se obtiene a partir del potencial electrostático, de la siguiente manera:

$$V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon r} \quad (11)$$

Teniendo en cuenta que $r = \tilde{r} a_0^*$:

$$V(\tilde{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon \tilde{r} a_0^*} \quad (12)$$

Dividiendo por R_y^* se obtiene:

$$\tilde{V}(\tilde{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon\tilde{r}a_0^*} = -\frac{e^2}{\varepsilon\tilde{r}a_0^*} \frac{2m^*a_0^{*2}}{2m^*a_0^{*2}} = -\frac{2m^*a_0^*e^2}{\varepsilon\tilde{r}\hbar^2} = -\frac{2m^*\left(\frac{\hbar^2\varepsilon}{m^*e^2}\right)e^2}{\varepsilon\tilde{r}\hbar^2} \quad (13)$$

Simplificando, se tiene:

$$\tilde{V}(\tilde{r}) = -\frac{2}{\tilde{r}} \quad (14)$$

Nótese que el tercer término se obtiene simplemente teniendo en cuenta la

definición de $\gamma = \frac{\hbar\omega_L}{R_y^*}$, así:

$$\frac{i\hbar\omega_L}{R_y^*} \frac{\partial}{\partial\varphi} = i\left(\frac{\hbar\omega_L}{R_y^*}\right) \frac{\partial}{\partial\varphi} = i\gamma \frac{\partial}{\partial\varphi} \quad (15)$$

El cuarto término se obtiene sustituyendo el valor de $R_y^* = \frac{\hbar^2}{2m^*a_0^{*2}}$, así:

$$\frac{\frac{1}{2}m^*\omega_L^2\rho^2}{R_y^*} = \frac{\frac{1}{2}m^*\omega_L^2\rho^2}{R_y^{*2}} R_y^* = \frac{1}{2}m^* \frac{\hbar^2}{2m^*a_0^{*2}} \frac{\omega_L^2\tilde{\rho}^2a_0^{*2}}{R_y^{*2}} = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2\omega_L^2}{R_y^{*2}} \tilde{\rho}^2 = \frac{1}{4}\gamma^2\tilde{\rho}^2 \quad (16)$$

Por tanto la ecuación (10), se puede escribir de la siguiente manera:

$$\hat{\tilde{H}} = \frac{\hat{H}}{R_y^*} = -\tilde{\Delta} + \tilde{V}(\tilde{r}) + i\gamma \frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{4}\gamma^2\tilde{\rho}^2 \quad (17)$$

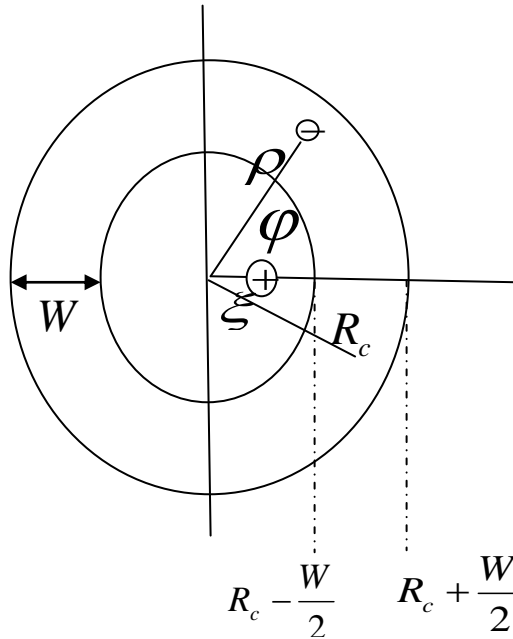
No obstante, para el caso de un electrón que rota a lo largo de un anillo unidimensional de radio r , el operador de Laplace $\tilde{\Delta}$ se reduce al siguiente término en coordenadas cilíndricas:

$$\tilde{\Delta} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (18)$$

Con lo cual el Hamiltoniano adimensional para un electrón que rota a lo largo de un anillo unidimensional de radio r se puede escribir como:

$$\tilde{H} = \frac{\hat{H}}{R_y^*} = -\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \tilde{V}(\tilde{r}) + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{4} \gamma^2 \tilde{\rho}^2 \quad (19)$$

3. Hamiltoniano adimensional de una donadora neutra D^0 que posee un electrón que se mueve en un anillo de espesor w bajo el efecto de un campo magnético y metología para solucionar la ecuación de schrödinger.



El Hamiltoniano de una donadora neutra cuyo centro está desplazado una distancia ξ con respecto al centro de un anillo de radio interior $R_c - \frac{W}{2}$ y radio exterior $R_c + \frac{W}{2}$ se puede expresar mediante:

$$\hat{H} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + V(\rho) - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + \xi^2 - 2\rho\xi \cos \varphi}} \quad (1)$$

donde el potencial de confinamiento $V(\rho)$ se define de la siguiente manera:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{para } R_c - \frac{W}{2} < \rho < R_c + \frac{W}{2} \\ \infty & \text{para } \rho < R_c - \frac{W}{2} \text{ ó } \rho > R_c + \frac{W}{2} \end{cases} \quad (2)$$

La ecuación de Schrödinger se puede plantear de la siguiente forma:

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (3)$$

Donde la función de onda ψ , se puede expresar como:

$$\psi = R(\rho)\phi(\varphi) \quad (4)$$

Despreciando el término proporcional a $\frac{1}{\rho^2}$, se encuentra mediante el método de separación de variables las siguientes ecuaciones diferenciales para las funciones $R(\rho)$ y $\phi(\varphi)$:

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) + V(\rho)R(\rho) = E_0 R(\rho) \quad (5)$$

$$-\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2} + \left[\frac{\gamma^2 \pi^2}{4} + \frac{\pi^2}{W^2} - V_c(\varphi) \right] \phi(\varphi) - i\gamma \frac{\partial \phi}{\partial \varphi} = E\phi(\varphi) \quad (6)$$

donde el potencial Coulombiano, $V_c(\varphi)$ está dado por:

$$V_c(\varphi) = - \int_{R_c - \frac{W}{2}}^{R_c + \frac{W}{2}} \rho \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + \xi^2 - 2\rho\xi \cos \varphi}} \frac{2}{W} \operatorname{sen}^2 \left[\frac{\pi \left(\rho - R + \frac{W}{2} \right)}{W} \right] d\rho \quad (7)$$

Teniendo en cuenta que:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) = \frac{1}{\rho} \left(\rho \frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) = \left(\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) \quad (8)$$

La ecuación diferencial dada por (5), se puede escribir para

$R_c - \frac{W}{2} < \rho < R_c + \frac{W}{2}$, mediante:

$$-\left(\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) = ER(\rho) \quad (9)$$

Transponiendo términos, se sigue que:

$$\left(\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} \right) + ER(\rho) = 0 \quad (10)$$

Haciendo el siguiente cambio de variable:

$$x = \rho \sqrt{E} \Rightarrow \rho = \frac{x}{\sqrt{E}} \quad (11)$$

Usando la regla de la cadena, se sigue:

$$\frac{\partial R}{\partial x} = \frac{\partial R}{\partial \rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) = \frac{1}{\sqrt{E}} \frac{\partial R}{\partial \rho} \Rightarrow \frac{\partial R}{\partial \rho} = \sqrt{E} \frac{\partial R}{\partial x} \quad (12)$$

Análogamente:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial R}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{\partial R}{\partial x} \right) \frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{1}{\sqrt{E}} \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) \left(\frac{\partial \rho}{\partial x} \right) = \frac{1}{E} \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} \quad (13)$$

Luego de la relación (13), se sigue que:

$$E \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} \quad (14)$$

Sustituyendo (12) y (14) en la ecuación (10) se tiene:

$$E \frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{E}{x} \frac{\partial R}{\partial x} + ER = 0 \quad (15)$$

Dividiendo por E, la ecuación (15) se puede escribir como:

$$\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} + \frac{1}{x} \frac{\partial R}{\partial x} + R = 0 \quad (16)$$

que corresponde a la ecuación diferencial de Bessel de orden cero, cuya solución está dada por:

$$R(x) = C_1 J_0(x) + C_2 Y_0(x) \quad (17)$$

Usando la relación (11), de la ecuación (17) se sigue:

$$R(\rho) = C_1 J_0(\sqrt{E}\rho) + C_2 Y_0(\sqrt{E}\rho) \quad (18)$$

Considerando las condiciones de frontera para el anillo, al evaluar la función radial R en los puntos $R_c - \frac{W}{2}$ y $R_c + \frac{W}{2}$, esta debe ser igual a cero, por tanto:

$$R\left(R_c - \frac{W}{2}\right) = 0: C_1 J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right) + C_2 Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right) = 0 \quad (19)$$

$$R\left(R_c + \frac{W}{2}\right) = 0: C_1 J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) + C_2 Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) = 0 \quad (20)$$

El anterior sistema de ecuaciones puede expresarse en forma matricial como:

$$\begin{pmatrix} J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right) & Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right) \\ J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) & Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = 0 \quad (21)$$

La solución trivial del anterior sistema se obtiene igualando a cero el siguiente determinante:

$$\begin{vmatrix} J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right) & Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right) \\ J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) & Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) \end{vmatrix} = 0 \quad (22)$$

Resolviendo el anterior determinante se obtiene la siguiente ecuación trascendente:

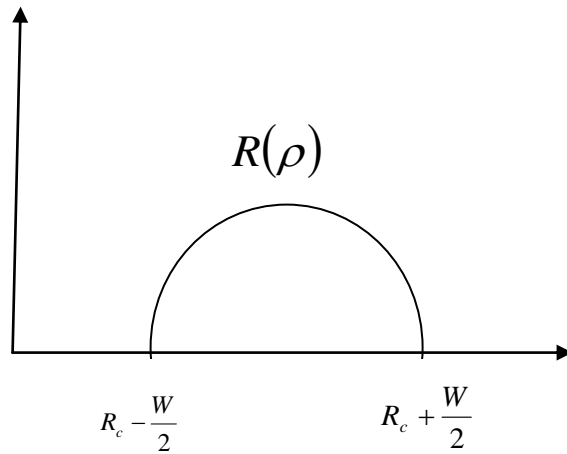
$$J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) - Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c + \frac{W}{2}\right)\right) = 0 \quad (23)$$

La ecuación (19), se satisface cuando las constantes C_1 y C_2 se escogen de la siguiente forma:

$$C_1 = \frac{1}{J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)}; \quad C_2 = -\frac{1}{Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)} \quad (24)$$

Insertando estos valores en la ecuación (18), se sigue que:

$$R(\rho) = C \left[\frac{J_0(\sqrt{E}\rho)}{J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)} - \frac{Y_0(\sqrt{E}\rho)}{Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)} \right] \quad (25)$$



Para encontrar la constante C , se debe integrar la densidad de probabilidad en todo el espacio τ , que para este caso particular corresponde al siguiente producto $\rho d\rho$, y se debe igualar al máximo valor de la probabilidad, es decir, a uno, así:

$$\int R^2 d\tau = 1 \Rightarrow C^2 \int_{R_c - \frac{W}{2}}^{R_c + \frac{W}{2}} \left[\frac{J_0(\sqrt{E}\rho)}{J_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)} - \frac{Y_0(\sqrt{E}\rho)}{Y_0\left(\sqrt{E}\left(R_c - \frac{W}{2}\right)\right)} \right]^2 \rho d\rho = 1 \quad (26)$$

La expresión (25) se puede aproximar a la siguiente:

$$R(\rho) = \sqrt{\frac{2}{W}} \operatorname{sen} \left[\frac{\pi \left(\rho - R_c + \frac{W}{2} \right)}{W} \right] \quad (27)$$

Además. El valor de E_0 se puede aproximar a:

$$E_0 = \frac{\pi^2}{W^2} \quad (28)$$

En resumen se pueden seguir los siguientes pasos para la solución del problema:

1.- Calcular el valor promedio del potencial de Coulomb en función de φ , de acuerdo a la fórmula:

$$V_c(\varphi) = - \int_{R_c - \frac{W}{2}}^{R_c + \frac{W}{2}} \rho \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + \xi^2 - 2\rho\xi \cos \varphi}} \frac{2}{W} \operatorname{sen}^2 \left[\frac{\pi \left(\rho - R_c + \frac{W}{2} \right)}{W} \right] d\rho \quad (29)$$

Para 20 valores de φ y construir el spline interpolante.

2.- Resolver por el método de Fourier:

$$-\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \varphi^2} + \left[\frac{\gamma^2 \pi^2}{4} + \frac{\pi^2}{W^2} - V_c(\varphi) \right] \phi(\varphi) - i\gamma \frac{\partial \phi}{\partial \varphi} = E\phi(\varphi) \quad (30)$$

3.- Expresar $V_c(\varphi)$ mediante la siguiente aproximación:

$$V_c(\varphi) = - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + \xi^2 - 2\rho\xi \cos \varphi + \frac{W^2}{12}}} \quad (31)$$

4. Momento dipolar magnético de un sistema de anillos cuánticos.

Partiendo de la definición clásica de momento dipolar, debido a una espira circunferencial de radio r por la que circula una corriente i ,

$$p_m = iA = i(\pi r^2) \quad (1)$$

donde $A = \pi r^2$, es el área de la espira.

Denotando por v la velocidad tangencial o lineal de un electrón alrededor de una circunferencia de radio r , esta se puede expresar mediante:

$$v = \frac{2\pi r}{T} \quad (2)$$

siendo T el periodo de movimiento.

Teniendo en cuenta que la intensidad de corriente se obtiene como el producto entre la frecuencia f y la carga del electrón e , de la ecuación se sigue que:

$$p_m = \frac{e\pi r^2}{2\pi r} = \frac{1}{2} ver \quad (3)$$

Para el problema que se está considerando, el momento angular está dado por:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (4)$$

Donde el momento lineal viene dado por $\vec{p} = m\vec{v}$. Considerando que el vector posición \vec{r} forma un ángulo de 90° con el vector \vec{v} , el módulo del momento angular se puede expresar como: $L = rp = rmv$.

Para encontrar la denominada constante giromagnética, se divide el momento dipolar magnético por el momento angular, así:

$$\frac{p_m}{L} = \frac{\frac{1}{2} ver}{rmV} = \frac{e}{2m} = \frac{e}{2m_e} = g \quad (5)$$

donde se ha denotado por g la constante giro magnética. Téngase en cuenta que en la expresión (5) se ha cambiado la masa del electrón m por m_e para no confundirla con el valor de m que se utilizará más adelante para denotar el número cuántico magnético.

Cuando en la relación (5), se cambia la definición del momento angular L , dado en Mecánica Clásica, por la definición dada para el momento angular en la Mecánica Cuántica, L_z , siendo $L_z = m\hbar$ para $m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$ donde m es el denominado número cuántico magnético, se obtiene:

$$\frac{p_m}{L_z} = \frac{e}{2m_e} \Rightarrow p_m = \frac{e}{2m_e} m\hbar = m \left(\frac{e\hbar}{2m_e} \right) = m\mu_b \quad (6)$$

Donde $\mu_b = \frac{e\hbar}{2m_e}$ es la constante denominada magnetón de Bohr.

La expresión correspondiente a la magnetización promedio está dada por:

$$\overline{M} = \frac{\sum_{m=0}^n p_m e^{-\frac{E_m(\gamma)}{k_B T}}}{\sum_{m=0}^n e^{-\frac{E_m(\gamma)}{k_B T}}} \quad (7)$$

Insertando la expresión (6) en la relación (7), se sigue que:

$$\frac{\overline{M}}{\mu_b} = \frac{\sum_{m=0}^n m e^{-\frac{E_m(\gamma)}{k_B T}}}{\sum_{m=0}^n e^{-\frac{E_m(\gamma)}{k_B T}}}; \quad m = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (8)$$

5. Método de Galerkin en el subespacio para la rotación de un electrón en un anillo cuántico unidimensional (1D)

La ecuación de Schrödinger para un electrón que rota en una anillo 1D es:

$$\hat{H}(\vartheta)|\Phi(\vartheta)\rangle = E|\Phi(\vartheta)\rangle; \quad |\Phi(\vartheta+\pi)\rangle = |\Phi(\vartheta-\pi)\rangle; \quad -\pi < \vartheta < \pi \quad (1)$$

Donde

$$\hat{H}(\vartheta) = -\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + V(\vartheta) \quad (2)$$

Las series complejas truncadas de las funciones de onda de Fourier, que pueden ser consideradas como una proyección de las funciones de onda exactas sobre el subespacio $2m_0 + 1$ dimensional, tiene la forma:

$$|\Phi(\vartheta)\rangle = \sum_{m=-m_0}^{m_0} C_m |e^{im\vartheta}\rangle; \quad C_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |\Phi(\vartheta)\rangle \langle e^{-im\vartheta} | d\vartheta \quad (3)$$

En la ecuación anterior y en lo que sigue se utilizará la notación de Dirac. Considérese ahora la discrepancia, que resulta de sustituir (3) en (2):

$$\hat{D}[C_m] = (H - E)|\Phi\rangle = \left\{ \left[-\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + V(\vartheta) \right] - E \right\} \sum_{m=-m_0}^{m_0} C_m |e^{im\vartheta}\rangle \quad (4)$$

Como el espacio seleccionado es incompleto, generalmente es imposible encontrar un conjunto de coeficientes desconocidos C_m que den para la discrepancia los valores exactamente iguales a cero en todo el espacio funcional. Por consiguiente, la tarea de encontrar un conjunto de coeficientes C_m que den

cero para la discrepancia (4) es lo máximo que se puede hacer para encontrar un subespacio que satisfaga las condiciones:

$$\langle e^{im'\vartheta} | \hat{D}(\vartheta) \rangle = 0; \quad m' = 1, 2, \dots, m_0 \quad (5)$$

Sustituyendo la ecuación (4) en la relación (5) se obtiene:

$$\sum_{m=-m_0}^{m_0} C_m \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im'\vartheta} \left[-\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} + V(\vartheta) - E \right] e^{im\vartheta} d\vartheta = 0 \quad (6)$$

Teniendo en cuenta la identidad de Poissón

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(m-m')\vartheta} d\vartheta = \delta_{m,m'} \quad (7)$$

la ecuación (6) se puede simplificar como sigue:

$$\sum_{m=-m_0}^{m_0} \left[\left(\frac{m^2}{R^2} + \gamma m + \frac{\gamma^2 R^2}{4} - E \right) \delta_{m,m'} + V_{m,m'} \right] C_m = 0, \quad mm' = 1, 2, \dots, m_0 \quad (8)$$

donde

$$V_{m,m'} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{-im'\vartheta} V(\vartheta) d\vartheta \quad (9)$$

Así, el método de Galerkin aplicado a la ecuación de Schrödinger para un electrón que rota en un anillo 1D se reduce a un problema de valores propios para la matriz:

$$A_{m,m'} = \left(\frac{m^2}{R^2} + \gamma m + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \right) \delta_{m,m'} + V_{m,m'} \quad (10)$$

Los valores propios de la matriz (10) dan las energías, y los autovectores dados por la relación (3) dan las funciones de onda del problema.

6. CAPACIDAD CALORÍFICA

Definimos la capacidad calorífica de la siguiente manera:

$$C = \frac{dE}{dT} = \frac{d}{dT} \left[\frac{\sum_{m=-5}^{m=5} E e^{-\beta E}}{\sum_{m=-5}^{m=5} e^{-\beta E}} \right] \quad (1)$$

$$\text{Donde } \beta = \frac{1}{KT} \quad (2)$$

$$\text{Podemos expresar a } T = \frac{1}{KB} \Rightarrow \frac{dT}{d\beta} = -\frac{1}{K\beta^2} \Rightarrow dT = -\frac{1}{K\beta^2} d\beta \quad (3)$$

Ahora si reemplazamos la expresión (3) en la expresión (1) tendremos:

$$C = -\frac{K\beta^2 d}{d\beta} \left[\frac{\sum_{m=-5}^{m=5} E e^{-\beta E}}{\sum_{m=-5}^{m=5} e^{-\beta E}} \right] \quad (4)$$

Derivamos con respecto $\frac{d}{d\beta}$ y obtendremos la siguiente expresión:

$$C = -K\beta^2 \left[\frac{\left(\sum_{m=-5}^{m=5} e^{-\beta E} \right) \left(-\sum_{m=-5}^{m=5} E^2 e^{-\beta E} \right) - \left(\sum_{m=-5}^{m=5} E e^{-\beta E} \right) \left(-\sum_{m=-5}^{m=5} E e^{-\beta E} \right)}{\left(\sum_{m=-5}^{m=5} e^{-\beta E} \right)^2} \right] \quad (5)$$

Ahora definimos los términos de la siguiente manera para poder reducir la expresión:

$$Z_0 = \sum_{m=-5}^{m=5} e^{-\beta E} \quad (6)$$

$$Z_1 = \sum_{m=-5}^{m=5} E e^{-\beta E} \quad (7)$$

$$Z_2 = \sum_{m=-5}^{m=5} E^2 e^{-\beta E} \quad (8)$$

Podemos expresar Z_0, Z_1, Z_2 como una ecuación general y la definimos de la siguiente manera:

$$Z_l = \sum_{m=-5}^{m=5} E^l e^{-\beta E} \quad (9)$$

Expresamos la capacidad calorífica en términos Z_0, Z_1, Z_2 y obtendremos la expresión

$$C = -K\beta^2 \left[\frac{-Z_0(Z_2) + Z_1^2}{Z_0^2} \right] \quad (10)$$

Finalmente expresamos la capacidad calorífica, en nuestro caso la capacidad calorífica de un electrón por medio de la expresión:

$$C = -K\beta^2 \left[\left(\frac{Z_1}{Z_0} \right)^2 - \frac{Z_2}{Z_0} \right] \quad (11)$$

6. BIBLIOGRAFÍA

- [1] T. Appenzeller, Science 254, 1300-1335 (1991).
- [2] Y. Aharonov and D. Bohm, Significance of Electromagnetic Potential in the quantum Theory, Phys. Rev. Vol. 115 No. 3, (1959).
- [3] P. Harrison: Quantum Wells, Wires and Dots, Wiley-Interscience (2005)
- [4] H. Pettersson, R.J. Warburton, A. Lorke, K. Karrai, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, P.M. Petroff, Physica E 6 (2000) 510-513.
- [5] J. L. Zhu and Zh. Dai, Two electrons in one-dimensional nanorings, Phys. Rev. B 68, 045324 (2003).
- [6] J. Stnagl, V. Holy, and G. Bauer, Rev. Mod. Phys., Vol. 76, No. 3, 725 (2004).
- [7] J. Planelles, J.I.Climente, F.Rajadell, Quantum rings in tilted magnetic Fields, Phys E 33 (2006) 370-375.
- [8] S. Viefers, P. Koskinen, P. S. Deo, M. Manninen, Phys. E (Amsterdam) 21, (2004).
- [9] Z. Barticevic, M.Pacheco, and A. Latgé, Phys. Rev, B 62, 6963 (2000).
- [10] Y. V. Pershin and C. Permarocchi, Persistent and radiation-induced currents in distorted quantum rings, Phys. Rev. B 72, 125348(2005).
- [11] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, Phys. Rev. B 61, 15 887 (2000).
- [12] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, Quantum rings of arbitrary shape and non-uniform width in a threading magnetic field, Phys. Rev. B 77, 205303(2008).
- [13] A. Bruno-Alfonso and A. Latgé. Aharonov-Bohm oscillation in a quantum ring: Eccentricity and electric field effects, Phys. Rev. B 71,125312 (2005).
- [14] F. García, J. H. Marin, H. Paredes and I. D. Mikhailov, Phys. Stat, Sol.(c) 2, No. 10, 3630-3633 (2005).
- [15] Willian Gutiérrez Niño. "Espectro energético de D^0 y D^- en sistemas casi-unidimensionales Tesis de magister en física, UIS 2007