

**SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN ANILLOS CUÁNTICOS NO
UNIFORMES**

FREDY ANTONIO RODRÍGUEZ PRADA



**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FISICA
BUCARAMANGA
2013**

**SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN ANILLOS CUÁNTICOS NO
UNIFORMES**

FREDY ANTONIO RODRÍGUEZ PRADA

Trabajo de investigación presentado como requisito parcial para optar al título de
Doctor en Ciencias Naturales-Física

Director

Ph. D. LUIS FRANCISCO GARCÍA RUSSI

Codirector

Ph. D. ILIA MIKHAILOV

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2013**

Más que satisfacción a mi curiosidad sobre algunos de los misterios del universo en su escala atómica, he conseguido alimentar aun más en mí la fascinación que entraña su probable naturaleza.

AGRADECIMIENTOS

Los agradecimientos por lo general sobran, pero nunca la gratitud, por eso quiero expresar infinita gratitud al creador del universo quien me lleva a su lado en todo momento y a todas las personas quienes en gran o menor medida contribuyeron a dar forma y conclusión a este trabajo de investigación.

A mis padres Rodolfo Rodríguez y Ana Nubia Prada, a mi esposa Laura Mejía y a mis hermanas Johana y Sonia por su decidido apoyo, por su agradable compañía, sus eternas sonrisas y su fortalecedor y amoroso afecto.

A los doctores Ilia Davidavich Mikhailov y Luis Francisco García Russi por la dirección y orientación de mi investigación, sus significativos aportes a la misma y por no ahorrar esfuerzos a la hora de brindarme sus amplios conocimientos.

Al doctor Ilia Mihailov en especial quiero expresarle mi más profunda gratitud por toda la paciencia que mantuvo al guiarme por este camino, por compartir conmigo sus ingeniosas ideas y valiosas enseñanzas, en pocas palabras, por ser un gran maestro a nivel académico y personal.

A la escuela de Física de la Universidad Industrial de Santander por brindarme la oportunidad de realizar mis estudios doctorales en esta prestigiosa universidad.

A la UIS por su apoyo para asistir a los diferentes eventos científicos nacionales e internacionales en los cuales pude participar como expositor y al CENM por financiar los últimos aportes es esta investigación.

A mis compañeros de investigación, Jairo Marín, Willian Gutiérrez, Eduardo Galván, Luis Carlos Porras, Harold Paredes, Carlos Leonardo Beltrán, Carlos Perucho y Elber Rodríguez quienes sin esperar nada a cambio compartieron pláticas, opiniones, conocimientos y diversión a cada una de las palabras que componen esta tesis.

TITULO: SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN ANILLOS CUÁNTICOS NO-UNIFORMES*

AUTOR: Fredy Antonio Rodríguez Prada**.

PALABRAS CLAVES: Sistemas de pocas partículas, puntos cuánticos, método de Galerkin, oscilaciones de Aharonov-Bohm.

RESUMEN: Se estudian las propiedades cuánticas de sistemas de uno, dos y tres portadores de carga (electrones y huecos) confinados en anillos cuánticos (QRs) con morfologías variables. Problema que constituye uno de los temas relacionados con el área de la óptica cuántica, computación cuántica, espintrónica, etc. El análisis teórico de sistemas de pocas partículas confinadas en una región restringida de escala nanométrica sugiere el uso de una herramienta matemática que permita resolver la ecuación de Schrödinger con muchas variables. Para tal efecto se han implementado los métodos de Galerkin y de la aproximación adiabática para reducir los problemas tridimensionales a problemas bidimensionales, con potenciales renormalizados que tienen en cuenta un perfil real del QR. Utilizando estas técnicas, se estudiaron diferentes sistemas: electrón, un par de electrones, un par electrón-hueco (excitón) y un par de huecos y un electrón (trión positivamente cargado), confinados en un punto cuántico con forma de cráter, en dos anillos acoplados verticalmente y en dos anillos concéntricos, respectivamente.

En los sistemas planteados se hace énfasis en el reordenamiento y las intersecciones de los niveles energéticos con el incremento del campo magnético relacionado con la interferencia cuántica, efecto denominado efecto Aharonov-Bohm (AB). Los resultados demuestran que aun cuando la altura de los anillos cuánticos es significativamente menor que las dimensiones laterales, no es posible considerar a estas estructuras como películas bidimensionales, ya que el espectro de energía que exhiben depende fuertemente de la altura y la morfología de los anillos.

Adicionalmente, se estudió el efecto de la presencia de dos impurezas donadoras sobre el espectro de dos electrones confinados en un anillo cuántico. Se demostró que el espectro de energía de esta nanoestructura es muy similar a la del espectro de energía de una molécula de hidrogeno, razón por la cual la puede considerar como molécula artificial.

* Tesis doctoral

** Facultad de Ciencias, escuela de Física, Doctorado en Ciencias Naturales (Física), Luis Francisco García Russi (Director), Ilia D. Mikhailov (Codirector)

TITLE: SISTEMAS DE POCAS PARTICULAS EM ANELAS QUANTUMS NÃO-UNIFORMES*

AUTOR: Fredy Antonio Rodríguez Prada**.

KEY WORDS: Sistemas de poucas partículas, Anéis quânticos, Método de Galerkin, Aharonov-Bohm oscilações

ABSTRACT: In this work we studied the Quantum properties for systems of one, two and three charge carriers (electrons and holes) confined in Quantum Rings (QRs) with variable morphologies. Problem which is one of the topics related to the field of quantum optics, quantum computing, spintronics, etc.. The theoretical analysis in these systems of few particles confined in a restricted region of nanoscale require a mathematical tool that allows solving the Schrödinger equation with many variables. To this end have been implemented the Galerkin method and the adiabatic approximation to reduce two-dimensional problems to one-dimensional problems, with renormalized potentials that consider the real QR profile. Using these techniques, various systems were studied: one electron, two electrons, one electron-hole pair (exciton) and one pair of holes with one electron (Trion positively charged), confined in a quantum dot crater shaped, in two vertically coupled rings and in two concentric rings, respectively.

In systems posed emphasizes the rearrangement and the intersections of the energy levels with increasing magnetic field, interference phenomena related to quantum effect called Aharonov-Bohm (AB). The results demonstrate that while the height of the rings quantum is significantly less than the lateral dimensions, is not possible to consider such structures as two-dimensional films, since the energy spectrum that exhibit depend strongly of the height and the morphology of the rings

Additionally, we studied the effect of the presence of two donor impurity on the spectrum of two electrons confined in a QR. It was shown that the energy spectrum of this nanostructure is very similar to the spectrum of energy of one natural molecule of hydrogen and therefore can be considered as artificial molecule.

* Senior doctoral thesis project

** Faculty of Sciences, School of Physics, PhD in Natural Sciences (Physics), Luis Francisco García Russi (Director), Ilia D. Mikhailov (Co-director)

TABLA DE CONTENIDO

INTRODUCCIÓN.....	17
1. FUNDAMENTOS TEÓRICOS GENERALES.....	23
1.1. Nanoestructuras semiconductoras	23
1.1.1. Puntos y anillos cuánticos auto-ensamblados	27
1.1.2. Propiedades específicas de anillos cuánticos	29
1.1.3. Efecto Aharonv-Bohm	30
1.2. Sistemas de pocas partículas confinados en nanoestructuras semiconductoras.....	33
1.3. Aproximación de masa efectiva (AME)	36
1.4. Aproximación Adiabática	38
1.5. Método de Galerkin	41
2. MODELO SEPARABLE PARA UN QD TIPO CRÁTER.....	43
2.1. Modelo de confinamiento estructural	44
2.2. Hamiltoniano para un electrón en un QD con forma de cráter perfecto.....	45
2.3. Ecuación de Schrödinger y solución exacta.....	46
2.4. Espectro energético del electrón del cráter uniforme	47
2.5. Modelo de QD con defectos estructurales	51
2.6. Solución por el método de Fourier-Galerkin	52
2.7. Espectro energético del cráter uniforme	53
3. DOS ELECTRONES EN ANILLOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS .56	
3.1. Acoplamiento de puntos cuánticos auto-ensamblados	56
3.2. Efecto de la morfología de los QRs concéntricos y acoplados verticalmente sobre el espectro energético de dos electrones.....	57
3.2.1. Modelo estructural	58
3.2.2. Hamiltoniano para dos electrones en VCQRs y CDQRs.....	59
3.2.3. Ecuación de Schrödinger	61
3.2.4. Dos electrones en anillos cuánticos concéntricos – CDQRs.....	64
3.2.5. Efecto de la sección transversal sobre el espectro de dos electrones en VCQRs.....	67
3.3 Efecto de la morfología de CDQRs y VCQRs sobre el espectro energético de dos electrones.....	69
3.3.1. Modelo estructural	70
3.3.2. Hamiltoniano para dos electrones en VCQRs y CDQRs no-uniformes	71
3.3.3. Ecuación de Schrödinger	72
3.3.4. Espectro energético de dos electrones en un QR no uniforme.....	78
3.3.5. Espectro energético de dos electrones en VCQRs no-uniformes.....	79
3.4. Efecto de la presencia de dos donadoras sobre la energía de dos electrones en un anillo cuántico.....	82
3.4.1. Modelo estructural de una molécula artificial de Hidrógeno.....	82
3.4.2. Hamiltoniano de una molécula artificial de Hidrógeno	83

3.4.3. Ecuación de Schrödinger de una molécula artificial de Hidrógeno	84
3.4.4. Efecto del tamaño del anillo y de la posición de las donadoras	85
3.4.5. Efecto de un campo magnético sobre la energía de la molécula.....	87
4. EXCITONES NEUTRO Y CARGADO POSITIVAMENTE EN UN QR	89
4.1. Hamiltoniano generalizado para un excitón confinado en un QR.....	90
4.2. Método de Fourier para los complejos excitónicos	91
4.3. Espectro energético de los complejos excitónicos	93
5. CONCLUSIONES	96
6. REFERENCIAS	98

LISTA FIGURAS

Figura 1.1. Relación entre la brecha de energía prohibida y la constante de red para algunos materiales semiconductores	24
Figura 1.2. Modos básicos de crecimiento en epitaxia: (a) Frank-Van Der Merwe, (b) Volmer-Weber y (C) Stranski Krastanov	25
Figura 1.3. Densidad de los estados para un electrón confinado en diferentes sistemas de dimensionalidad reducida	26
Figura 1.4. Imágenes de AFM de 250 nm x 250 nm de SAQDs de In As/GaAs. (a) SAQDs crecidos a 540 °C, (b) SAQDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 540 °C, (c) SAQDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C, y (d) SAQDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C y a una presión diferente al caso (c). D. Granados <i>et al.</i> [49].....	28
Figura 1.5. Imágen de AFM 3D de QRs autoensamblados de InAs. A Aierken <i>et al</i> [57]	29
Figura 1.6. (a) Esquema de la imagen de un anillo de Aharonov-Bohm. Una onda de un sólo electrón se divide y se recombina, encerrando un flujo magnético. La fase de acumulación a lo largo del brazo de la parte superior (inferior) del anillo, ϕ_1 (ϕ_2), se ve afectada por el potencial electrostático V , y el potencial vector \vec{A}	30
Figura 1.7. Diagrama cualitativo de los niveles de energía (adimensional) en función del flujo magnético en un anillo unidimensional (1D QR) con un electrón capturado	32
Figura 1.8. Diagrama cualitativo de los niveles de energía (adimensional) en función del flujo magnético en un anillo con dos electrones en el caso cuando interacción electrostática es despreciable para el modelo estrictamente unidimensional (izquierda) y casi-unidimensional (derecha). Las líneas continuas denotan estados singlete, y las discontinuas estados triplete de ...	33
Figura 1.9. Aproximación de masa efectiva aplicada a heterojunturas semiconductoras, permite reemplazar el potencial periódico por un pozo de potencial y al mismo tiempo reemplazar las masas de partículas por sus masas efectivas	38
Figura 1.10. Representación esquemática de un SAQD con topología de anillo	38
Figura 2.1. Imágenes reales de la morfología de la superficie [2-dimensiones (izquierda) y 3-dimensiones (centro)] reveladas por AFM [120] y representación del perfil (derecha) de un anillo cuántico.....	44
Figura 2.2. Modelo estructural de punto cuántico tipo cráter perfecto (a) y perfil del punto cuántico modelo como anillo con altura variable (b) y con altura constante (c).....	45
Figura 2.3. En la primera columna se muestran los niveles energéticos de un electrón confinado en el QD tipo cráter uniforme, correspondientes a los niveles $n=1,2$ y 3 y los subniveles $m=0,1,\dots,20$. Para un radio externo constante y tres diferentes valores de altura máxima h_0 . En la segunda columna se muestran estos niveles energéticos en función del campo magnético aplicado para tres diferentes alturas h_0	48

- Figura 2.4.** Densidad de probabilidad para el electrón correspondientes a los niveles $n=1,2$ y 3 y los subniveles $m=0$ y $m=10$ para un radio externo constante de 100nm ($\sim 10 a_0^*$) y una altura máxima de 5nm ($\sim 0.5 a_0^*$). **49**
- Figura 2.5.** Niveles energéticos más bajos para (a, c) QD tipo cráter y (b,d) QRs con radio externo $\rho_b=10 a_0^*$ y altura $h_0=1 a_0^*$ y dos diferentes valores de radio interno $\rho_a=0.01 a_0^*$ (a,b) y $\rho_a=5 a_0^*$ (c,d)..... **50**
- Figura 2.6.** Niveles energéticos más bajos para un QD tipo cráter uniforme con radio interno $\rho_a=0 a_0^*$, radio externo $\rho_b=10 a_0^*$ y tres diferentes alturas h_0 : $2 a_0^*$ (a), $1 a_0^*$ (b) y $0.5 a_0^*$ (c) **50**
- Figura 2.7.** (a) Morfología de la superficie de un QD tipo cráter tomada por AFM [120]. (b, c) Perfiles de los QDs: experimental (líneas continuas) y del modelo separable (líneas punteadas) en las direcciones radial (b) y angular (c) **51**
- Figura 2.8.** Modelo de un cráter no-uniforme cuyo grosor depende de las coordenadas cilíndricas ρ, φ en acuerdo con fórmula (2.1) y con la función $f(\varphi)$ escogida como $f(\varphi) = \sin^2 k\varphi$. A continuación el parámetro $k=1/2$ corresponde al modelo I, $k=1$ al modelo II y $k=2$ al modelo III..... **52**
- Figura 2.9.** Energías más bajas de un electrón en un cráter no-uniforme en función del campo magnético con el radio interno $\rho_a=0 a_0^*$, radio externo $\rho_b=10 a_0^*$, altura $h_0= 2 a_0^*$ y dos diferentes niveles de no-homogeneidad $\sigma = 0.01$ (segunda columna) y $\sigma = 0.1$ (tercera columna). Imágenes 3D de los modelos correspondientes de cráter se presentan en la primera fila..... **54**
- Figura 3.1.** Imágenes reales de la variación de la morfología de QDs a CDQRs.[138] **57**
- Figura 3.2.** Diagrama esquemático (3D) de: la sección transversal del anillo de tipo rectangular (I), circular (II) y cuadrada (III) (a). Parámetros geométricos para los QRs (b, c), portadores de carga en VCQRs de igual radio (d), en CDQRs (e) y en VCQRs de diferente radio (f)..... **58**
- Figura 3.3.** Diagrama esquemático (3D) de dos electrones en VCQRs (izq) y sistema coordinado para cada electrón en el interior de cada anillo (der) **59**
- Figura 3.4.** Energía re-normalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del radio medio del anillo R para un anillo cuasi uni-dimensional. Los rombos sólidos corresponden a la solución exacta reportada en la referencia [92]. **65**
- Figura 3.5.** Evolución de la energía re-normalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ para dos electrones en dos anillos concéntricos ($\beta=0$) como función del campo magnético..... **66**
- Figura 3.6.** Energías $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del radio central de dos formas diferentes de anillo toroidal con secciones transversales: circular (línea continua) y cuadrada (línea punteada) (a) y tres valores diferentes del lado de la sección transversal cuadrada (b)..... **67**
- Figura 3.7.** Energías $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en VCQRs como una función de la magnitud del campo magnético (renormalizado para el caso de (a) y (b)) para anillos de sección transversal: circular (a, b), cuadrada (c) y rectangular (d). Para las diferentes secciones transversales se usaron los siguientes parámetros: $R = 4 a_0^*$, $R_t = 0.0014 a_0^*$ y $\beta = 0.0$ para la sección transversal circular y $R = 10 a_0^*$, $\alpha = 1$ y $\beta = 0.0$ para las sección transversal cuadrada y rectangular **69**
- Figura 3.8.** Diagrama esquemático (3D) de anillos cuánticos acoplados verticalmente, con el anillo inferior uniforme y el superior no uniforme, con dos electrones capturados y un campo magnético uniforme aplicado a lo largo del eje z ... **70**

Figura 3.9. Energías renormalizadas en unidades de $(R_y^* a_0^*)^2$ de un electrón en función del flujo magnético en un único QR con dos diferentes radios R , diferentes niveles de homogeneidad σ , y una altura máxima $h = 0.2a_0^*$	79
Figura 3.10. Energías renormalizadas (niveles más bajos) en unidades de $(R_y^* a_0^*)$ de dos electrones en función del flujo magnético en VCQRs en donde uno de los anillos presenta un defecto estructural. Se han considerado variaciones de homogeneidad (σ) de 0 a 0.2 para anillos con un mismo radio ($\alpha=1$) y con radios diferentes ($\alpha=1.5$). Otros parámetros de los anillos son $R = 20a_0^*$, $w = 1a_0^*$, $h = 0.2a_0^*$, $\beta = 0.1$	80
Figura 3.11. Energías renormalizadas en unidades de $(R_y^* a_0^*)$ de dos electrones en función del radio de los anillos acoplados verticalmente, sin campo magnético (a,b) y con un campo magnético fuerte $\gamma=3$, $B = 25T$ (c, d). Otros parámetros de los anillos son $\alpha = 4$, $\beta = 0.1$, $h = 0.01a_0^*$, $w = 0.1a_0^*$	81
Figura 3.12. Diagrama esquemático (3D) de una molécula de hidrógeno artificial, compuesta por dos donadoras ionizadas (I_1 , I_2) ubicadas sobre el eje Z y dos electrones confinados en el interior del anillo. En la imagen de la derecha se esquematizan las coordenadas para cada electrón, donde $k=1,2$	83
Figura 3.13. Energía del estado base de una molécula de hidrógeno artificial (en ausencia de campo magnético) en función de la distancia ζ entre los iones, para diferentes grosores del anillo (a) y diferentes radios de la línea central (b). La línea punteada corresponde a la curva de potencial de la molécula de hidrógeno real	86
Figura 3.14. Algunos de los estados más bajos de energía de una molécula de hidrógeno artificial (en ausencia de campo magnético) en función de la distancia ζ entre los iones. La línea punteada corresponde a la curva de potencial de la molécula de hidrógeno real [149]	87
Figura 3.15. Estados más bajos de energía de una molécula de hidrógeno artificial en función del campo magnético renormalizado (γR^2) en un anillo cuántico toroidal con separación entre iones $\zeta = 0.5a_0^*$ (a) y $\zeta = 5a_0^*$ (b). El radio de la línea central y de la sección transversal son los mismos en las dos gráficas y equivalen a $R = 3a_0^*$ y $R_c = 0.2a_0^*$, respectivamente	88
Figura 4.1. Diagrama esquemático de un excitón cargado positivamente en un QR de ancho w , altura Δh y radio de la línea central $R_c = R$	90
Figura 4.2. Niveles más bajos de energía de un excitón neutro X en función del campo magnético	94
Figura 4.3. Niveles más bajos de energía de un excitón cargado X^+ en función del campo magnético	95
Figura 4.4. Niveles más bajos de energía de un excitón cargado X^+ en función de la razón de masas electrón-hueco	95

LISTA DE TABLAS

Tabla 3.1. Notación para algunos estados energéticos $\tilde{E}(M,m,s)$	68
Tabla 3.2. Algunos niveles de energías renormalizada en unidades de $(R_y^*(a_0^*)^2)$ de la molécula de hidrógeno para dos radios diferentes de la línea central del anillo R , diferentes distancias de separación entre iones ζ y en ausencia de campo magnético externo. El valor del radio de la sección trasversal se tomó $R_t = 0.001a_0^*$, con el fin de que el anillo fuera casi unidimensional y así poder comparar con los resultados de la ref. [148] para cuando la separación entre iones es muy grande.	85

LISTA DE ACRÓNIMOS Y SÍMBOLOS

<p>AA Aproximación adiabática</p> <p>AME Aproximación de masa efectiva</p> <p>AB Aharonov-Bohm</p> <p>A Potencial vectorial</p> <p>B Campo magnético</p> <p>CVD Deposición de vapor químico</p> <p>D_2^+ Complejo ionizado de dos donadoras neutras</p> <p>E_k Energía cinética</p> <p>e Electrón</p> <p>h Hueco</p> <p>K_B Constante de Boltzman</p> <p>K Grado Kelvin</p> <p>MBE Técnica de haces moleculares</p> <p>m_h^* Masa efectiva del hueco</p> <p>m_e^* Masa efectiva del electrón</p> <p>a_0^* Radio de Bohr efectivo</p> <p>α Razón entre radios de VCQDs</p>	<p>β Razón entre el radio y la distancia de separación de VCQDs</p> <p>ϵ Constante dieléctrica</p> <p>γ Factor de Landau</p> <p>QW Pozo cuántico</p> <p>QWW Hilo cuántico</p> <p>QD Punto cuántico</p> <p>QR Anillo cuántico</p> <p>R_y^* Rydberg efectivo</p> <p>SL Superred</p> <p>SBD Sistema de baja dimensionalidad</p> <p>SAQD Punto cuántico auto ensamblado</p> <p>SQD Punto cuántico esférico</p> <p>U Energía potencial</p> <p>V_0 Potencial de confinamiento</p> <p>VCQR QDs acoplados verticalmente</p> <p>WL Capa húmeda</p> <p>X Excitón</p> <p>$X^{(+)(-)}$ Trión (Positivo) (positivo)</p>
---	--

INTRODUCCIÓN

El “*fenómeno Nano*” ha traspasado durante los últimos años las fronteras de la comunidad científica y hoy en día es difícil no escuchar en cualquier cantidad de medios de comunicación términos tales como, nanomateriales, nanopartículas, nanotubos, nanobots, nanofármacos e incluso nanoalimentos, entre otros. Una de las tantas pruebas de esto y cuyos resultados perfectamente hacen pensar en historias de “*ciencia ficción*” son los actuales avances en la creación de tejidos a partir de nanopartículas de Plata, Oro y Paladio permitiendo textiles con novedosas y sorprendentes cualidades; de las cuales cabe mencionar una de las más relevantes como es la resistencia a virus y bacterias [1].

La voluminosa investigación en áreas enfocadas a la ciencia en esta escala nanométrica ha originado una de las grandes revoluciones científicas de las últimas décadas, sostenida por el desarrollo de la Nanociencia y sus aplicaciones prácticas enmarcadas dentro de la Nanotecnología [2]. Actualmente en esta área existen tres ramas de investigación bien establecidas, la nanotecnología seca, la nanotecnología húmeda y la nanotecnología computacional. La nanotecnología seca trata sobre la fabricación de estructuras en carbón (nanotubos), silicio, materiales inorgánicos, metales y semiconductores, además del autoensamblaje controlado por computadora y dispositivos ópticos, también tiene que ver con la fabricación y manipulación de nanoestructuras. La nanotecnología húmeda trata sobre materiales biológicos como membranas, material genético y otros componentes celulares. La nanotecnología computacional trata sobre el modelado y simulación de estructuras complejas de escala nanométrica [3].

Debido al carácter interdisciplinario y a los beneficios que la ciencia de la nano-escala reporta a la sociedad, la investigación básica aplicada a este tema ha recibido gran atención y soporte financiero, haciendo que el interés por esta disciplina esté creciendo prácticamente en todas las naciones industrializadas. Una de las disciplinas técnico-científicas de mayor incursión en el estudio de la materia a nano-escala, es el área de la materia condensada. Intensas investigaciones en esta disciplina se han venido enfocando especialmente en el estudio de estructuras fabricadas mediante diferentes técnicas de crecimiento de cristales, en especial de materiales semiconductores [4]. Los resultados obtenidos en este campo revelan grandes avances en el estudio de estructuras artificiales con diversas e importantes propiedades optoelectrónicas aplicables en ciencia y tecnología. En este sentido, la física de los semiconductores abarca un extenso horizonte en el estudio, síntesis, manipulación y aplicación de estos materiales a dispositivos miniaturizados que permitan el control de la materia a la escala del nanómetro, donde las propiedades físicas ya no son las mismas que para los átomos y moléculas individuales y todavía no logran ser iguales a los de un material en bloque.

La miniaturización de estructuras artificiales a escala nanométrica, significa una miniaturización no sólo de tamaño, sino un ingreso a un rango dimensional que está en los mismos órdenes de magnitud de las distancias de ordenamiento entre planos atómicos en un material sólido, lo cual conduce a estudiarlas desde un punto de vista estrictamente cuántico. Razón por la cual los primeros estudios sobre nanoestructuras semiconductoras aparecen ya en los albores de la mecánica cuántica, y son precisamente

sus leyes las que gobiernan el comportamiento de los electrones, átomos y moléculas confinados en estructuras semiconductoras de tamaño nanométrico también denominadas sistemas de baja dimensionalidad (SBD) [5]. Aunque inicialmente estos sistemas se estudiaron desde un punto de vista puramente teórico, la aparición y rápido avance de técnicas de fabricación y caracterización de materiales a escala nanométrica ha previsto un amplio estudio de interés tecnológico y ha impulsado una variedad de técnicas de crecimiento de cristales, entre las cuales las más usadas son: Litografía con base en rayos electrónicos e interdifusión a través de impurezas en la estructura cristalina [6]; Deposición molecular epitaxial (MBE); Deposición química metal-orgánica en la fase de vapor (MOCVD) [7] y epitaxia de fase líquida [8]. Estas técnicas han permitido fabricar nanoestructuras con confinamiento cuántico, bajo las cuales los portadores de carga (electrones y huecos) quedan restringidos a moverse en regiones de tamaño comparable con las longitudes de ondas de De Broglie [9]. Según el carácter de confinamiento, los diferentes sistemas de baja dimensionalidad se especifican como: pozos cuánticos (QWs) [10], hilos cuánticos (QWVs) [10,11] y puntos cuánticos (QDs) [10,12]. Estos últimos se fabrican con diferentes morfologías que se aproximan a figuras geométricas como: lentes [13,14], pirámides [15], pirámides truncadas [16], entre otras. Tales estructuras generalmente se fabrican con base en aleaciones de semiconductores a través de una variación brusca de la concentración de uno de los componentes del compuesto, lo que da origen a la formación de heterojunturas. En dichos materiales, las diferentes regiones del mismo se caracterizan por poseer diferentes anchos de banda prohibida y parámetros de red muy parecidos, garantizando de esta manera, que el nuevo material tenga propiedades electrónicas inusuales con un mínimo de deformaciones en las interfaces.

Entre todas las nanoestructuras semiconductoras, el mayor interés para futuras aplicaciones lo presentan los QDs. llamados también *átomos artificiales* debido al espectro energético discreto que los caracteriza, relacionado con la restricción en el movimiento electrónico en todas las direcciones. Esto conlleva a un comportamiento cero-dimensional (discreto) haciendo sus propiedades altamente sensibles a variaciones estructurales de tamaño y de forma de estos sistemas artificiales, controlables durante el proceso de fabricación. Los QDs despliegan una diversa gama de propiedades, por un lado, ofrecen un amplio espectro de posibilidades en la creación de componentes muy versátiles que permitan el diseño de sorprendentes dispositivos opto-electrónicos y por otro lado, suscitan un gran interés en la exploración y el estudio de interesantes fenómenos físicos, como: la flexibilidad que ofrecen para moldear la estructura del espectro energético, la manifestación de regímenes de alta correlación electrónica presente entre los portadores de carga [17], exhibición de cristalizaciones de Wigner [18], la aparición de corrientes persistentes [19], la verificación experimental del denominado efecto Aharonov-Bohm [20], etc.

Desde el punto de vista teórico y de investigaciones fundamentales, las nanoestructuras podrían ser utilizadas como mini-laboratorios en donde se puedan estudiar fascinantes y novedosos fenómenos físicos asociados con la correlación electrónica en sistemas de pocas partículas confinados en espacios de dimensionalidad reducida. Todo este panorama ubica a las nanoestructuras semiconductoras en un foco de ambiciosas investigaciones en nanotecnología y dentro de este gran atractivo tecnológico suscitado se encuentran múltiples aplicaciones, entre las que se encuentran los interruptores ópticos de alta velocidad, transistores de un sólo electrón, foto-detectores, láseres semiconductores y posibles sistemas de computación cuántica [21,22].

La brecha entre las bandas de valencia y de conducción dentro de los puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQDs) (Crecidos mediante técnicas de auto-ensamblado) es comúnmente superior que la brecha correspondiente en la matriz que los rodea. Por esta razón, los SAQDs presentan una trampa para los portadores de carga, electrones y huecos, es decir cualquier portador de carga generado en la heterojuntura con mayor probabilidad estará confinado dentro SAQD. Por ejemplo, un par electrón-hueco generado en la matriz al absorber un fotón con mayor probabilidad será capturado por un QD formando un excitón de tipo Frenkel localizado dentro de esta molécula artificial ó será capturado por dos QDs diferentes formando así un excitón de tipo Wannier localizado. Otro mecanismo de formación de los portadores de carga confinados en QDs es el del dopaje. Una impureza donadora incorporada en la matriz de la heterojuntura pierde su electrón excesivo que se escapa hacia un QD donde queda confinado debido a la existencia de un nivel energético inferior dentro del mismo. De esta manera un QD con un electrón confinado forma un átomo artificial similar al átomo de hidrogeno. Más aún, un QD puede capturar dos o más electrones procedentes de otras impurezas donadoras formando átomos artificiales similares al átomo de helio, etc. Recíprocamente, al incorporar impurezas aceptadoras en la matriz de la heterojuntura, se consigue de manera parecida, confinar huecos dentro del QD. Además son posibles otros tipos de diferentes combinaciones, por ejemplo uno o dos electrones procedentes de dos diferentes impurezas donadoras y dos huecos procedentes de dos diferentes impurezas aceptadoras, todos estos confinados en un solo QD pueden formar un biexcitón localizado, etc.

Así, es posible confinar artificialmente dentro de una región de dimensión restringida a la escala nanométrica uno o dos electrones, uno o dos huecos, un par electrón-hueco (excitón- X), un par de electrones y un hueco (triión- X^-), un par de huecos y un electrón (triión- X^+), dos electrones y dos huecos (biexcitón- X_2), entre otros. Todas estas combinaciones pueden considerarse como “*sistemas de pocas partículas*” confinados en QDs [23]. Generalmente, el confinamiento espacial afecta esencialmente a las propiedades de estos sistemas favoreciendo a la formación de estados ligados más estables con respecto al sistema en bloque, y haciendo las líneas espectrales mucho más estructuradas y definidas.

Hay que anotar otra interesante particularidad de los sistemas de pocas partículas confinadas en QDs, relacionada con la gran importancia de los efectos de correlación presentes en este caso. Si en los átomos, la competencia entre la energía cinética y potencial define la dimensión de la región de confinamiento de pocos electrones dentro de ellos, en el caso de QDs cuyos tamaños son en uno o dos órdenes superior, la energía de interacción electrostática es dominante y los efectos de correlación electrónica definen en alto grado la estructura de su espectro energético. En este sentido, los QDs presentan un “laboratorio” para el estudio teórico sobre los sistemas de pocas partículas que permite aclarar de manera más sencilla el papel que juegan los efectos de correlación y su real incidencia en el espectro energético y en las propiedades de transporte eléctrico. Los métodos elaborados para el estudio de los sistemas de pocas partículas, son importantes debido a que éstos permiten revelar ciertas propiedades generales que también son características de los sistemas de muchos cuerpos. Además, estos métodos se pueden utilizar para determinar la validez y el alcance de las técnicas de Funciones de Green [24-25] y diagramas de Feynman [26-29], las cuales se usan para estudiar las propiedades de los sistemas de muchas partículas.

Entre todos los QDs con diferentes morfologías el mayor interés de los investigadores en el área de nanoestructuras semiconductoras se ha orientado al estudio de los anillos cuánticos (quantum ring, QR). La observación experimental de las oscilaciones Aharonov-Bohm [20] y corrientes persistentes [19] en pequeños anillos, por un lado, y los desarrollos experimentales recientes en la fabricación de puntos cuánticos [30] y anillos cuánticos [31] con sólo unos pocos electrones capturados, por otro, han hecho de los anillos cuánticos un tema cada vez más interesante para investigaciones experimentales y teóricas, las cuales han permitido un nuevo campo de verificación sobre la eficiencia de diferentes métodos teóricos para sistemas de pocas y muchas partículas confinadas en sistemas casi-unidimensionales. Muchas propiedades de los anillos cuánticos se puede explicar en el marco de la teoría uní-particular la cual para sistemas unidimensionales (1D) es, naturalmente, muy simple. Por el contrario, para sistemas de muchas partículas fermiónicas el problema en 1D es sorprendentemente complicado debido a la mayor importancia que en este caso tiene el principio de exclusión de Pauli. En consecuencia, teóricamente los sistemas estrictamente 1D no son considerados "líquidos de Fermi", pero si "líquidos de Luttinger" con un espectro de excitaciones colectivas específico [32-35]).

El principal propósito de esta investigación doctoral fue elaborar modelos matemáticos versátiles y los algoritmos correspondientes que permitan el estudio teórico de sistemas de pocas partículas confinadas en QDs con morfología particular de anillo cuántico. Especialmente, se planteó que los modelos a tratar tuvieran en cuenta: las características reales que adoptan este tipo de estructuras en el proceso de fabricación, la influencia de un campo magnético externo y de los defectos estructurales en la morfología de los QRs. Debido a la complejidad del problema se planteó además la elaboración de los algoritmos que optimizarán los recursos computacionales para realizar el cálculo numérico con un coste moderado en su ejecución, basado en el esquema numérico de Fourier-Galerkin. En esta Tesis se hace especial énfasis en el efecto de la no-uniformidad estructural de los QRs sobre el espectro energético de dos electrones, Excitones y Triones confinados dentro de ellos.

La presente Tesis Doctoral se estructura de la siguiente manera:

En el capítulo 1 se presentan de forma sucinta los conceptos básicos y modelos teóricos en que se asienta la presente tesis, el panorama general del estado del arte, las principales aproximaciones y los refinamientos con los que se pretende mejorar la descripción cuantitativa de los sistemas estudiados, que permitieron establecer un modelo relativamente sencillo y práctico.

En el capítulo 2 se propone un modelo separable para el estudio de las propiedades electrónicas de un electrón confinado en un anillo cuántico en forma de cráter con defectos estructurales en presencia de un campo magnético.

En el capítulo 3 se ha abordado el estudio de dos electrones confinados en anillos cuánticos dispuestos en dos tipos diferentes de arreglos: concéntricos y acoplados verticalmente. Inicialmente se analiza la influencia de la forma de la sección transversal de los anillos y la no homogeneidad de la misma sobre la energía de los electrones en presencia de un campo magnético externo. Por último se realiza el estudio de una molécula de hidrógeno artificial, conformada por dos impurezas donadoras ubicadas

sobre el eje de simetría de un anillo cuántico delgado en el cual se confinan sus respectivos electrones.

El capítulo 4 está dedicado al estudio de un excitón neutro y de un excitón cargado positivamente en un anillo cuántico. El formalismo implementado basado en el método de Fourier, permite obtener un modelo generalizado para el estudio de los dos sistemas de partículas

Esta tesis doctoral es el producto del esfuerzo de un trabajo investigativo de casi cuatro años, cuyos frutos pueden verse representados por los artículos publicados, o de inminente publicación, en revistas científicas internacionales y nacionales, así como por las ponencias que fueron presentadas en diversos congresos internacionales y nacionales. La lista de los trabajos publicados que a continuación se describen, está hecha en orden cronológico y corresponde al mismo orden en que se han expuesto los temas desarrollados en cada uno de los capítulos.

A continuación se ofrece un listado de estos logros:

Lista de publicaciones

1. Energy spectrum of an artificial molecular complex in toroidal quantum rings; *Superlattice and microstructures* **49**, 258-263 (2011)
2. Spectral properties of two electrons vertically coupled in toroidal quantum rings; *Superlattice and microstructures* **49**, 252-257 (2011)
3. Vertically coupled non-uniform quantum rings with two separated electrons in threading magnetic field; *Journal of Physics: Conference Series* **245**, 012020 (2010)

Adicional a estos trabajos, se encuentran actualmente en proceso de evaluación los siguientes títulos:

4. Separable model of the volcano-shaped one-electron quantum dot; *Physica B: Condensed matter* (2012)
5. Neutral and positively charged excitons in narrow quantum ring; *American Institute of Physics*(2011)
6. Quantum rings of non-uniform thickness in magnetic field; *American Institute of Physics*(2011)
7. Aharonov-Bohm effect in two concentric toroidal quantum rings; *Revista Tumbaga, Colombia* (2009)

Lista de ponencias presentadas

1. 31st International Conference on the Physics of Semiconductors –**ICPS2012**; *Charge distribution at volcano shaped quantum ring with magnetoexciton captured*; Zurich, Suiza (2012)
2. International Conference on Superlattices, Nanostructures and Nanodevices – **ICSNN2012**, *A solvable model of non uniform exciton volcano shaped quantum dot*, Dresden, Alemania (2012)

3. 7th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices – **LDS2011**; *Quantum rings of non-uniform thickness in magnetic field*; Telchac, México (2011)
4. 7th International Conference on Low Dimensional Structures and Devices – **LDS2011**; *Neutral and positively charged excitons in narrow quantum ring*; Telchac, México (2011)
5. IX Brazilian **MRS** Meeting; *Separable model of the volcano-shaped one-electron quantum dot*; Ouro Preto (MG), Brazil (2010)
6. Physics of Light-Matter Coupling in Nanostructures- **PLMCN 10**; *Spectral properties of two electrons vertically coupled in toroidal quantum rings*; Cuernavaca, México (2010)
7. Physics of Light-Matter Coupling in Nanostructures- **PLMCN 10**; *Energy spectrum of an artificial molecular complex in toroidal quantum rings*; Cuernavaca, México (2010)
8. The 6th International Conference on Quantum Dots-**QD2010**; *Vertically coupled non-uniform quantum rings with two separated electrons in threading magnetic field*; Londres, Inglaterra (2010)
9. 32nd International Symposium on Dynamical Properties of Solids-**DYPROSO2009**; *Aharonov-Bohm effect in two concentrically QRs and torus-shaped QRs*; Antwerp, Bélgica (2009)
10. VIII Escuela nacional de la materia condensada-**VIIIENFMC**; *Aharonov-Bohm effect in two concentrically QRs* Pereira-Colombia (2008)

Capítulo 1

FUNDAMENTOS TEORICOS GENERALES

El objetivo principal de las secciones que conforman el presente Capítulo es el de dar una visión general del marco teórico que enmarca este trabajo de investigación y en el que se inscriben los modelos utilizados e implementados para contextualizar al mismo. En primera instancia, se pretende hacer una pequeña introducción a las nanoestructuras semiconductoras, haciendo especial énfasis en los puntos cuánticos autoensamblados en forma de anillo, por ser los sistemas de interés en esta investigación. A la postre, queremos presentar, en términos generales, el marco teórico empleado en el estudio de estos sistemas, así como algunas de las principales propiedades que los caracterizan. En esta segunda parte incluiremos la descripción de algunos sistemas de pocas partículas que pueden confinarse en nanoestructuras semiconductoras, las diferentes aproximaciones empleadas en el desarrollo de los modelos teóricos. Además se hace una descripción de la notación que será empleada a lo largo de todo el trabajo.

1.1. NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

En esta sección se ofrece una breve introducción a las nanoestructuras semiconductoras desde una perspectiva global, destacando algunas técnicas utilizadas en el proceso de fabricación y haciendo énfasis en la morfología especial de anillos cuánticos.

Las propiedades físicas de los materiales semiconductores están determinadas básicamente por algunos parámetros macroscópicos, tales como: el tipo y contenido de compuestos, la constante de red, la constante dieléctrica, la brecha entre la banda de conducción y de valencia, entre otros. Cuando estos parámetros permanecen invariables dentro de todo el material tenemos un “*semiconductor en bloque*”. Por otro lado, si estos parámetros o alguno de ellos permanecen constantes solo dentro de regiones de tamaño nanométrico, entonces estamos hablando de “*nanoestructuras semiconductoras*”. Las pequeñas regiones, donde se tiene homogeneidad en los parámetros macroscópicos, pueden presentar las más diversas morfologías dependiendo de la técnica y las condiciones de crecimiento empleadas, en este sentido, las nanoestructuras ofrecen una posibilidad única de controlar las propiedades físicas, no solo desde el punto de vista composicional, sino además por variaciones estructurales de su tamaño y su forma. En relación con esto, es interesante resaltar el hecho de que las dimensiones de estas estructuras (de los mismos órdenes de magnitud que las distancias de ordenamiento entre planos atómicos en un material sólido) son comparables con la longitud de onda de De Broglie asociada a los portadores de carga, por lo tanto estos últimos exhiben un comportamiento cuántico completamente diferente al que presentan en el bloque [9]. Quizá, uno de los rasgos más sobresalientes de este comportamiento cuántico es la cuantización de la energía de los portadores de carga en la dirección que se halle el confinamiento estructural.

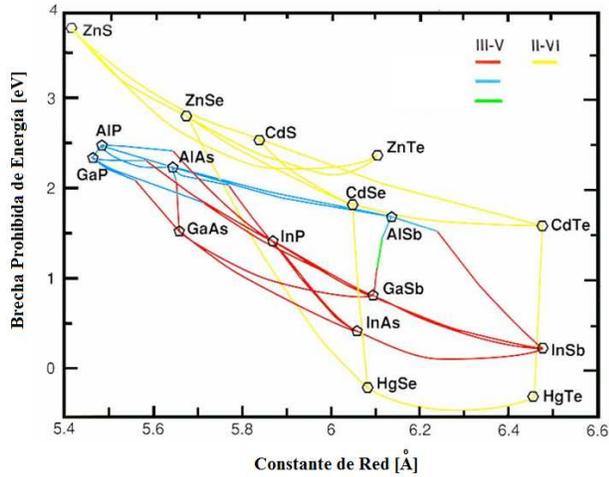


Fig. 1.1 Relación entre la brecha de energía prohibida y la constante de red para algunos materiales semiconductores.

Las nanoestructuras semiconductoras constituyen el paradigma de los sistemas de baja dimensionalidad (SBD). Los cuales se caracterizan por restringir el movimiento de los portadores de carga en una, dos o incluso las tres dimensiones espaciales. Particularidad que despertó el interés científico de W. A. Little [36] y V. L. Ginzburg [37], quienes en 1964 formularon la posibilidad de realizar superconductividad de alta temperatura sobre la base de mecanismos excitónicos casi-unidimensionales y casi-bidimensionales. En su modelo, Little consideró una cadena lineal de un polímero con grupos de moléculas laterales de alta polarizabilidad, mientras el modelo de Ginzburg consistía en una película metálica muy delgada sumergida entre dos películas dieléctricas o semiconductoras, las cuales deberían ser fuertemente polarizables para garantizar la formación de los excitones de transferencia de carga. La gran cantidad de intentos que se realizaron con el ánimo de implementar experimentalmente estos modelos no llevaron a la fabricación de superconductores de alta temperatura. Sin embargo, estos trabajos no fueron vanos, pues dieron origen a diferentes técnicas de fabricación de películas delgadas de espesor nanométrico, con las cuales hoy en día se fabrican heterojunturas semiconductoras a escala nanométrica con interfaces casi perfectas en las juntas.

En general, para fabricar estas nanoestructuras se utilizan materiales semiconductores compuestos, binarios o ternarios, lo que permite formar las heterojunturas por un cambio brusco de la concentración de uno de los componentes del compuesto. Mencionando algunos de los compuestos que se utilizan con este propósito tenemos: GaAs-AsIn, GaInAs-GaAlAs, In-GaInAs, InP-GaAs, GaSb-GaAs, InAs-Si, InSb-CdTe, etc. Dichos materiales se eligen esencialmente por presentar dos aspectos de gran importancia para el diseño de nanoestructuras: diferentes anchos de banda prohibida y parámetros de red muy parecidos. El primero relacionado con la localización de los portadores de carga al interior de la nanoestructura gracias al potencial de confinamiento que se crea debido a la diferencia que existe entre los anchos de las brechas prohibidas de los dos materiales. El segundo tiene como propósito reducir al mínimo la tensión en las juntas y por lo tanto las deformaciones en las interfaces. En la figura 1.1 puede apreciarse la relación entre el ancho de banda prohibida y el

parámetro de red que presentan algunos materiales semiconductores simples y compuestos.

La primera nanoestructura que se fabricó fue una estructura de tipo composicional o heteroestructura, conocida como superred (SL-Super Lattice), la cual estaba constituida por una serie de capas de dos semiconductores alternados con periodicidad nanométrica. Este nuevo material fue previsto en el año 1970 por los investigadores de la IBM, Leo Esaki y Ray Tsu [38], y unos años después fue obtenido en su laboratorio. Paralelamente a las superredes fue desarrollándose la fabricación y el estudio de otras estructuras conocidas como pozos cuánticos (QW-Quantum Well) [2,39], en las cuales la región que presenta homogeneidad de parámetros es una capa de espesor nanométrico. En este caso se logra confinar el movimiento de los portadores de carga en una región plana muy estrecha, de modo que su movimiento se restringe básicamente a dos dimensiones. A partir de los años 80s han sido desarrolladas nuevas técnicas para fabricar sistemas con uno y dos grados de confinamiento adicional: los hilos cuánticos (QWW-Quantum Well Wire), sistemas cuasi-unidimensionales [2,40] y la situación extrema, estructuras cuasi cero dimensionales, denominadas puntos cuánticos (QD-Quantum Dot) [2,12].

Básicamente, los diferentes métodos para crear nanoestructuras semiconductoras (y estructuras en general) se pueden dividir en dos clases. Una clase de métodos se denominan técnicas “*top-down*”. Estas técnicas se utilizan para crear estructuras a partir del “tallado” de material, implicando por ejemplo procesos de litografía y grabado como la litografía con base en rayos electrónicos (*e-beam*). Otra clase de métodos se conocen como técnicas “*bottom-up*”. Éstas se basan en el auto-ensamblado epitaxial o el crecimiento auto-organizado con el fin de generar una organización estructural de los átomos. Ésta clase de métodos implican procesos heteroepitaxiales tales como: Deposición molecular epitaxial (MBE); Deposición química metal-orgánica en la fase de vapor (MOCVD) [7] y epitaxia de fase líquida [8].

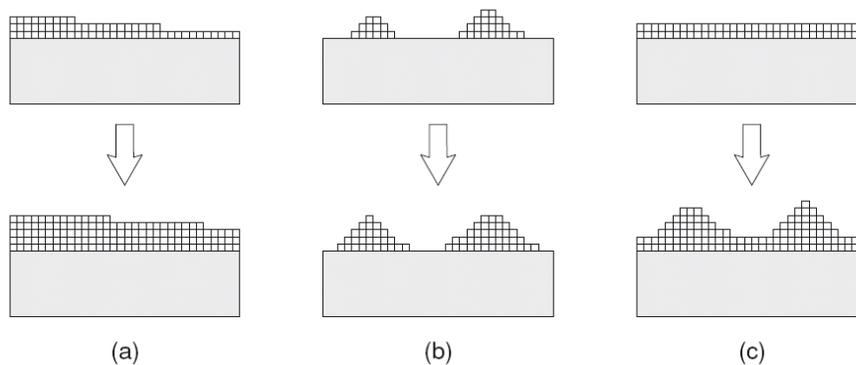


Fig. 1.2 Modos básicos de crecimiento en heteroepitaxia: (a) Frank-van der Merwe, (b) Volmer-Weber, y (c) Stranski-Krastanow.

Tres diferentes modos fundamentales de crecimiento heteroepitaxial se muestran esquemáticamente en la figura 1.2. El crecimiento capa por capa, que se muestra en (a), se denomina modo de crecimiento de Frank-van der Merwe [41]. En este modo las capas bidimensionales crecidas pueden ser utilizadas para fabricar estructuras bidimensionales, por ejemplo, QWs. 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 generando desajuste en las dislocaciones. En el crecimiento Volmer-Weber [42], por el contrario, los átomos depositados forman “islas” tridimensionales directamente sobre la superficie, como se muestra en (b). El modo de crecimiento de Stranski-Krastanow [43] que se muestra en (c), es iniciado por el crecimiento de una capa bidimensional. Generalmente conocida como capa de húmeda. Sin embargo, cuando se logra un espesor crítico (por lo general de pocas monocapas, MLs), se da lugar a la formación de una isla. Un aspecto importante en la modalidad de crecimiento auto-ensamblado de Stranski-Krastanow (SK) es que puede ser usado para la fabricación de puntos cuánticos ordenados, es decir, las islas coherente tensionadas [44].

La importancia que tiene la reducción de la dimensionalidad de una nanoestructura sobre sus propiedades físicas se puede analizar comparando las densidades de estado de los portadores de carga confinados en ellas. En la figura 1.3 se representa el notable cambio que sufre la densidad de estados al reducirse la dimensionalidad del sistema para diferentes SBD idealizados así como para semiconductor en bloque.

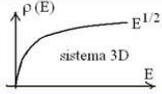
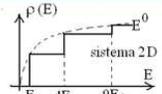
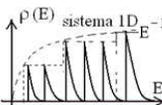
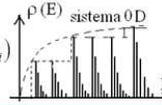
Sistema	Energía	Densidad de Estados
	$E(3D) = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + \frac{p_z^2}{2m^*}$	$\rho(E) \propto E^{1/2}$ 
	$E(2D) = E_0 n^2 + \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*}; n = 1, 2, 3, \dots$	$\rho(E) \propto E^0$ 
	$E(1D) = E_0(n^2 + m^2) + \frac{p_y^2}{2m^*}; n, m = 1, 2, 3, \dots$	$\rho(E) \propto E^{-1/2}$ 
	$E(0D) = E_0(n^2 + m^2 + l^2); n, m, l = 1, 2, 3, \dots$	$\rho(E) \propto \sum \delta(E - E_i)$ 

Fig. 1.3 Densidad de estados para un electrón confinado en diferentes sistemas de dimensionalidad reducida

Para el caso de electrones se tiene que una relación entre la densidad de estados $g(E)$ y la dimensionalidad del sistema D , puede resumirse en la expresión: $\rho(E) \propto E^{D/2-1}$, donde E es la energía del sistema. Debe tenerse en cuenta que esta expresión no incluye los sistemas cero-dimensionales, ya que para este caso el espectro que aparece es completamente discreto y la densidad de estados será una superposición de funciones delta de Dirac. En la Figura 1.3, se muestra la densidad de estados de un sistema tridimensional o semiconductor en bloque ($\rho_{3D}(E) \propto E^{1/2}$), un sistema bidimensional o pozo cuántico ($\rho_{2D}(E) \propto E^0$), un sistema unidimensional o hilo cuántico ($\rho_{1D}(E) \propto E^{-1/2}$) y un sistema cero-dimensional o punto cuántico ($\rho_{0D}(E) \propto \sum \delta(E - E_i)$). En esta figura se observa claramente como la reducción en la dimensionalidad del espacio conduce a una marcada evolución en la curva de la

densidad de estados. Puede apreciarse como al reducir una de las dimensiones del sistema, las curvas de densidad de estados que surgen para este nuevo sistema se van haciendo sucesivamente más y más estructuradas, y van manteniendo como envolvente el comportamiento de la curva del sistema inmediatamente anterior. Lo anterior permite entender cualitativamente como la reducción de la dimensionalidad del sistema producirá cambios importantes en las diferentes propiedades ópticas, como es el caso de las tasas de absorción o emisión, y también en la distribución de los portadores de carga dentro de la nanoestructura. Es interesante resaltar para el caso de un sistema cero dimensional, que el hecho de que éste exhiba una densidad de estados en forma de picos discretos es sinónimo de que todos los niveles energéticos se encuentran cuantizados por efecto del confinamiento en las tres direcciones. No obstante, debe tenerse en cuenta que para QDs reales las líneas de la densidad de estados deben presentar algún ancho debido al principio de incertidumbre y a la interacción de los portadores de carga confinados con las vibraciones de la red cristalina.

1.1.1. Puntos y Anillos Cuánticos Autoensamblados

Entre todos los tipos de nanoestructuras semiconductoras, los QDs se han destacado por su versatilidad para modelar sus propiedades opto-electrónicas y por el despliegue de una gran variedad de fenómenos cuánticos. Estos sistemas se pueden considerar básicamente como pequeños “*islotes*” semiconductoras que confinan en su interior sistemas fermiónicos de pocas partículas que interactúan mutuamente a solo algunos nanómetros de distancia, por lo que su estructura electrónica resulta ser similar a la de un átomo. Esta característica, de suma importancia para su estudio, les ha significado ser catalogados como “*átomos artificiales*”. Por supuesto, en paralelo al estudio de las propiedades físicas que emergen de estos sistemas cuasi-cerodimensionales se vislumbra un amplio horizonte para potenciales aplicaciones. Un ejemplo es el de servir como dispositivos emisores de luz de cualquier color, ya que el color de la luz emitida depende del tamaño del punto, de esta forma se tiene entonces, que un incremento en sus dimensiones conducirá emisión hacia el rojo y una reducción de éstas llevará a que la luz se acerque más al color azul.

Actualmente una variedad de QDs que goza de gran atención en extensas investigaciones, es la de los denominados puntos cuánticos autoensamblados (SAQD-Self-Assembled Quantum Dots). Estas pequeñas estructuras que en principio podrían considerarse como defectos o dislocaciones presentes en una capa de material semiconductor, son crecidas curiosamente mediante técnicas epitaxiales, inicialmente desarrolladas con el fin de obtener cristales semiconductores sin defectos en sus interfaces, como fue el caso de la obtención de pozos cuánticos con propiedades ópticas de excepcional calidad. La técnica epitaxial, tal como se mencionó anteriormente permite variantes en los modos de crecimiento, los cuales se caracterizan principalmente, 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.). Quizá el factor más importante que condiciona el crecimiento de puntos cuánticos es el desajuste de las constantes de red entre el material depositado y el sustrato (material base). Cuando éste es pequeño, alrededor de un 1%, el material depositado se acomoda a la periodicidad de la red del sustrato, de forma que la nueva capa no presenta deformaciones. Si por el contrario, el desajuste entre las constantes de red es notable, como es el caso de InAs depositado sobre un sustrato de GaAs, donde la diferencia entre los parámetros de red llega a ser

del 7% (ver figura 1.1), se tiene que únicamente las primeras capas llegan a cristalizar en forma epitaxial, pero al llegar a un espesor crítico las últimas monocapas experimentan una tensión que comprime los átomos que las conforman, llevando así a un incremento de la energía elástica de deformación. De esta manera, puede llegar un momento en que este proceso de crecimiento resulte inestable y se produzca una relajación del sistema a través de una deformación plástica, creándose entonces dislocaciones. En la medida en que la compresión lateral aumenta tiene lugar una reorganización del material depositado, propiciando la formación de “islas” de dimensiones nanométricas, las cuales reciben el nombre de puntos cuánticos autoensamblados debido al carácter espontáneo que presenta su crecimiento (el cual corresponde al modo de Stranski-Krastanow).

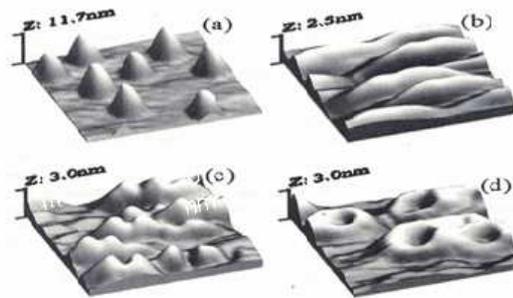


Fig. 1.4 Imágenes de AFM de 250 nm x 250 nm de SAQDs de In As/GaAs. (a) SAQDs crecidos a 540 °C, (b) SAQDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 540 °C, (c) SAQDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C, y (d) SAQDs después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 500 °C y a una presión diferente al caso (c). D. Granados *et al.* [49]

Uno de los principales atractivos de este tipo de QDs radica en la diversidad de morfologías que pueden presentar, ya que el tamaño y la forma de los SAQDs pueden modificarse ampliamente por medio de varios factores, tales como: el desajuste en las constantes de red, la temperatura y velocidad de crecimiento, etc. Usando diferentes técnicas de medición como: Microscopia de fuerza atómica (AFM) [45], barrido y tunelamiento [46], reflexión electrónica a altas energías [47] y microscopia electrónica de transmisión [48], entre otras, se ha logrado establecer que los SAQDs pueden presentar formas que se aproximan a figuras geométricas regulares (lentes, pirámides, pirámides truncadas, entre otras), que comparten una característica particular: las alturas (2-8nm) son generalmente mucho menores que los radios de sus bases (20-70nm). Mediante el modo de crecimiento de SK también se ha logrado fabricar sistemas formados por dos puntos casi idénticos. Las configuraciones más comunes corresponden al caso de puntos apilados uno encima del otro (acoplamiento vertical) o uno frente al otro (acoplamiento horizontal o lateral) [12]. Trabajos recientes han mostrado que si durante el proceso de crecimiento de SAQDs de InAs sobre GaAs, éstos se recubren con una capa delgada (2nm) de GaAs, entonces se origina una redistribución anisotrópica del material del punto, lo que alterará significativamente su morfología en dependencia con la temperatura, la presión del haz y la velocidad de deposición a la cual se realice dicho recubrimiento. En la figura 1.4 se muestran algunas imágenes de AFM, obtenidas por D. Granados y J. M. García [49], de SAQDs de InAs/GaAs que presentan morfologías completamente diferentes al variar sus condiciones de recubrimiento. Puede apreciarse como los puntos de forma cónica (imagen 3a), después de recubrirlos con una capa de 2 nm de GaAs a 540 °C, se transforman en unas estructuras alargadas (imagen 3b), mientras que en la imagen 3c se

observan unas estructuras en forma de jorobas de camello después de realizar el recubrimiento con las mismas condiciones anteriores pero bajando la temperatura a 500 °C. En la imagen 3d puede apreciarse como, al variar la presión de deposición respecto al caso anterior, se obtiene como resultado que el punto cuántico (20 nm de diámetro y 8 nm de altura) se transforma en una estructura en forma de anillo (QR- Quantum Ring) con un tamaño lateral mayor (diámetro externo entre 60 y 140 nm), una altura reducida (2-4 nm) y un hueco central bien definido (20 a 30 nm de diámetro).

La transformación de una isla en un QR ha sido descrita como una “*erupción volcánica nanoscópica*” [50]. Dos diferentes modelos se han propuesto para explicar el proceso de transformación [51]. Un modelo cinético se basa en las diferentes tasas de difusión de los átomos del grupo III, los cuales se difunden hacia el exterior y dejan un vacío en la posición inicial de la isla de InAs y dan lugar a la forma anular de la nanoestructura en forma de anillo [50, 52, 53]. Otro modelo, el termodinámico explica la aparición de la forma anular a través de formación de un gradiente de la energía libre superficial que induce una fuerza que apunta hacia el exterior [52, 54]. Como resultado, el sistema encuentra un equilibrio en una estructura tipo anillo a través de la redistribución material. Además hay posibilidad que ambos mecanismos afectan en conjunto el proceso de la formación de anillos [52].

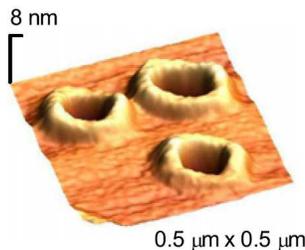


Fig. 1.5 Imágen de AFM 3D de QRs autoensamblados de InAs. A Aierken *et al* [57]

La formación de nanoestructuras en forma de anillo fue reportada por primera vez para islas de GaAs recubiertas con InAs mediante la técnica de crecimiento por epitaxia de haces moleculares en el modo de Stranski-Krastanow [53, 31, 55, 56, 57]. En la figura 1.5 se muestra una imagen de AFM 3D de algunos QRs de InAs crecidos mediante epitaxia en fase vapor metalorgánico [57]. Otro tipo de anillos cuánticos se han obtenido al recubrir arreglos de QDs de InAs con capas muy delgadas de InP [58]. Otro importante logro ha sido la fabricación de QRs de GaSb cubiertos de GaAs [59-61], los cuales se caracterizan por tener una forma toroidal, con una abertura central bien definida y además por presentar un alineamiento tipo II entre las bandas de conducción y de valencia. Este último rasgo hace que para un sistema electrón-hueco, el hueco se localice fuera del anillo, mientras el electrón se moverá dentro de la estructura anular y su movimiento estará gobernado por una combinación de la atracción Coulombiana y el potencial de confinamiento. Adicional a esto vale la pena mencionar que también ha sido reportado el crecimiento de QRs de SiGe mediante nanopartículas de oro [62], lo cual constituiría el primer ejemplo de anillos autoensamblados que no están hechos de semiconductores III-V.

1.1.2. Propiedades específicas de anillos cuánticos

Los QRs poseen una topología muy diferente respecto a las demás nanoestructuras, pues son los únicos que no presentan una geometría simplemente conexa. Esta singular característica favorece la aparición de corrientes persistentes en

presencia de campo magnético, además ofrecen la fascinante oportunidad de observar las fases en las funciones de onda electrónicas en experimentos magneto-ópticos, ya que la variación de la intensidad del campo magnético externo en estas estructuras cuasi-unidimensionales con condiciones de frontera periódicas producirá cambios en las fases de las funciones de onda electrónicas. Esto lleva a oscilaciones en las propiedades energéticas, conocidas como *oscilaciones Aharonov-Bohm* y por lo tanto a oscilaciones en cualquier otra propiedad física del anillo, tal como la magnetización. Además los QRs ofrecen una mayor posibilidad de ajustar la estructura de sus estados electrónicos; también permiten realizar variaciones topológicas que van desde un sistema bidimensional, como es el caso del disco cuántico, el cual se obtiene cuando el radio interno tiende a cero, hasta la situación casi unidimensional correspondiente al caso límite en el cual el espesor del anillo es muy pequeño. De acuerdo con la situación física real, los QRs autoensamblados presentan radios mayores que el ancho de sus secciones transversales, por lo tanto se pueden considerar como anillos delgados, facilitando la realización de estudios teóricos.

La investigación de los efectos de campos magnéticos externos sobre nano cristales resulta de gran interés porque tanto la masa efectiva de los portadores de carga como el confinamiento espacial al que se ven sometidos son menores que en la física atómica convencional, lo que posibilita la observación de fenómenos que en átomos naturales requerirían campos magnéticos con órdenes de magnitud superiores a los que pueden obtenerse hoy en día en el laboratorio. Uno de los principales atractivos que implica la disminución del tamaño de estas estructuras múltiplemente conexas hasta alcanzar el límite cuántico es la obtención de un marco adecuado para la constatación experimental del efecto Aharonov-Bohm. En esta sección se hace una descripción de este efecto y como las oscilaciones asociadas a él, se ven alteradas por algunas variaciones topológicas en los QRs

1.1.3. Efecto Aharonov-Bohm (AB)

En su artículo “*Importancia de los potenciales electromagnéticos en la teoría cuántica*”, Aharonov y Bohm predijeron en 1959 que si una onda mecano-cuántica, tal como una onda de un solo electrón, se divide en dos ondas parciales que encierran una región de campo magnético, no se producirá un cambio alguno de fase entre las dos ondas [20]. Por lo tanto, si después se recombinan, la interferencia ocurrida entre ellas depende únicamente de la cantidad de flujo magnético encerrado. Concretamente, no es el campo magnético \vec{B} , quien es importante, quien sí lo es, es el vector potencial magnético \vec{A} .

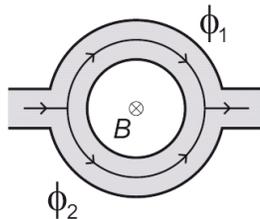


Fig. 1.6 (a) Esquema de la imagen de un anillo de Aharonov-Bohm. Una onda de un sólo electrón se divide y se recompina, encerrando un flujo magnético. La fase de acumulación a lo largo del brazo de la parte superior (inferior) del anillo, ϕ_1 (ϕ_2), se ve afectada por el potencial electrostático V , y el potencial vector \vec{A} .

Este efecto puramente mecano-cuántico también se produce si la onda correspondiente se desplaza en una región de campo magnético nulo, siempre y cuando dentro de la ruta seguida por esta onda haya una región que contiene un flujo magnético. Del mismo modo, un potencial electrostático V , contribuye a la fase, incluso en ausencia de un campo eléctrico \vec{E} . El efecto Aharonov-Bohm se puede medir en el transporte de electrones a través de un metal o un anillo mesoscópico semiconductor (ver figura 1.6). La fase ϕ , acumulada por la onda del electrón, está dada por:

$$\phi = \frac{2\pi}{h} \int (m\vec{v} + |e|\vec{A}) \cdot d\vec{s} = 2\pi \frac{|e|}{h} \int \left(\int \nabla V dt + \vec{A} \right) \cdot d\vec{s} = 2\pi \frac{|e|}{h} \left[\int V dt + \int \vec{A} \cdot d\vec{s} \right] \quad (1.1)$$

Con $\vec{E} = -\nabla V$; $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$; m y \vec{v} son la masa y la velocidad, respectivamente. La diferencia de fase entre las trayectorias a través de los dos brazos del anillo (ver Fig. 1.6).

$$\Delta\phi = \phi_1 - \phi_2 = 2\pi \frac{|e|}{h} \left[\int_0^{t_0} \Delta V dt + \int \vec{A} \cdot d\vec{l} \right] = 2\pi \frac{|e|}{h} \Delta V t_0 + 2\pi \frac{|e|}{h} BS \quad (1.2)$$

Donde ΔV es la diferencia de potencial electrostático entre el brazo superior e inferior del anillo, t_0 es el tiempo entre la separación y la recombinación de la onda del electrón, y S es el área cerrada del anillo. La primera observación experimental del efecto Aharonov-Bohm en un solo anillo metálico difusivo fue hecha por Webb *et al.* en 1985 [63]. En éste y posteriores experimentos, se observaron oscilaciones de conductancia en función del flujo magnético (Φ) con un período de h/e . Los experimentos Aharonov-Bohm demuestran que las ondas de electrones preservan su coherencia de fase en estos anillos nanoscopios.

Para mostrar las consecuencias que nos interesan en esta investigación, se considera un flujo magnético que atraviesa un QR 1D poblado con uno o dos electrones de tal modo que el campo magnético \vec{B} (perpendicular al plano del anillo) es cero más allá de su radio interno a y constante en su agujero interior, región que es inaccesible para las partículas que constituyen el sistema considerado. Este sistema puede conseguirse escogiendo el siguiente potencial vector (expresado en coordenadas cilíndricas):

$$\vec{A} = A_\varphi(\rho) \hat{u}_\varphi = \begin{cases} \frac{1}{2} B \rho \hat{u}_\varphi; & 0 < \rho < a \\ \frac{Ba^2}{2\rho} \hat{u}_\varphi; & a \leq \rho < \infty \end{cases} \quad (1.3)$$

\vec{A} cumple con el gauge de Coulomb ($\nabla \cdot \vec{A} = 0$), y genera un flujo magnético $\Phi = \pi a^2 B$ a través del agujero central del anillo. Sin embargo, el campo magnético en el seno del anillo, donde está confinada la carga, es nulo. Con este potencial vector, el Hamiltoniano que se obtiene para un electrón en el anillo equivale a realizar la sustitución (1.4) en el respectivo Hamiltoniano en ausencia de campo magnético.

$$\frac{\partial}{\partial \varphi} \rightarrow \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{ieBa^2}{2\hbar} = \frac{\partial}{\partial \varphi} + i \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (1.4)$$

donde, $\Phi_0 = 2\pi\hbar/|e|$ es el cuanto de flujo magnético.

Debido a que el sistema presenta simetría axial, la función de onda del electrón puede escribirse como $\Psi(\rho, z) e^{il_z \varphi}$ donde l_z es el número cuántico asociado a la proyección z del momento angular. Así, la presencia del campo magnético derivado del potencial

vector (1.3) implica simplemente la sustitución $l_z \rightarrow l_z + \Phi/\Phi_0$ en el conjunto de ecuaciones diferenciales $\hat{H}_{l_z}(\rho, z)\Psi(\rho, z) = E_{l_z}\Psi(\rho, z)$ obtenidas al integrar analíticamente la coordenada φ del electrón, ecuaciones que proporcionan las energías E_{l_z} del sistema. Es inmediato inferir por tanto que, siempre que el campo magnético cumpla $\Phi = n\Phi_0, n=1,2,3,\dots$, las energías obtenidas serán equivalentes a las correspondientes a campo cero. En el caso simple constituido por un electrón en un anillo unidimensional de radio a , el Hamiltoniano adimensional se expresa, como:

$$\hat{H} = -\frac{\varepsilon_0}{2} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} + i \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2; \quad \varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{m^* a^2} \quad (1.5)$$

Y sus correspondientes energías como:

$$E_{l_z} = \frac{\varepsilon_0}{2} \left(l_z + \frac{\Phi}{\Phi_0} \right)^2 \quad (1.6)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón, y $l_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. La representación de E_{l_z} (Energía renormalizada) frente a Φ [Figura 1.7] muestra intersecciones periódicas de la energía y cambios en la simetría l_z del estado fundamental del electrón, que alcanza mínimos de energía a valores enteros de Φ/Φ_0 (oscilaciones Aharonov-Bohm).

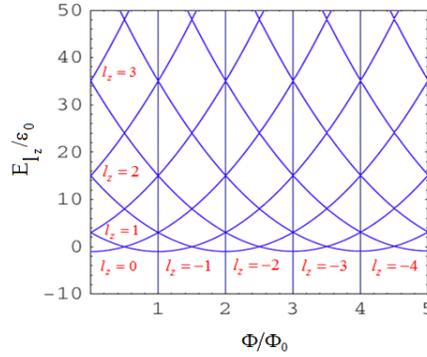


Fig. 1.7 Diagrama cualitativo de los niveles de energía (adimensional) en función del flujo magnético en un anillo unidimensional (1D QR) con un electrón capturado

En el caso de N -electrones en un anillo unidimensional, la periodicidad del espectro energético no se produce a intervalos Φ_0 del flujo magnético, sino a intervalos Φ_0/N (efecto Aharonov-Bohm fraccionario [64, 65, 66]¹). Por ejemplo, en el caso bielectrónico, esta periodicidad alterna estados fundamentales singletes y tripletes a intervalos idénticos de flujo $\Phi_0/2$.

¹ La observación experimental de esta periodicidad fraccionaria se ha logrado recientemente en QRs extremadamente delgados [67].

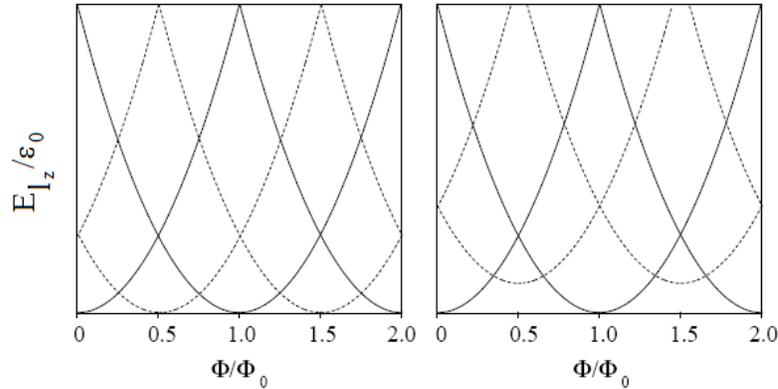


Fig. 1.8 Diagrama cualitativo de los niveles de energía (adimensional) en función del flujo magnético en un anillo con dos electrones en el caso cuando la interacción electrostática es despreciable para el modelo estrictamente unidimensional (izquierda) y casi-unidimensional (derecha). Las líneas continuas denotan estados singlete, y las discontinuas estados triplete.

1.2. SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS CONFINADOS EN NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

El estudio de los sistemas de pocas partículas en semiconductores en bloque se inició a partir de 1958, cuando M. A. Lampert [23] estableció las bases teóricas para la formación de complejos con portadores de carga de diferente tipo, los cuales él clasificó en dos grupos: móviles e inmóviles. El grupo de complejos móviles son sistemas compuestos por electrones (e) y huecos (h), los cuales están ligados entre sí por la interacción Coulombiana y se propagan a través del cristal como si fuesen un sólo ente (El sistema más simple es conocido como *Excitón* (X)). Cuando un cristal semiconductor absorbe un fotón, promueve a uno de los electrones desde una banda de valencia llena hasta una banda de conducción vacía, esto deja un estado vacío en la banda de valencia el cual se denomina hueco. Un hueco puede considerarse como una región de carga positiva neta que puede propagarse a través de la red cristalina como si se tratara de una partícula real. Una vez que se han creado en sus respectivas bandas, tanto el electrón como el hueco evolucionan rápidamente hasta alcanzar su estado de mínima energía. El electrón excitado cae hasta el fondo de la banda de conducción, en tanto que el hueco asciende hasta la parte superior de la banda de valencia. El ascenso del hueco obedece a que los electrones restantes de la banda de valencia lo van desplazando a medida que van cayendo hacia los estados disponibles de menor energía. Finalmente en aproximadamente un nanosegundo, el electrón y el hueco pueden reducir aún más su energía total enlazándose para formar un excitón.

Otros sistemas más complicados se forman cuando un excitón es capaz de ligar o enlazar un electrón o un hueco extra, formándose excitones cargados o ionizados que se conocen con el nombre de triones X^- (eeh) y X^+ (ehh), respectivamente. En caso de que la densidad de excitones sea muy grande se puede aumentar la interacción entre ellos y dar lugar a la formación de sistemas más complicados como la molécula excitónica o bi- excitón (XX).

El grupo de complejos inmóviles está formado por centros localizados en la vecindad de algún tipo de defecto, en particular, impurezas donadoras o aceptadoras. 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 (D^0). El espectro energético de una impureza donadora en un bloque de GaAs tiene una estructura tipo hidrogenoide, sin embargo la energía de ionización de una donadora en el GaAs es mucho menor que la del átomo de hidrogeno; esto se debe a que la atracción de Coulomb del ión se encuentra, en gran parte, apantallada por la naturaleza dieléctrica del cristal. Como resultado de la interacción Coulombiana, estos centros pueden atrapar electrones, huecos o excitones. Algunos de estos sistemas inmóviles son la D^- , sistema formado por una donadora neutra D^0 que ha atrapado un electrón, el D_2^0 , que se forma a partir de dos donadoras neutras, este último al ser excitado puede perder un electrón para formar un D_2^+ , entre otros. La existencia experimental de algunos de estos complejos en silicio dopado con elementos del grupo III y V fue demostrada años más tarde por Haynes [68]. Sus estudios también mostraron que en la mayoría de los casos, la observación de estos complejos en el bloque era muy complicada, debido a que dichos sistemas se forman bajo condiciones metaestables para temperaturas por encima de los 5°K, es decir que están tan débilmente ligados que la energía térmica $k_B T$ supera la energía de ionización del sistema, lo que lleva a que tengan tiempos de vida demasiado cortos ($\tau \approx 10^{-9} s$). Esta dificultad se pudo superar con la creación de las heteroestructuras semiconductoras, como fue demostrado por primera vez en 1990, en un trabajo realizado por Huan y colaboradores [69], donde se observó excitones en QWs de GaAs-GaAlAs². Este aumento en la estabilidad se debió al hecho de que el confinamiento conduce al incremento de la energía de enlace del excitón en un orden de magnitud y por lo consiguiente a una mayor estabilidad del estado base de estos complejos [71]. Adicionalmente, se pudo establecer que el espectro energético de estos sistemas es extremadamente sensible frente a cambios en la geometría, la posición de los complejos en el caso de centros localizados y a la presencia de campos externos [72].

La existencia de excitones en QDs fue confirmada experimentalmente en 1997 por Petroff y sus coinvestigadores [73], donde se demostró que los excitones en QDs son mucho más estables que en otras heterojunturas debido al fuerte confinamiento, haciendo posible su observación incluso a temperatura ambiente. Si bien es cierto que las condiciones impuestas por el potencial de confinamiento enriquecen notablemente las propiedades optoelectrónicas, también lo es que la descripción teórica de estos sistemas fermiónicos confinados artificialmente resulta ser una tarea realmente difícil, debido a que la ecuación de autovalores debe resolverse en un espacio no homogéneo, anisotrópico y multidimensional. Para analizar las propiedades de sistemas de pocas partículas en un semiconductor en bloque, Kohn y Luttinger [74, 75] desarrollaron una teoría rigurosa que permite eliminar en la ecuación de Schrödinger, para perturbaciones suaves, la parte del potencial cristalino periódico, utilizando la aproximación de masa efectiva (AME). El pionero en la aplicación de este método, en el estudio de espectros de impurezas donadoras y excitones confinados en pozos cuánticos, fue Bastard [76, 77] quien asumió que la AME se podía utilizar en heterojunturas semiconductoras, a pesar de que el potencial de confinamiento varía en forma abrupta en la interfaz de la nanoestructura. Estos trabajos pioneros han originado una serie de publicaciones en las que se han utilizado diferentes métodos aproximados para calcular las energías de

² Posteriormente un gran número de trabajos [70] ayudarían a reafirmar lo anterior.

enlace en estos sistemas, siendo quizás los más sencillos el variacional [78-80] y el de diagonalización matricial [81, 82]. Ambos métodos requieren de un considerable volumen de cómputo, el cual crece exponencialmente con el aumento del número de partículas, y además presentan importantes limitaciones en cuanto al alcance de su aplicación. El método variacional sólo permite hacer un estimativo de la energía del estado base, mientras que el método de diagonalización es poco aplicable para potenciales diferentes del parabólico. Otros métodos también usados para analizar el espectro de sistemas de pocas partículas en heteroestructuras son el de expansión por series [83], dimensión fraccionaria [84], teoría de perturbaciones [85] y diferentes técnicas numéricas tales como: Elementos y diferencias finitas [86, 87], barrido trigonométrico [88], y otras soluciones numéricas de ecuaciones diferenciales [89]. Todas estas técnicas resultan ser bastante complicadas debido a que el esfuerzo computacional crece exponencialmente con el número de partículas. Sin embargo es posible obviar esta dificultad sacando provecho de las características morfológicas de las heteroestructuras, como en el caso de los SAQDs, para los cuales la altura es mucho menor que las dimensiones de su base, lo que permite hacer uso de la aproximación adiabática (AA) [90-94]. Esta aproximación permite reducir problemas tridimensionales a problemas similares en espacios de una o dos dimensiones con Hamiltonianos renormalizados [90].

Por tener el menor volumen de todas las nanoestructuras, los QRs han resultado ser los mejores candidatos para observar y manipular sistemas de pocas partículas, que pueden ir desde un único electrón hasta complejos excitónicos. Lo que ha propiciado la elaboración de una gran cantidad de trabajos teóricos que intentan ampliar la comprensión del rol que juegan los efectos del confinamiento estructural, la presencia de defectos, la correlación entre partículas y la presencia de campos externos, sobre el comportamiento de algunos sistemas fermiónicos al ser confinados en QRs. Con el advenimiento de los primeros QRs, ha sido inusitado el volumen de trabajos que se han realizado sobre sistemas de pocas partículas en QRs, considerando desde modelos unidimensionales (1D QR) hasta modelos tridimensionales (3D QR). Para el caso de un electrón en un solo QR, se cuenta con un gran número de trabajos, en los cuales se estudian diversos aspectos como por ejemplo: efectos de polarización inducida por excentricidad y campos eléctricos externos sobre las propiedades opto-electrónicas [95], la degeneración del espectro energético con un campo magnético y en presencia de interacciones spin-orbita [96], los efectos que puedan inducir defectos estructurales, como la forma y el ancho del anillo, sobre el espectro electrónico de QRs, cuando se tiene la presencia de un campo magnético uniforme [97, 98]. No obstante, parte de los esfuerzos en estos últimos años se han enfocado en el estudio de una partícula en un QR. Esfuerzos que se han encaminados hacia la solución de modelos que se asemejen cada vez más a la forma real que presentan los QRs, y con ello conseguir dar una interpretación satisfactoria a los resultados experimentales. Una prueba de esto son los trabajos de Filikhin [99] y Fomin [100], quienes implementaron modelos de QRs tridimensionales con parámetros geométricos tomados de medidas experimentales, y determinaron el espectro energético incluyendo el efecto de campo magnético. También han sido halladas algunas soluciones analíticas exactas al problema de un electrón confinado en un QR tridimensional [101] y para un QR bidimensional [102]. Por otro lado, para analizar los efectos de correlación electrón-electrón, se han realizado algunos estudios sobre dos electrones confinados en un QR [92, 103, 104], y confinados en un sistema de dos anillos verticalmente acoplados, con un electrón atrapado en cada anillo [105]. La evidencia experimental del crecimiento de QRs concéntricos ha

motivado el estudio de un electrón [106] y varios electrones [107] confinados en dos anillos concéntricos, bajo la influencia de campo magnético.

Uno de los complejos móviles que resulta más interesante de estudiar en estas estructuras de forma anular, bajo la influencia de un campo magnético, es el excitón. Al ser un ente neutro, no se esperaba que presentara sensibilidad alguna al flujo magnético, ya que como es bien sabido el origen físico de la sensibilidad al flujo magnético que experimenta un electrón en un QR se debe a su carga, la cual se acopla al potencial vectorial. Por lo tanto, un excitón, siendo un estado ligado de un electrón y un hueco, no debería ser sensible al flujo, ya que el acoplamiento con el flujo resulta de signo opuesto para el electrón y para el hueco. Sin embargo, el excitón es una partícula compuesta, por lo tanto polarizable, y en este caso el área barrida por las trayectorias del electrón y el hueco será diferente y determinará la fase acumulada por el excitón [108, 109]. En este sentido, se ha mostrado teóricamente que la posible aparición del efecto AB para excitones puede ser estimulada cuando el excitón es radialmente polarizado mediante un campo eléctrico [110, 111] o debido a la presencia de una impureza [112]. A pesar de esto, la existencia de las oscilaciones AB de excitones neutros en QRs tipo I, cuando ambas partículas están confinadas en el anillo, sigue siendo motivo de controversia en los últimos años, ya que algunos trabajos predicen que las oscilaciones AB pueden ser muy débiles o incluso pueden no aparecer para un anillo de ancho finito [113, 114]. Por otro lado, algunos cálculos teóricos [115-117] determinan que para el caso de QRs tipo II, es más factible la observación de las oscilaciones AB debido a la asimetría presente en el confinamiento efectivo para el electrón y el hueco. Esto permite a que el electrón y el hueco recorran trayectorias con diferentes radios efectivos y por lo tanto, después de dar una vuelta, acumulen fases diferentes debido a que el flujo magnético que atraviesa sus trayectorias es diferente. Desde el punto de vista experimental, se tiene que recientemente ha sido demostrada la existencia de una débil interferencia tipo AB para excitones en QRs semiconductores tipo I [118] y tipo II [119].

Es claro que el amplio número de trabajos teóricos y experimentales realizados actualmente sobre nanoestructuras semiconductoras, demuestran el gran interés de los investigadores por establecer los factores que más significativamente influyen en el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en SBD bajo condiciones de fuerte confinamiento, ya sea estructural o por medio de campos eléctricos y magnéticos, debido a que éstos son los que en última instancia van a determinar su aplicabilidad tecnológica.

1.3. APROXIMACIÓN DE LA MASA EFECTIVA (AME)

Un bloque de material semiconductor es en esencia un conjunto de un inmenso número de núcleos atómicos con sus respectivos electrones. Para poder determinar los estados estacionarios y el espectro energético de tal sistema de partículas se debe resolver la ecuación de Schrödinger para el cristal, lo cual resulta prácticamente imposible debido a que el número de variables independientes que describen el sistema está determinado por el número total de partículas del cristal. Por lo tanto frente a estas limitaciones, se hace necesario hacer una serie de aproximaciones sucesivas para poder obtener resultados razonables. Como primera aproximación se divide todo el sistema de partículas en livianas (electrones) y pesadas (núcleos atómicos). Puesto que la masa del núcleo es mucho mayor que la masa del electrón, se tiene entonces que las velocidades

de los electrones superan notoriamente a las velocidades de los núcleos (aproximadamente dos órdenes). Esto permite considerar, en primera aproximación, el movimiento de los electrones en un campo de potencial de núcleos fijos. Tal consideración es conocida como *aproximación adiabática (AA) o de Born-Oppenheimer*. Para reducir aún más el número de variables que se tienen, se entra a considerar que los núcleos y sus electrones internos están tan fuertemente ligados que se pueden considerar como una única partícula, de tal forma que cada uno de estos puntos de la red cristalina se considera como una coraza iónica cuya carga neta es la del núcleo menos la de sus electrones internos que lo apantallan. Por lo tanto, para los únicos electrones que se va a considerar variables de movimiento será para los electrones de valencia. A esta aproximación se le conoce como *aproximación de valencia*. A pesar de las simplificaciones ya hechas, todavía resta un Hamiltoniano que incluye las órbitas de todos los electrones de valencia, lo cual es un número todavía extraordinariamente grande (10^{23} electrones por cm^3). El siguiente gran paso, es suponer que cada electrón de valencia percibe aproximadamente un mismo potencial promedio efectuado por todos los otros electrones, el cual, debido a las simetrías de la red cristalina, se puede suponer periódico. Esta consideración es denominada *aproximación de campo promedio*.

Como se ha mencionado anteriormente, los electrones en nanoestructuras semiconductoras se mueven en la presencia de no menos de 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, cuya escala es del orden de Angstrom, varían por lo general mucho más rápido que los demás. En este caso, asumiendo que los estados electrónicos tienen energías cercanas al piso de la banda de conducción o cerca del techo de la banda de valencia, una descripción usada en teoría de semiconductores establece que el problema original de un electrón que se mueve en la presencia de los potenciales atómicos así como de otros campos puede ser sustituido por un problema mucho más simple con una masa diferente para el electrón, m^* llamada masa efectiva, que se mueve en la presencia de solo campos externos, bajo la condición de que estos campos no deben variarse bruscamente respecto a la escala de la constante de red cristalina del material. Esta aproximación (aproximación de masa efectiva) se utiliza con éxito para analizar las propiedades de semiconductores en bloque. En la mayoría de semiconductores *la masa efectiva de los electrones* es 10-20 veces menor que la masa del electrón libre m_e . Por ejemplo en una aleación de GaAs la masa efectiva del electrón es $m^* = 0.067m_e$ y la masa efectiva del hueco es casi siempre un poco mayor que la masa efectiva del electrón. Además, en la mayoría de los casos la masa efectiva es anisotrópica, es decir depende de la dirección del movimiento. En el caso de las nanoestructuras por lo general esta masa adicionalmente depende de la posición del electrón, es decir, varía en los diferentes lados de la barrera. En la figura 1.9 se representa un diagrama cualitativo de la sustitución del potencial cristalino del material por un pozo de potencial, en el cual ahora las partículas poseen una masa igual a la masa efectiva.

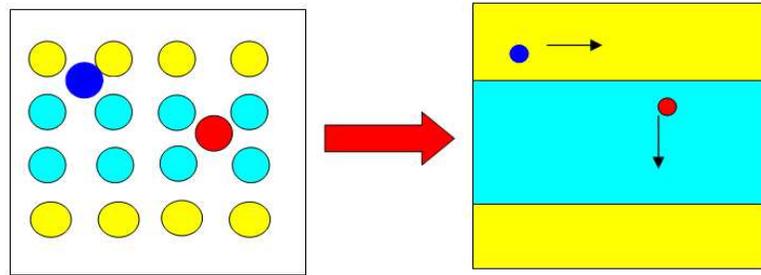


Fig. 1.9. Aproximación de masa efectiva aplicada a heterojunturas semiconductoras, permite reemplazar el potencial periódico por un pozo de potencial y al mismo tiempo reemplazar las masas de partículas por sus masas efectivas

1.4. APROXIMACIÓN ADIABÁTICA (AA)

La AA en Mecánica Cuántica comúnmente se utiliza para los sistemas que consisten de dos subsistemas, partículas pesadas y partículas ligeras. La AA permite analizar el movimiento de estos dos subsistemas por separado, inicialmente el movimiento rápido de las partículas ligeras y después el movimiento lento de las partículas pesadas. Matemáticamente el procedimiento AA consiste en la separación en la ecuación de Schrödinger de las variables para las cuales los operadores correspondientes a la energía cinética tienen escalas diferentes debido a una gran diferencia en las masas de las partículas de estos dos subsistemas.

Un procedimiento similar puede utilizarse para separar las variables en la ecuación de Schrödinger para un sistema de partículas confinadas en SAQD aprovechando el acontecimiento relacionado con una gran diferencia en las dimensiones que tienen los SAQDs en las direcciones: del crecimiento y lateral. Los SAQDs con topología de anillo exhiben estructuralmente un radio exterior entre 30 y 70nm, el radio del agujero central está entre los 20 y 30 nm, mientras que su altura varía entre 2 y 4nm. Esta evidencia experimental hace que se puedan tratar como anillos delgados (sus alturas son tan pequeñas que pueden considerarse casi planos) con un confinamiento en la sección transversal mucho más fuerte que el confinamiento en la dirección lateral, y por lo tanto, todos los portadores de carga confinados presentarán un movimiento transversal rápido y otro movimiento lateral relativamente lento. Esto permite que se pueda aplicar con confianza la aproximación adiabática para desacoplar el movimiento transversal rápido, del movimiento lateral lento, lo cual facilita en gran medida la realización de estudios teóricos sin dejar de lado la incidencia de las características estructurales del anillo.

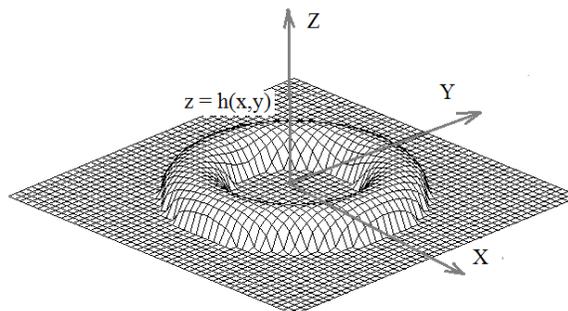


Fig. 1.10 Representación esquemática de un SAQD con topología de anillo

Para ilustrar cuantitativamente la validez de AA para el estudio de sistemas de pocas partículas confinadas en SAQDs, consideremos la estructura de una película delgada presentada esquemáticamente en la figura 1.10, con un espesor h variable cuya dependencia de las coordenadas cartesianas está definida a través de una función $h = h(x, y)$. Consideremos además un sistema de partículas idénticas de masas m y un potencial de confinamiento en forma rectangular, es decir $V_c(x, y, z) = 0$ dentro y $V_c(x, y, z) = V_0$ fuera de la película, donde V_0 es altura de la barrera. Consideremos dos escalas para el espesor máximo $d = \max\{h(x, y)\}$ y la dimensión lateral $R = \max\{|x|, |y|\}$. En la mayoría de SAQDs estas dos dimensiones satisfacen la condición $d/R \ll 1$ según la cual el movimiento de las partículas en la dirección z es mucho más rápido en comparación con las direcciones x y y , acontecimiento que nos permite aprovechar las ventajas de la utilización de la AA.

Para un sistema de n partículas idénticas el Hamiltoniano tiene la forma:

$$H = \sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x_i, y_i} + U(x_i, y_i, z_i) \right\}; \quad (1.7)$$

$$U(x_i, y_i, z_i) = V_c(x_i, y_i, z_i) + V_{ext}(x_i, y_i, z_i) + \sum_{j \neq i}^n V_{int}(|\vec{r}_i| - |\vec{r}_j|)$$

En esta expresión los dos primeros términos corresponden a la energía cinética para los movimientos transversal y lateral, respectivamente, mientras que el último término es la energía potencial compuesta por los potenciales de confinamiento, campos externos y de la interacción entre las partículas.

Una característica específica de los SAQDs consiste en que las dimensiones de desplazamientos de las partículas en las direcciones transversal y lateral tienen diferentes escalas. Estas escalas se pueden hacer similares usando el cambio de las variables

$$x_i = \tilde{x}_i R; \quad y_i = \tilde{y}_i R; \quad z_i = \tilde{z}_i R \quad (1.8)$$

Con lo cual el nuevo Hamiltoniano re-escalado adquiere la forma:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_r + \tilde{H}_l; \quad \tilde{H}_r = \sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2md^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}_i^2} + U(\tilde{x}_i, \tilde{y}_i, \tilde{z}_i) \right\}; \quad \tilde{H}_l = -\left(\frac{d}{R}\right)^2 \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2md^2} \Delta_{\tilde{x}_i, \tilde{y}_i} \quad (1.9)$$

Esta nueva forma del Hamiltoniano muestra claramente la posibilidad de considerar los movimientos a lo largo de la dirección z (rápido, dado por el Hamiltoniano H_r) y el movimiento en el plano (lento, dado por el Hamiltoniano H_l) por separado. En el procedimiento AA el segundo término en el Hamiltoniano (1.9) se considera como una perturbación cuyo aporte en la energía total es mucho menor que el aporte del primer término, siendo por lo tanto como el parámetro de “pequeñez” que define la aplicabilidad de la AA $\alpha = (d/R)^2$.

La separación del Hamiltoniano en el espacio actual es similar a la representación (1.9) en las coordenadas re-escaladas y está dada por:

$$H = H_r + H_l; \quad H_r = \sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + U(x_i, y_i, z_i) \right\}; \quad H_l = -\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x_i, y_i} \quad (1.10)$$

Siguiendo el esquema estándar de la AA, primero se analiza el movimiento rápido de las partículas (a lo largo de eje z) congelando temporalmente los movimientos en el plano XY. Con este fin se resuelve la ecuación de Schrödinger:

$$\sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + U(x_i, y_i, z_i) \right\} f_Z = E_Z(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n) f_Z; \quad (1.11)$$

$$f_Z = f_Z(z_1, z_2, \dots, z_n / x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n)$$

Las coordenadas $x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n$ en estas ecuaciones se consideran como los parámetros y las ecuaciones (1.11) deben resolverse para diferentes configuraciones del sistema, dadas por diferentes combinaciones de los parámetros $x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n$. El resultado fundamental de esta etapa de la AA es la obtención de la energía del movimiento rápido que define una superficie de potencial $E_Z(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n)$. Una vez encontrada esta dependencia se puede analizar en la segunda etapa el movimiento lento, resolviendo la siguiente ecuación de onda:

$$\sum_{i=1}^n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{x_i, y_i} + E_Z(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n) \right\} \Psi_{X,Y} = E \cdot \Psi_{X,Y}; \quad (1.12)$$

$$\Psi_{X,Y} = \Psi_{X,Y}(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n)$$

Los valores propios del problema de contorno (1.12) definen las energías de los niveles más bajos del sistema de partículas mientras que las funciones de onda correspondientes a estos estados se encuentran mediante la siguiente expresión:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = f_Z(z_1, z_2, \dots, z_n / x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n) \Psi_{X,Y}(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n) \quad (1.13)$$

Cuyas variables desacoplan el problema en dos problemas independientes: (1.11) para una función de onda con n variables que describe el movimiento rápido a lo largo de eje z y (1.12) para otra función de onda con $2n$ variables que describe el movimiento lento en el plano X, Y .

En esta tesis, en el análisis del movimiento lento nosotros resolvemos la ecuación (1.11) utilizando un resultado aproximado que permite encontrar la solución correspondiente en forma de cuadraturas. Teniendo en cuenta que en el movimiento rápido de cada partícula a lo largo del eje z el potencial de confinamiento tiene una forma rectangular (igual a cero dentro del pozo con grosor $h = h(x, y)$ y es igual a V_0 fuera del pozo) podemos expresar la solución de la ecuación (1.11) en términos de la función de onda $f_0(z, w, V_0)$ y de la energía $E_0(w, V_0)$ correspondientes al estado base de una partícula en un pozo cuántico rectangular con grosor w y altura de la barrera V_0 . Las Expresiones correspondientes se expresan en términos de la solución de una ecuación trascendente, tal como se conoce del curso de Mecánica Cuántica. Utilizando estas notaciones podemos representar la parte de la función de onda correspondiente al movimiento rápido en la forma:

$$f_Z(z_1, z_2, \dots, z_n / x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n) \approx \prod_{i=1}^n f_0(z_i, h(x_i, y_i), V_0) \quad (1.14)$$

La energía correspondiente a este estado se expresa entonces, en las siguientes cuadraturas:

$$E_Z(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n) = \sum_{i=1}^n \left\{ E_0(h(x_i, y_i) + \overline{V_{ext}(x_i, y_i)}) + \sum_{j \neq i}^n \overline{V_{int}(x_i, y_i, x_j, y_j)} \right\};$$

$$\overline{V_{ext}(x_i, y_i)} = \int V_{ext}(x_i, y_i, z_i) f_0^2(z_i, h(x_i, y_i), V_0) dz_i; \quad (1.15)$$

$$V_{int}(x_i, y_i, x_j, y_j) = \int dz_i \int dz_j V_{int}(|\vec{r}_i| - |\vec{r}_j|) f_0^2(z_i, h(x_i, y_i), V_0) f_0^2(z_j, h(x_j, y_j), V_0)$$

La expresión (1.14) junto con la ecuación (1.12) permiten reducir el problema 3D para un sistema de n partículas a un problema 2D similar. Sin embargo, cuando el número de partículas es mayor a dos, la cantidad de variables sigue siendo lo suficientemente

alta para analizar el problema sin las aproximaciones adicionales, o sin aplicación de algunas técnicas numéricas que permitan reducir el orden del problema aun más. Una de estas técnicas (utilizada en esta tesis en los capítulos siguientes) es el método de Galerkin.

1.5. MÉTODO DE GALERKIN

En matemáticas, en el área de análisis numérico, el método de Galerkin³ es un medio para la conversión de un problema de contorno para una ecuación diferencial a un problema de álgebra lineal ó proyectar un sistema de alta dimensión a un sistema de menor dimensión. El método propuesto por el matemático ruso Boris Galerkin se basa en una restricción de las posibles soluciones a un espacio más pequeño que el original y su formulación abstracta es casi trivial. Consideremos un problema de valores y funciones propias de un operador:

$$\hat{H}|\psi_k\rangle = E_k|\psi_k\rangle; k=1,2,3,\dots \quad (1.16)$$

Suponemos que el problema (1.16) es suficientemente complicado para ser resuelto en una forma exacta. Sin embargo, existe otro problema con las mismas condiciones de frontera que es separable y cuyas soluciones exactas son conocidas:

$$\hat{H}_0|\psi_k^{(0)}\rangle = E_k^{(0)}|\psi_k^{(0)}\rangle; k=1,2,3,\dots \quad (1.17)$$

El conjunto de las funciones $|\psi_k^{(0)}\rangle; k=1,2,3,\dots$ forman una base completa y por eso la solución del problema (1.16) puede expresarse como una serie de Fourier generalizada:

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} C_k |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (1.18)$$

La representación (1.18) es exacta y al sustituir (1.18) en (1.16) se obtiene un sistema de ecuaciones algebraicas lineales de orden infinito respecto de las incógnitas C_k . Para simplificar el problema restringiremos el número de las funciones de base, es decir utilizaremos solamente una parte del espacio completo, su sub-espacio:

$$|\psi_A\rangle = \sum_{k=1}^N C_k |\psi_k^{(0)}\rangle \quad (1.19)$$

Como la función (1.19) no es la solución exacta, esta no satisface la ecuación (1.16) y se analizar la siguiente discrepancia:

$$D|\psi_A\rangle = (\hat{H} - E)|\psi_A\rangle = \sum_{k=1}^N C_k (\hat{H} - E)|\psi_k^{(0)}\rangle \quad (1.20)$$

Para un conjunto de funciones incompleto. Sin embargo, podemos al menos sugerir que esta discrepancia se anule en el sub-espacio escogido, es decir, que las proyecciones de esta discrepancia sobre los vectores de base del sub-espacio sean nulas:

$$\langle \psi_k^{(0)} | D|\psi_A\rangle = \langle \psi_k^{(0)} | (\hat{H} - E)|\psi_A\rangle = \sum_{k'=1}^N \langle \psi_k^{(0)} | (\hat{H} - E)|\psi_{k'}^{(0)}\rangle C_{k'} = 0; k=1,2,\dots,N \quad (1.21)$$

Este sistema de ecuaciones es similar a un problema de valores y vectores propios para una matriz de orden N :

$$\sum_{k=1}^N (\hat{H}_{k,k} - E\delta_{k,k'}) C_k = 0; k=1,2,\dots,N; \hat{H}_{k,k'} = \langle \psi_k^{(0)} | \hat{H} | \psi_{k'}^{(0)}\rangle \quad (1.22)$$

De esta manera el método de Galerkin permite reducir el problema de valores propios para una matriz de orden infinito a un problema similar para otra matriz de orden finito.

³ Vidar Thomée, *Galerkin Finite Element Methods for Parabolic Problems*, second edition, Springer (2006)

La ecuación secular (1.22) del método de Galerkin se puede describir en una forma diferente al representar el Hamiltoniano del sistema en la forma:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V; V = \hat{H} - \hat{H}_0 \Rightarrow \hat{H}_{k,k'} = E_k^{(0)} \delta_{k,k'} + V_{k,k'}$$

$$\sum_{k'=1}^N \left[V_{k,k'} - (E - E_k^{(0)}) \delta_{k,k'} \right] C_{k'} = 0; k = 1, 2, \dots, N; V_{k,k'} = \langle \psi_k^{(0)} | (\hat{H} - \hat{H}_0) | \psi_{k'}^{(0)} \rangle \quad (1.23)$$

A continuación presentamos el algoritmo general que realiza un procedimiento numérico en el marco del método de Galerkin para analizar las propiedades espectrales de un sistema de pocas partículas confinado en una heterojuntura.

- 1) Un sistema con n grados de libertad descrita por n coordenadas $\{q_i, i=1, 2, \dots, n\}$ generalizadas con un Hamiltoniano $\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_n)$ no separable lo representamos en la forma:

$$\hat{H}(q_1, q_2, \dots, q_n) = \hat{H}^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_n) + V(q_1, q_2, \dots, q_n); V = \hat{H} - \hat{H}^{(0)} \quad (A1)$$

donde $\hat{H}^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_n)$ es una parte separable del Hamiltoniano, es decir,

$$\hat{H}^{(0)}(q_1, q_2, \dots, q_n) = \sum_{i=1}^n \hat{H}_i(q_i) \quad (A2)$$

- 2) Se resuelve el problema de valores y funciones propias para la parte separable del Hamiltoniano:

$$\hat{H}_i(q_i) f_{n_i}^{(i)}(q_i) = E_{n_i}^{(i)} f_{n_i}^{(i)}(q_i); i = 1, 2, \dots, n; n_i = 1, 2, 3, \dots$$

(A3)

Correspondientes a diferentes estados (definidos cada uno por un conjunto de n números cuánticos) con las energías:

$$E^{(0)}(n_1, n_2, \dots, n_n) = \sum_{i=1}^n E_{n_i}^{(i)} \quad (A4)$$

- 3) Se construye una tabla en la cual los estados se ordenan según el crecimiento de las energías de los estados:

$$E^{(0)}(k) = E^{(0)}(n_1(k), n_2(k), \dots, n_n(k)); E^{(0)}(k) < E^{(0)}(k+1); k = 1, 2, 3, \dots, N$$

k	$n_1(k)$	$n_2(k)$...	$n_n(k)$	$E^{(0)}(k)$
1	$n_1(1)$	$n_2(1)$...	$n_n(1)$	$E^{(0)}(1)$
...
N	$n_1(N)$	$n_2(N)$...	$n_n(N)$	$E^{(0)}(N)$

Las funciones de onda correspondientes a estos N niveles más bajos se definen como

$$|k\rangle = \prod_{i=1}^n f_{n_i(k)}^{(i)}(q_i); k = 1, 2, 3, \dots, N \quad (A5)$$

- 4) Se calculan los elementos matriciales de la perturbación:

$$V_{k,k'} = \langle k | V | k' \rangle = \prod_{i=1}^n \prod_{j=1}^n \int f_{n_i(k)}^{(i)}(q_i) f_{n_j(k')}^{(j)}(q_j) dq_i dq_j; k, k' = 1, 2, 3, \dots, N \quad (A6)$$

- 5) Se resuelve la ecuación secular:

$$\sum_{k'=1}^N \left[V_{k,k'} - (E - E^{(0)}(k)) \delta_{k,k'} \right] C_{k'} = 0; k = 1, 2, \dots, N \quad (A7)$$

Capítulo 2

MODELO SEPARABLE PARA UN QD TIPO CRÁTER

En la mayoría de los estudios teóricos de las propiedades de sistemas de pocas partículas confinadas en SAQDs se consideran los modelos idealizados que poseen la simetría axial y para los cuales el Hamiltoniano uní-particular es separable. El uso de este tipo de modelos permite analizar el espectro energético de los sistemas de pocas partículas en términos de los estados estacionarios rotacionales. Mientras tanto, los SAQDs fabricados en realidad tienen defectos estructurales de diferentes tipos (distorsiones) que rompen la simetría axial y de esta manera producen la localización de diferentes estados rotacionales. Este capítulo tiene como objetivo general dar respuesta a la pregunta: ¿En qué medida, las distorsiones pueden estimular la localización de los estados uní-particulares rotacionales, y de esta manera cambiar las propiedades eléctricas y ópticas de sistemas de pocas partículas confinadas en SAQD? En el análisis que presentamos a continuación se hace énfasis en el estudio del efecto de apagamiento de diferentes estados rotacionales que aparecen en la presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento del anillo bajo la influencia de los defectos morfológicas.

En este capítulo se propone un modelo que a pesar de que no posee la simetría axial permite encontrar las energías y funciones de onda de los estados uní-particulares en una forma exacta. Para justificar el uso de este modelo presentamos en la figura 2.1 una estructura real de QRs [120] (morfología 3D revelada por AFM). Se puede ver que todos los QDs fabricados en esta investigación tienen una estructura anular en la cual a partir de un hueco central el grosor de la capa que forma un QD crece casi en una forma lineal, pero debido a la presencia de los defectos estructurales este crecimiento no es isotrópico. En primer lugar, la tangente que forma el grosor con el plano horizontal es diferente para diferentes direcciones, incluso en algunas direcciones, correspondientes a la interrupción de la estructura anular, la tangente es nula. El modelo planteado a continuación tiene una morfología similar y presenta un cráter cuyo grosor aumenta linealmente con la distancia al centro del mismo, pero la tangente del crecimiento del grosor en diferentes direcciones puede variarse en una forma arbitraria. Mas adelante se demuestra que la ecuación de onda uní-particular para el electrón confinado en dicha estructura es completamente separable en el límite adiabático. Una vez encontradas las soluciones analíticas para este modelo, estas a continuación pueden ser utilizadas como funciones de base (en el marco del método de Galerkin) para analizar los efectos de los campos magnéticos externos y de la interacción electrostática entre partículas sobre el espectro energético en la presencia de la no homogeneidad estructural.

A pesar de que los resultados de este capítulo son aplicables para SAQDs con diferentes composiciones químicas, en los cálculos presentados a continuación para modelar la estructura de forma anular utilizaremos los parámetros geométricos y físicos de los SAQDs hechos del material de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ y sumergidos dentro de una matriz de $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ para comparar nuestros resultados con los datos experimentales y los cálculos teóricos de otros autores [121]. En nuestros cálculos además hemos despreciado el desajuste que existe en las juntas tanto de la constante dieléctrica,

como de la masa efectiva de los portadores de carga, y hemos tomado los valores correspondientes a la región interior del QD debido a que el confinamiento hace que los portadores de carga se encuentren fundamentalmente en esta región. En el sistema ternario de $In_{0.55}Al_{0.45}As$ la constante dieléctrica es: $\epsilon=12.71$ y masas efectivas para electrón y hueco pesado son: $m_e^*=0.076m_0$ y $m_h^*=0.45m_0$, respectivamente, donde m_0 es la masa del electrón en el vacío. La constante de red del material del anillo es cercana a los 0.6 nm . En los cálculos realizados se considera un modelo con discontinuidades en las juntas, para la BC de valor $V_e = 258\text{meV}$ y en BV de valor $V_h = 172\text{meV}$ [121].

Utilización de estos parámetros físicos nos permite definir para esta estructura escalas típicas de la distancia (radio de Bohr efectivo), de la energía (Rydberg efectivo) y del campo magnético para adimensionar las respectivas ecuaciones y así reducir el número de los parámetros que intervienen en la programación. Para el caso uno o varios electrones, el radio de Bohr efectivo correspondiente a estos parámetros del material es $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2 \approx 8.86\text{nm}$, el Rydberg efectivo es $Ry^* = e^2 / 2a_0^* \epsilon \approx 6.40\text{meV}$ y la unidad de campo magnético es $\gamma = e\hbar B / 2m_e^* c Ry^*$; $B = 8.4\text{T}$. Mientras que para el caso del excitón, tenemos que el radio de Bohr y el Rydberg efectivo son iguales a $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / \mu e^2 \approx 10.36\text{nm}$ y $Ry_y^* = e^2 / 2\epsilon a_0^* \approx 5.47\text{meV}$, donde $\mu = m_e^* m_h^* / (m_e^* + m_h^*) \approx 0.065m_0$ representa la masa efectiva, y la unidad de campo magnético es $\gamma = e\hbar B / 2\mu^* c Ry_y^*$; $B = 6.7\text{T}$.

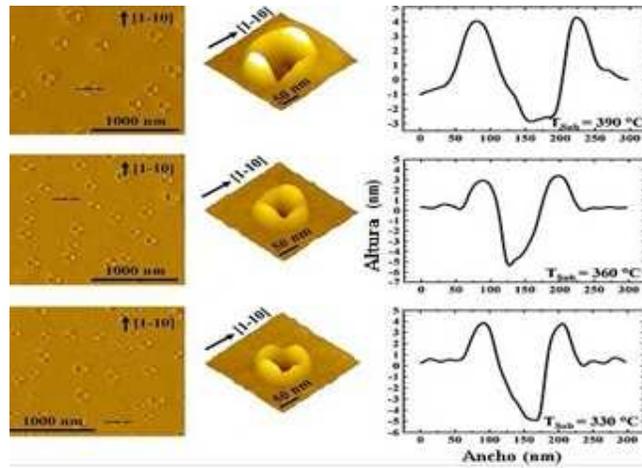


Fig. 2.1. Imágenes reales de la morfología de la superficie [2-dimensiones (izquierda) y 3-dimensiones (centro)] reveladas por AFM [120] y representación del perfil (derecha) de un anillo cuántico.

2.1. MODELO DE CONFINAMIENTO ESTRUCTURAL

Como se mencionó anteriormente, la morfología real de un QR es más parecida a la de un volcán con un cráter bien definido. Un primer modelo idealizado de esta estructura basado en esta morfología considera un cráter perfecto, cuyo espesor (dirección de crecimiento- z) d crece linealmente con la distancia ρ al centro del mismo de acuerdo a la función:

$$d(\rho, \varphi) = h_0 \rho \vartheta(\rho - \rho_a) \vartheta(\rho_b - \rho) / \rho_b \sqrt{1 + \sigma \rho^2 f(\varphi)} \quad (2.1)$$

Dada en coordenadas cilíndricas. Donde $\vartheta(\rho)$ es la respectiva función de paso de Heaviside la cual es igual a cero para $\rho < 0$ y a uno para $\rho > 0$. La morfología de tal estructura es definida por los parámetros geométricos que caracterizan la simetría axial del QR: ρ_a, ρ_b son el radio interno y externo del anillo, respectivamente, h_0 la altura máxima del cráter, el parámetro σ ($|\sigma| \leq 1$) y la función $f(\varphi)$ describen el nivel de no-uniformidad y forma del cráter (para el caso del cráter perfecto se tiene que $\sigma = 0$). En la figura 2.2 se representa el modelo 3D para un cráter perfecto y la variación (se representa una variación lineal y constante) del grosor del cráter respecto a la variable radial ρ .

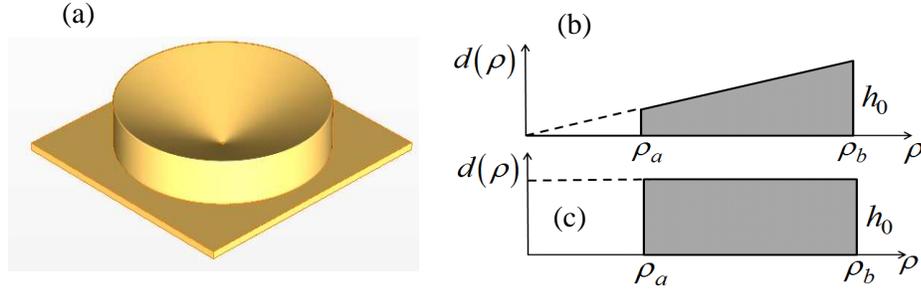


Fig. 2.2. Modelo estructural de punto cuántico tipo cráter perfecto (a) y perfil del punto cuántico modelo como anillo con altura variable (b) y con altura constante (c).

Para este sistema estructural, hemos considerado un modelo simplificado de barrera infinita, en el cual el potencial de confinamiento $V(\rho, \varphi, z)$ es igual a cero en el interior del cráter y a infinito fuera de él. Este potencial de confinamiento se representa de la siguiente forma:

$$V^{(3D)}(\rho, z) = \begin{cases} 0; & \rho_a \leq \rho \leq \rho_b \cup 0 \leq z \leq d(\rho, \varphi) \\ \infty; & \text{otro caso} \end{cases} \quad (2.2)$$

2.2. HAMILTONIANO PARA UN ELECTRÓN EN UN QD CON FORMA DE CRÁTER PERFECTO

Dentro del marco de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano adimensional que describe el electrón en el QD, en presencia de un campo magnético perpendicular al plano del anillo ($\vec{B} = B \hat{z}$), en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) , está dado como:

$$H^{(3D)}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{2m^*} \left[\vec{P} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 + V^{(3D)}(\rho, z) \quad (2.3)$$

El operador de momentum en coordenadas cilíndricas esta dado por $\vec{P} = -i\hbar \nabla$. Con lo cual el Hamiltoniano (2.3) se puede expresar como:

$$H^{(3D)}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{2m^*} \left[-\hbar^2 \nabla^2 - i\hbar \frac{e}{c} \vec{A} \cdot \nabla - i\hbar \frac{e}{c} \nabla \cdot \vec{A} + \left(\frac{e}{c} \right)^2 \vec{A}^2 \right] + V^{(3D)}(\rho, z) \quad (2.4)$$

Haciendo uso de la propiedad $\nabla \cdot (\vec{A}\psi) = \vec{A} \cdot \nabla \psi + (\nabla \cdot \vec{A})\psi$ y del Gauge de Coulomb $\nabla \cdot \vec{A} = 0$, se obtiene:

$$H^{(3D)}(\rho, \varphi, z) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{i\hbar e}{m^* c} \vec{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{2m^* c^2} \vec{A}^2 + V^{(3D)}(\rho, z) \quad (2.5)$$

Para introducir el campo magnético en dirección del eje de simetría (eje Z), hemos tomado un potencial vectorial magnético según el gauge de Coulomb, esto es $\vec{A} = (\vec{B} \times \vec{\rho})/2$. Según esta consideración y haciendo uso de las unidades efectivas (Radio de Bohr efectivo, Rydberg efectivo y factor de la Landau), el Hamiltoniano (2.5) se puede escribir de manera explícita, en forma adimensional como:

$$\tilde{H}^{(3D)}(\rho, \varphi, z) = -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + V^{(3D)}(\rho, z) \quad (2.6)$$

Aquí los términos $\gamma^2 \rho^2/4$ y $-i\gamma \partial/\partial \varphi$ son los aportes correspondientes a la interacción del electrón con el campo magnético. El término lineal es la energía correspondiente al término paramagnético, la cual define el acople entre el campo magnético y el momento magnético permanente del electrón al rotar en el punto. Por otro lado, $\gamma^2 \rho^2/4$ es la energía correspondiente al término diamagnético, la cual siempre es positiva, por lo que produce un incremento en la energía cinética del electrón. El origen físico de este término puede explicarse por la variación que sufre la corriente de probabilidad asociada al electrón ante la presencia del campo magnético externo, lo que da origen a un momento magnético inducido, el cual es antiparalelo al campo ya que de acuerdo con la ley de Lenz se opone al campo aplicado, por lo que el cambio en la energía asociado con este acople será siempre positivo.

2.3. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER Y MÉTODO DE GALERKIN

Con el fin de encontrar la energía correspondiente al Hamiltoniano (2.6) se plantea la respectiva ecuación de Schrödinger para el electrón confinado en el QD tipo cráter, como sigue:

$$\tilde{H}^{(3D)}(\rho, \varphi, z) \Psi(\rho, \varphi, z) = E \Psi(\rho, \varphi, z) \quad (2.7)$$

Teniendo en cuenta que los QDs autoensamblados presentan como característica particular que su altura es notablemente menor que su ancho y su radio medio, podemos entonces aplicar con confianza la aproximación adiabática A.A con el fin de separar el movimiento rápido en dirección z , del movimiento lento en el plano. En este sentido tenemos que la función de onda para el movimiento rápido del electrón en el estado base, con su respectiva energía se obtiene como solución del siguiente problema:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V^{(3D)}(\rho, \varphi, z) \right] Z(\rho, z) = E_z(\rho, \varphi) Z(\rho, z); \quad (2.8)$$

Donde $Z(\rho, z)$ y $E_z(\rho, \varphi)$ son la función de onda y la energía que satisfacen el estado más bajo de un pozo cuántico rectangular infinito con ancho $d(\rho, \varphi)$, considerando la distancia radial ρ como un parámetro. En este sentido tenemos que:

$$Z(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(\frac{\pi z}{d(\rho, \varphi)}\right); \quad E_z(\rho, \varphi) = \frac{\pi^2}{d^2(\rho, \varphi)} \quad (2.9)$$

Aquí $d(\rho, \varphi)$ define la altura del QD (Ecuación (2.1)). La aproximación adiabática nos ha permitido escribir las eigenfunciones $\Psi(\rho, \varphi, z)$ como el producto de dos funciones, una que representa el movimiento rápido $Z(\rho, z)$ y otra que representa el movimiento lento $\Theta(\rho, \varphi)$ que a la vez es separable debido a la simetría acimutal del modelo considerado, teniendo entonces, $\Theta_{n,m}(\rho, \varphi) = e^{im\varphi} R_{n,m}(\rho)$ que depende de los números cuánticos radial (n) y magnético (m).

Por lo tanto la ecuación (2.7) se puede escribir en dos dimensiones como:

$$\tilde{H}^{(2D)}(\sigma)\Theta_{n,m}(\rho,\varphi)=E_{n,m}\Theta_{n,m}(\rho,\varphi); \quad (2.10)$$

con

$$\tilde{H}^{(2D)}(\sigma)=-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\frac{1}{\rho^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\frac{\pi^2\rho_b^2}{h_0^2}\right]-i\gamma\frac{\partial}{\partial\varphi}+\frac{\gamma^2\rho^2}{4}+\sigma\frac{\pi^2\rho_b^2}{h_0^2}f(\varphi) \quad (2.11)$$

Para el caso del **cráter perfecto** ($\sigma=0$), es decir uniforme, la parte radial $R_{n,m}(\rho)$ dentro del mismo ($\rho_i < \rho < \rho_e$) satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\rho\frac{dR_{n,m}(\rho)}{d\rho}+\left[\frac{v^2}{\rho^2}+\frac{\gamma^2\rho^2}{4}\right]R_{n,m}(\rho)=(E_{n,m}-\gamma m)R_{n,m}(\rho); \quad (2.12)$$

Esta ecuación puede resolverse de forma analítica utilizando la sustitución $R_{n,m}(\rho)=\rho^\nu e^{-\gamma\rho^2/4}u(x)$, siendo $x=\gamma\rho^2/2$. Lo que permite que la ecuación (2.12) sea reducida a una ecuación general de Kummer, cuya solución general es una combinación de funciones hipergeométricas confluentes:

$$R_{n,m}(\rho)=\rho^\nu e^{-\gamma\rho^2/4}\left[C_1M\left(a,c;\gamma\rho^2/2\right)+C_2U\left(a,c;\gamma\rho^2/2\right)\right]; \quad (2.13)$$

$$a=(1/2)\left[\nu+1-(E_{n,m}-\gamma\cdot m)/\gamma\right]; \quad c=\nu+1$$

Debido al potencial de confinamiento de barrera infinita impuesto sobre la estructura tipo cráter, las condiciones de frontera para la función de onda radial son: $R_{n,m}(\rho_a)=R_{n,m}(\rho_b)=0$. Esta condición de frontera lleva al siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$C_1M\left(a,\nu+1;\gamma\rho_a^2/2\right)+C_2U\left(a,\nu+1;\gamma\rho_a^2/2\right)=0 \quad (2.14)$$

$$C_1M\left(a,\nu+1;\gamma\rho_b^2/2\right)+C_2U\left(a,\nu+1;\gamma\rho_b^2/2\right)=0$$

Y junto con la condición de la existencia de una solución no trivial de la ecuación (2.12) se obtiene la siguiente ecuación trascendente para los niveles de energía $E_{n,m}$.

$$M\left(a,c;\gamma\rho_a^2/2\right)U\left(a,c;\gamma\rho_b^2/2\right)-M\left(a,c;\gamma\rho_b^2/2\right)U\left(a,c;\gamma\rho_a^2/2\right)=0; \quad (2.15)$$

La anterior ecuación nos permite calcular el espectro energético para el electrón en el QD tipo cráter uniforme, con funciones de onda:

$$\Psi(\rho,\varphi,z)=e^{im\varphi}Z(\rho,z)R_{n,m}(\rho) \quad (2.16)$$

$$\Psi(\rho,\varphi,z)=\rho^\nu e^{im\varphi}e^{-\gamma\rho^2/4}\sqrt{\frac{2}{\pi}}\sin\left(\frac{\pi z}{d(\rho,\varphi)}\right)\left[C_1M\left(a,c;\gamma\rho^2/2\right)+C_2U\left(a,c;\gamma\rho^2/2\right)\right]$$

2.4. ESPECTRO ENERGÉTICO DEL ELECTRÓN EN EL CRÁTER UNIFORME

En las figuras 2.3 y 2.5 se muestran en unidades efectivas los resultados obtenidos para la energía $E_{n,m}$ en función de los parámetros geométricos del QD en forma de cráter uniforme y con forma de QR toroidal. Además se muestra la variación de los niveles energéticos respecto con el campo magnético aplicado, con el propósito de analizar oscilaciones Aharonov-Bohm al ir variando la morfología de nuestra estructura.

En la figura 2.3, se observan los niveles energéticos para un cráter con un radio externo de 100nm y tres diferentes alturas de 2, 5 y 10nm. Se graficaron los niveles para los números cuánticos $n=1, 2$ y $m=1, 2, 3, \dots, 20$.

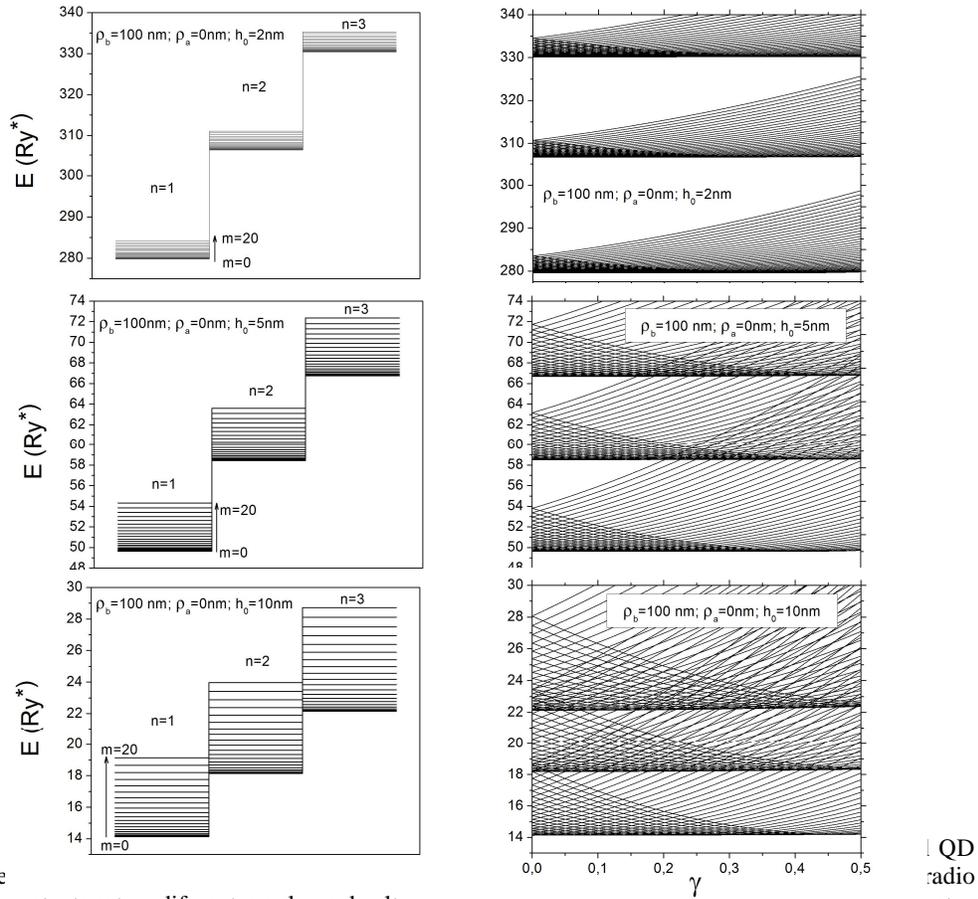


Fig. 2.3. tipo cráter externo constante y tres diferentes valores de altura r niveles energéticos en función del campo magnético aplicado para tres diferentes alturas h_0 .

Se ve que los niveles energéticos correspondientes a diferentes números cuánticos radiales n , forman bandas con subniveles m , separadas una de otra. Se puede apreciar que a medida que se aumenta la altura del QD, se presenta un mayor espaciamento entre los subniveles de cada banda, así como una disminución en la separación de las bandas. Por ejemplo, para una altura de 10nm la separación entre los niveles $n=1$ y $n=2$, disminuye tanto que algunos subniveles de un grupo se mezclan con los del siguiente grupo. Además se observa una notoria disminución de la energía del electrón conforme aumenta la altura del cráter. Esto se debe al principio de incertidumbre, ya que al aumentar la altura, disminuye el confinamiento estructural al cual está sometido el electrón y por consiguiente la energía del mismo y por lo tanto el electrón se encontrará con mayor probabilidad cerca del borde externo del QD, es decir en la región de mayor altura. Una evolución similar puede apreciarse en las graficas de la segunda columna, las cuales corresponden a los mismos niveles de energía mostrados en la primera columna. En estas gráficas se observa la variación de la energía del electrón frente al campo magnético aplicado. El comportamiento que presenta la energía del electrón en esta estructura tipo cráter es similar al de un anillo cuántico delgado. Esta similitud de las curvas se debe al hecho que el electrón se encontrará con mucha mayor probabilidad cerca del borde externo del cráter y por eso la densidad de la distribución en éste es parecida a la del anillo. En consecuencia, se presenta un comportamiento bajo un campo magnético, análogo al que presentaría en un anillo delgado.

En la figura 2.4 se muestra la densidad de distribución radial de probabilidad del electrón para los tres primeros números cuánticos radiales $n=1,2$ y 3 y dos diferentes números cuánticos angulares $m=0$ y $m=10$, para un cráter de radio $10a_0^*$ y altura de $0.5a_0^*$. En esta gráfica se observa que el electrón tiene una probabilidad máxima de encontrarse a una distancia del eje de simetría de $\sim 95\text{nm}$ para los estados con el número cuántico radial $n=1$, de $\sim 85\text{nm}$ para los estados con el número cuántico $n=2$, y a una distancia de $\sim 80\text{nm}$ para los estados con el número cuántico radial $n=3$.

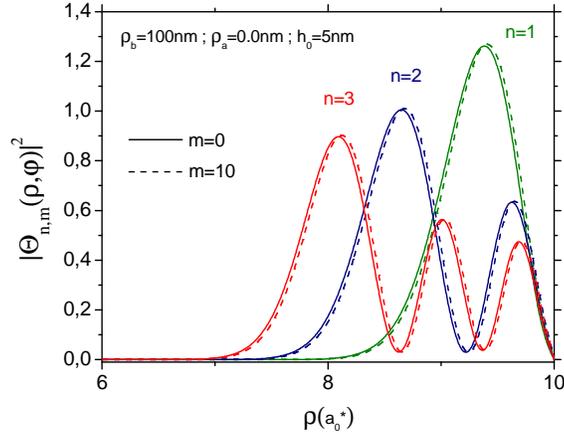


Fig. 2.4. Densidad de probabilidad para el electrón correspondientes a los niveles $n=1,2$ y 3 y los subniveles $m=0$ y $m=10$ para un radio externo constante de 100nm ($\sim 10a_0^*$) y una altura máxima de 5nm ($\sim 0.5a_0^*$).

Esto ratifica la afirmación anterior que el electrón se ubica con mayor probabilidad cerca del borde externo del cráter, región en la cual el cráter tiene mayor altura.

Es interesante comparar los niveles de energía del QD tipo cráter con los de un anillo cuántico con un perfil dado por la función $d(\rho) = h_0 \vartheta(\rho - \rho_a) \vartheta(\rho_b - \rho)$. Debido a que para este último modelo se puede obtener una ecuación trascendente similar (similar a la ecuación trascendente 2.15), en la que el parámetro ν es igual a m y $E_{n,m}$ debe ser sustituido por $E_{n,m} - \pi^2/h_0^2$. En la figura 2.5 se muestran los niveles de energía más bajos de un electrón en función del campo magnético aplicado. En la primera y tercer columna los resultados de un QD tipo cráter uniforme, mientras que en la segunda y la cuarta columna los resultados para QRs toroidales (altura constante). Los modelos planteados se muestran en la primera fila y obedecen al perfil mostrado en la figura 2.2 (b, c). En la segunda fila mostramos los niveles con diferente momento angular $m=0,1,2,\dots,10$ y sólo con un número cuántico radial $n=1$, mientras que en la tercera fila se muestran dos diferentes grupos de bandas correspondientes a $n=1$ y $n=2$.

Se observa de los gráficos en la primera columna (que corresponden al QD tipo cráter) que la dependencia de la energía con el campo magnético es muy similar a la de un QR unidimensional, con sus típicas oscilaciones AB para la energía del estado base, los característicos cruces de las curvas y el reordenamiento de los niveles de energía. Para el caso del QR con un radio interior muy pequeño en la segunda columna (Figura 2.5b) la estructura energética es muy diferente, el comportamiento de la energía frente al campo magnético tiende a parecerse al de un disco cuántico [122], lo cual es razonable

debido a que en la medida en que se reduce el radio interior, el anillo tiende morfológicamente a parecerse a un disco. Sin embargo, para cuando el radio interior aumenta las curvas en ambos casos, son cada vez más similares entre sí (comparar las columnas (c) y (d)). Además, se puede observar que en el QD tipo cráter las curvas de energía son casi insensibles a un cambio del radio interior del cráter y por ende se siguen presentando oscilaciones tipo AB para cualquier ancho del cráter (comparar columnas (a) y (c)). En contraste con el caso de los QRs con un grosor uniforme las oscilaciones AB desaparecen al aumentar el ancho de los mismos (comparar las columnas (d) y (b)).

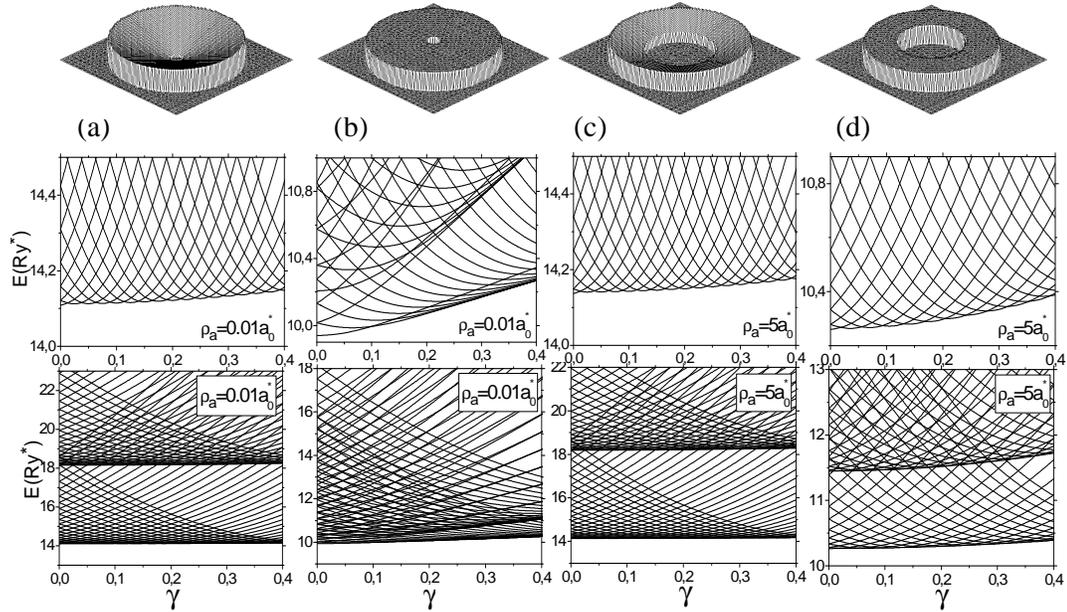


Fig. 2.5. Niveles energéticos más bajos para (a, c) QD tipo cráter y (b,d) QRs con radio externo $\rho_b=10 a_0^*$ y altura $h_0=1 a_0^*$ y dos diferentes valores de radio interno $\rho_a=0.01 a_0^*$ (a,b) y $\rho_a=5 a_0^*$ (c,d).

Un apagamiento de las oscilaciones AB se puede observar también en el cráter sin variar el tamaño del hueco central, sino cambiando sólo la pendiente que caracteriza la forma del cráter.

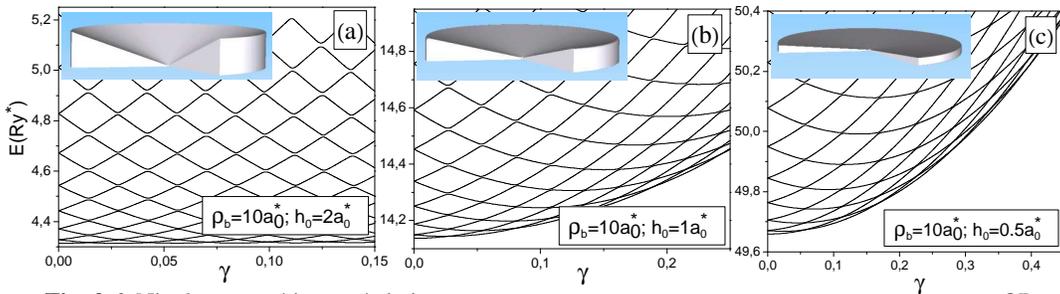


Fig. 2.6. Niveles energéticos más bajos para un QD tipo cráter uniforme con radio interno $\rho_a=0 a_0^*$, radio externo $\rho_b=10 a_0^*$ y tres diferentes alturas h_0 : $2 a_0^*$ (a), $1 a_0^*$ (b) y $0.5 a_0^*$ (c).

Efectivamente, la disminución de la pendiente produce una transformación paulatina de la morfología de un cráter desde una estructura similar a un anillo en la que se presentan oscilaciones AB hasta otra estructura tipo disco, en la que estas oscilaciones ya no se

presentan. En la figura 2.6 se puede observar el efecto de la disminución de la pendiente. Se puede ver que para una pendiente alta (figura 2.6 a) se presentan oscilaciones AB (caso análogo al del 1D QR), que van desapareciendo a medida que la pendiente decrece (figura 2.6b), hasta que la estructura se asemeja más a un disco que a un cráter.

2.5. MODELO DE QD TIPO CRÁTER CON DEFECTOS ESTRUCTURALES

En las secciones anteriores se ha analizado el efecto de las variaciones uniformes de la altura del cráter, y se ha observado una gran sensibilidad en la estructura del espectro electrónico frente a pequeños cambios en el grosor del mismo. No obstante, estas estructuras pueden presentar uno o más defectos distribuidos en forma desordenada tal como se mostró en la figura 2.1. En esta sección planteamos tres modelos diferentes para los QDs con forma de cráter considerando defectos estructurales semejantes a los presentes en la morfología real que exhiben estas estructuras (figura 2.7a). Es decir, se considera un cráter en el cual su altura puede tener valles y cimas que representarían defectos estructurales locales o periódicos, dependiendo de la cantidad de valles y cimas. Sin embargo, es necesario realizar buenas aproximaciones en la homogeneidad del grosor del QD, de forma que éste se pudiera modelar de acuerdo a una función lineal respecto a la coordenada radial ρ (figura 2.7b) y a una función armónica respecto a la coordenada angular φ (figura 2.7c).

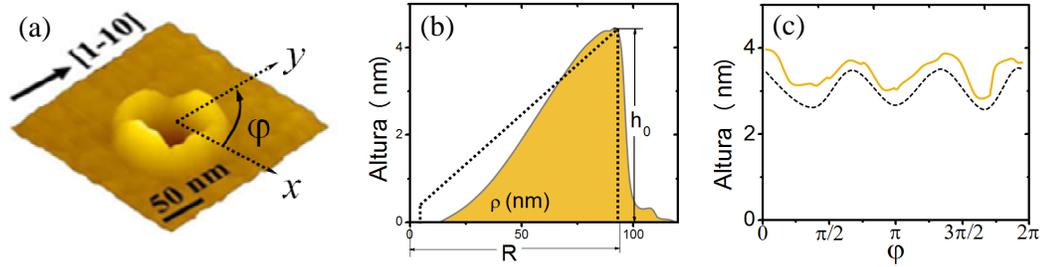


Fig. 2.7. (a) Morfología de la superficie de un QD tipo cráter tomada por AFM [120]. (b, c) Perfiles de los QDs: experimental (líneas continuas) y del modelo separable (líneas punteadas) en las direcciones radial (b) y angular (c).

Una representación 3D de los modelos considerados se muestra en la figura 2.8. En la cual se puede apreciar la variación de la altura como función de las coordenadas radial y angular. El radio del agujero central se ha hecho igual a cero ($\rho_a = 0$) y el grosor del cráter sigue estando dado por la función $d(\rho, \varphi)$ descrita en la ecuación 2.1. Donde se tiene $\sigma = 0$ para el caso del cráter uniforme (modelo tratado en la sección anterior) y $\sigma \neq 0$ para cuando el cráter con defectos estructurales. La función angular $f(\varphi)$ define la cantidad de valles y de cimas que presenta el cráter y está dada de la siguiente forma:

$$f(\varphi) = \sin^2 k\varphi \quad (2.17)$$

Donde k es igual a $1/2$ para el modelo I (figura 2.8I), 1 para el modelo II (figura 2.8 II) y 2 para el modelo III (figura 2.8III).

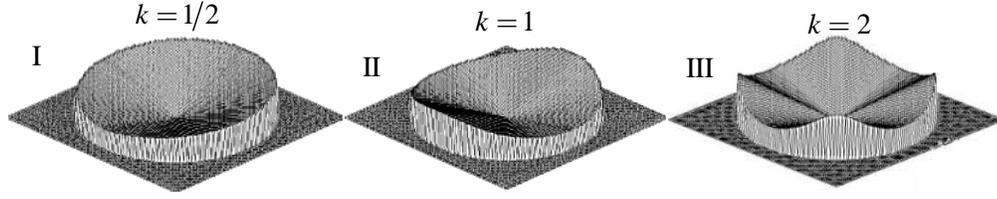


Fig. 2.8. Modelo de un cráter no-uniforme cuyo grosor depende de las coordenadas cilíndricas ρ, φ en acuerdo con fórmula (2.1) y con la función $f(\varphi)$ escogida como $f(\varphi) = \sin^2 k\varphi$. A continuación el parámetro $k=1/2$ corresponde al modelo I, $k=1$ al modelo II y $k=2$ al modelo III.

Análíticamente para estos modelos con ($\sigma \neq 0$), los valores propios del Hamiltoniano (2.10.b) ($\sigma \neq 0$), no pueden encontrarse de manera exacta, Por esta razón nosotros utilizamos el método de diagonalización numérica teniendo en cuenta que el último término de (2.10.b) puede ser tratado como una perturbación (que en este caso es de tipo estructural).

2.6. SOLUCIÓN POR EL MÉTODO DE FOURIER-GALERKIN

Para analizar el efecto de los defectos estructurales aplicaremos el método de Galerkin descrito en la sección 1.5. Como en este caso la perturbación relacionada con los defectos estructurales depende del ángulo y las funciones de base son las funciones trigonométricas llamaremos este método Fourier-Galerkin.

Según la fórmula (2.11) el Hamiltoniano de un cráter con los defectos estructurales se puede representar en la siguiente forma:

$$\tilde{H}^{(2D)}(\sigma) = H_0 + \sigma U(\varphi); \quad (2.18)$$

$$H_0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \left[\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{\pi^2 \rho_b^2}{h_0^2} \right] - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4}; \quad (2.19)$$

$$U(\varphi) = \frac{\pi^2 \rho_b^2}{h_0^2} f(\varphi) \quad (2.20)$$

Como se explica en la sección (1.5) el método de Galerkin se reduce principalmente al cálculo de los elementos matriciales de la perturbación utilizando como las funciones de base las soluciones del problema de valores propios del Hamiltoniano H_0 encontrados en las secciones anteriores:

$$H_0 |\Phi_{n,m}\rangle = E_{n,m}^0 |\Phi_{n,m}\rangle; \quad |\Phi_{n,m}\rangle = e^{im\varphi} R_{n,m}(\rho) \quad (2.21)$$

$$R_{n,m}(\rho) = \rho^\nu e^{-\gamma \rho^2/4} \left[C_1 M(a, c; \gamma \rho^2/2) + C_2 U(a, c; \gamma \rho^2/2) \right]; \quad (2.22)$$

$$a = (1/2) [\nu + 1 - (E_{n,m} - \gamma m)/\gamma]; \quad c = \nu + 1$$

La ecuación secular en marco del método de Galerkin es

$$\sum_m \left[(E_m^0 - E) \delta_{m,m'} + U_{m,m'} \right] C_m = 0; \quad m' = 1, 2, \dots, m_p \quad (2.23)$$

Aquí E_m^0 son niveles energéticos del cráter perfecto encontrados en las secciones anteriores y los elementos matriciales $U_{m,m'}$ son definidos como:

$$U_{m,m'} = \langle \Phi_m | \sigma \frac{\pi^2 \rho_b^2}{h_0^2} f(\varphi) | \Phi_{m'} \rangle \quad (2.24)$$

A continuación mostraremos que los elementos matriciales (2.24) para el modelo escogido (2.1) se calculan en una forma analítica.

La función que define la morfología del cráter en este caso es la siguiente $f(\varphi) = \sin^2(k\varphi)$

Entonces, se calcula la siguiente integral para este modelo en particular.

$$U_{m,m'} = \frac{\pi^2 \rho_b^2}{h_0^2} \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin^2(k\varphi) e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \int_0^{\infty} \frac{1}{\rho} R_{n,m}^2(\rho) d\rho \quad (2.25)$$

La primera integral se calcula analíticamente y la formula final es:

$$U_{m,m'} = \sigma \frac{2\pi^2 \rho_b^2}{h_0^2} A_{m-m'} \int_0^{\infty} \frac{1}{\rho} R_{n,m}^2(\rho) d\rho; \quad (2.26)$$

$$A_p = \begin{cases} \frac{(-1)^p}{p^2}; & p = m - m' \quad \text{para } k = 1/2; \\ \left[\frac{1}{2} \delta_{p,0} + \frac{1}{4} \delta_{p,2} + \delta_{p,-2} \right] & \text{para } k = 1; \\ \left[\frac{1}{2} \delta_{p,0} + \frac{1}{4} \delta_{p,4} + \delta_{p,-4} \right] & \text{para } k = 2 \end{cases}$$

En nuestro cálculo, nosotros hemos encontrado la integral radial numéricamente.

2.7. ESPECTRO ENERGÉTICO DEL CRATÉR NO-UNIFORME

En la figura 2.9 se presentan algunos resultados de cálculo de las energías de un electrón, confinado en un cráter no-uniforme, en función del campo magnético externo aplicado a lo largo de la dirección del crecimiento del cristal. Se analizan los tres diferentes modelos planteados en la sección anterior. En la primera fila se exponen esquemáticamente las imágenes 3D de nuestros modelos de cráter no-uniforme, mientras que en la segunda y tercera fila se muestran las curvas de energía en función del campo magnético. Como ya se había visto, el comportamiento de la energía en función del campo magnético para una estructura tipo cráter perfecto, obedece a un patrón oscilatorio. Este comportamiento (oscilaciones AB) característico de anillos cuánticos muy delgados desaparecía paulatinamente a medida que disminuía la altura del cráter, modificándose de esta forma la estructura energética tipo anillo a una estructura energética tipo disco. En este mismo sentido, se puede considerar que el rompimiento de la simetría axial debido a los defectos estructurales presentados en nuestro modelo produce un cambio de la pendiente en diferentes direcciones, observado en la figura 2.9. Como las pequeñas variaciones en la pendiente conducen a fuertes modificaciones en la estructura de las oscilaciones AB se puede esperar que los defectos estructurales que rompen la simetría axial deban afectar fuertemente la estructura del espectro energético. Efectivamente, se puede observar en la primera columna para un modelo de cráter con un aumento monótono de espesor, que surge un número de niveles individuales con un apagado notorio de oscilaciones AB a medida que el parámetro σ aumenta.

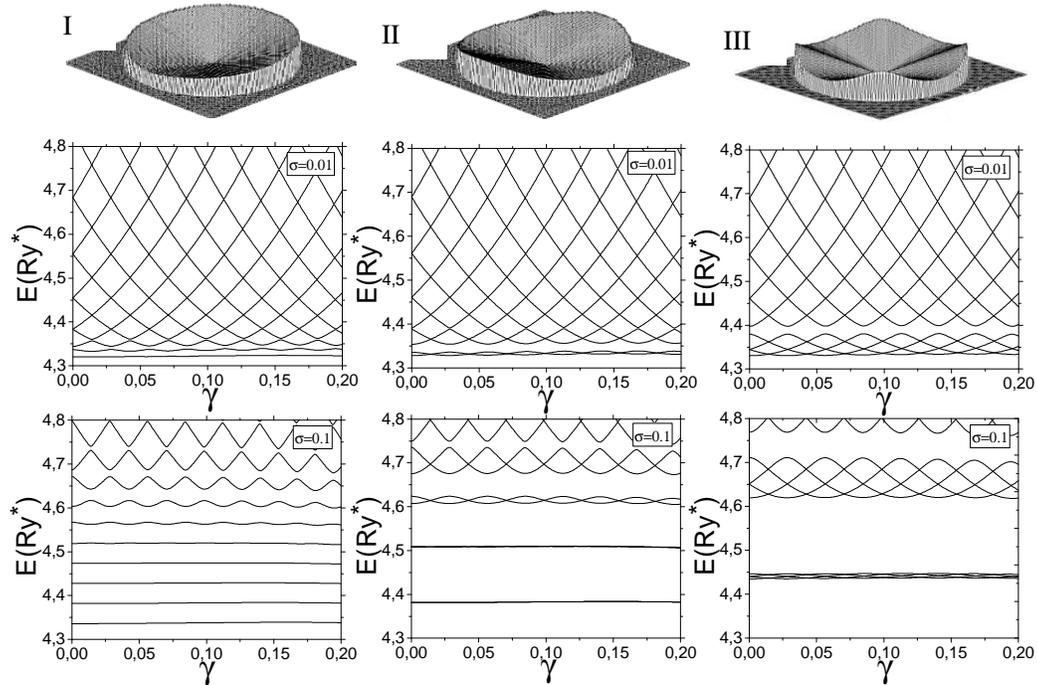


Fig. 2.9 Energías mas bajas de un electrón en un cráter no-uniforme en función del campo magnético con el radio interno $\rho_a=0 a_0^*$, radio externo $\rho_b=10 a_0^*$, altura $h_0= 2 a_0^*$ y dos diferentes niveles de no-homogeneidad $\sigma = 0.01$ (segunda columna) y $\sigma = 0.1$ (tercera columna). Imágenes 3D de los modelos correspondientes de cráter se presentan en la primera fila

Al observar estos gráficos se pone de manifiesto inmediatamente que no existen oscilaciones AB para el estado base del electrón confinado en un cráter con algún defecto local o periódico en su morfología, incluso tampoco aparecen para los primeros estados excitados, aunque se observan oscilaciones para los estados excitados superiores. Por otro lado, la comparación entre los gráficos de la segunda y tercera fila para cada modelo de QD, permite concluir que al introducir aunque sea una leve variación de la pendiente del QD, en este caso de un orden de magnitud (desde $\sigma = 0.1$ hasta $\sigma = 0.01$) tiene lugar una extinción de las oscilaciones para un buen número de niveles energéticos más bajos. Lo anterior se debe a que para un QD, pequeñas variaciones en la pendiente producirán grandes variaciones en la energía del sistema, por lo tanto la región donde la altura sea mayor será desde el punto de vista energético un verdadero pozo de potencial para los portadores de carga, lo cual llevará a la aparición de estados localizados adicionales que no exhiben oscilaciones respecto al campo magnético. En cambio, para los modelos II y III con dos y cuatro valles, respectivamente. Los niveles más bajos no se dividen individualmente sino que aparecen agrupados en pocos subniveles entrelazados, mientras que que los niveles superiores presentan oscilaciones con múltiples intersecciones. Al aumentar el nivel de no-homogeneidad (σ) se van presentando más grupos con niveles entrelazados, cuyo número de subniveles corresponde al número de defectos presentes en el QD. Es decir, para el modelo III con cuatro defectos periódicos, se forman grupos de cuatro subniveles entrelazados que se mezclan por completo para los estados más bajos a medida que σ aumenta, formando estados localizados como en el caso del modelo I. Los grupos “trenzados” de estados más bajos corresponden a la intersección de los estados enlazantes (bonding) y anti-enlazantes (anti-bonding). Lo anterior se debe a que la particular simetría rotacional de estos modelos lleva a que se formen pozos de

potencial en las regiones donde la altura del cráter presenta valores máximos, por ejemplo para el modelo II esto es cuando $\varphi = \pi/2$ y $3\pi/2$. Por lo tanto tendremos un sistema de doble pozo simétrico en dirección Z, lo que hace que los niveles se desdoble en parejas, tal como ocurrió para este modelo. Por lo tanto si tenemos un QD con n-valles que representarían n-defectos estructurales, entonces los niveles agrupados estarían conformados por n de los estados más bajos.

Nuestros resultados muestran que cualquier pequeña variación en el ancho del QR produce la extinción de las oscilaciones AB para los niveles energéticos más bajos del electrón, resultado que puede resultar de vital importancia para comprender los resultados experimentales que se tienen hasta el momento sobre dichos sistemas, ya que los QDs reales presentan importantes variaciones morfológicas tanto de forma como de tamaño.

Capítulo 3

DOS ELECTRONES EN PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS [123-125]

En este capítulo se desarrolla básicamente un conjunto de métodos que permiten obtener el espectro energético de dos electrones en puntos cuánticos auto-ensamblados con simetría anular, extendiendo este estudio al caso en el cual los electrones se encuentran en dos anillos cuánticos coaxiales concéntricos y dos anillos coaxiales acoplados verticalmente. Además de un sistema conformado por dos impurezas donadoras ionizadas ubicadas en el eje de simetría de un QR toroidal con sus respectivos electrones confinadas dentro del anillo. En cualquiera de estos sistemas se procede a plantear el correspondiente Hamiltoniano en el límite adiabático, el cual se hace separable utilizando la coordenada del centro de masa y la coordenada de fase relativa para las dos partículas, y con ello se resuelven las correspondientes ecuaciones de Schrödinger, obteniéndose las funciones propias y los valores propios de las energías.

3.1. ACOPLAMIENTO DE PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS

Una de las características más atractivas de los puntos cuánticos, considerados por muchos como "*átomos artificiales*", es su capacidad de formar moléculas mediante el acoplamiento. La estructura energética generada por el acoplamiento de dos puntos cuánticos es cualitativamente similar a la que exhiben las moléculas diatómicas, en el sentido que es posible interpretar el enlace entre estas nanoestructuras en términos de la formación de orbitales moleculares enlazantes (*bonding*) y anti-enlazantes (*anti-bonding*). Por tal motivo los sistemas de QDs acoplados reciben el nombre de "*moléculas artificiales*". Aunque las moléculas artificiales formadas por puntos cuánticos acoplados han sido estudiadas intensamente durante la última década [126-133], es hace solo unos pocos años que ha comenzado a llevarse a cabo una investigación exhaustiva sobre las propiedades de estas moléculas cuando los constituyentes son anillos cuánticos. Recientemente, se han realizado complejos de tamaño nanométrico que consisten en capas apiladas de anillos cuánticos de InGaAs/GaAs cuyas propiedades ópticas y estructurales son caracterizadas por espectroscopía de fotoluminiscencia [134] y se ha estudiado (teórica y experimentalmente) sistemas formados por QRs acoplados tanto verticalmente [134-137] como de forma concéntrica [138-142], pero hasta la fecha de publicación de los trabajos expuestos en el presente capítulo no existía en la literatura una descripción de la estructura energética de QRs no-uniformes acoplados verticalmente y de concéntricos. No obstante, este problema resulta de interés ya que el acoplamiento de QRs no-uniformes conforma moléculas artificiales con una topología única, lo que podría reflejarse en un espectro energético también único.

Los avances en la tecnología de la nano-fabricación han permitido recientemente lograr la formación de “*moléculas diatómicas artificiales*” a partir del auto-ensamblado de anillos cuánticos de GaAs / AlGaAs acoplados de forma concéntrica **CDQRs** [138]. La geometría singular de anillos concéntricos se ha encontrado a través del estudio de las características del espectro y comparándolas con las de otras estructuras nanoscópicas. En efecto, a diferencia de los puntos cuánticos acoplados lateralmente, un par de anillos concéntricos no rompen la simetría que caracteriza a un anillo aislado. Además, las moléculas artificiales que forman anillos concéntricos son más similares a las moléculas heteronucleares, debido a que el volumen del anillo exterior por lo general es superior al del anillo interior, haciendo que el máximo de la distribución de la carga para los estados bonding y antibonding se ubiquen en diferentes anillos y de esta manera muestran unas brechas energéticas entre niveles consecutivos distintas. En estos sistemas la localización de electrones en cualquiera de los anillos se define por la competencia entre el confinamiento espacial, las fuerzas centrífugas (que favorecen la ocupación del anillo interior) y la interacción de Coulomb (que favorece la ocupación de los anillos más voluminosos). Es interesante que esta interacción pueda conducir a las configuraciones de los momentos dipolares cuando la densidad de carga en el interior del anillo está fuertemente polarizada, mientras que en el anillo exterior no lo es.

Unos ejemplos de imágenes de CDQRs fabricados y obtenidas a través de AFM [138] se presentan en la figura 3.1.

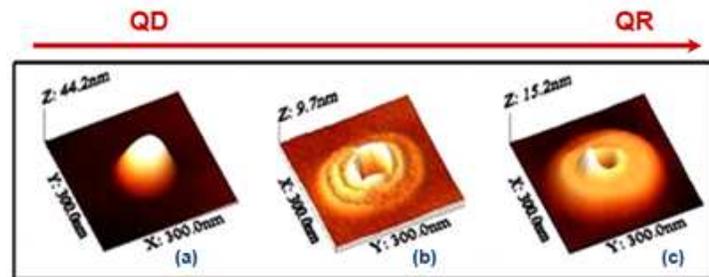


Fig. 3.1. Imágenes reales de la variación de la morfología de QDs a CDQRs.[138]

3.2. EFECTO DE LA MORFOLOGÍA DE DOS QRs CONCÉNTRICOS Y ACOPLADOS VERTICALMENTE SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS ELECTRONES

Los anillos cuánticos apilados verticalmente ofrecen mayores oportunidades para mejorar el rendimiento de los dispositivos ópticos en comparación con un anillo cuántico solitario, debido al acoplamiento entre los mismos. En este contexto, nosotros consideramos relevante buscar modelos exactamente solubles para explorar la nueva física relacionada con los QRs acoplados, de tal manera que nos permitan comprender los efectos que tiene el acoplamiento sobre el espectro energético de dos partículas. En esta sección, se considerará un modelo 3D simple formado por dos anillos toroidales verticalmente acoplados y coaxiales (**VCQRs**: Vertically Coupled Quantum Rings), y dos anillos toroidales concéntricos y coaxiales (**CDQRs**: Concentric Double Quantum Rings) los cuales contienen cada uno un único electrón y se hallan inmersos en un campo magnético uniforme aplicado en la dirección perpendicular a cada anillo.

3.2.1. MODELO ESTRUCTURAL

Un aspecto importante a tener en cuenta es la disposición geométrica relativa de los anillos y sus características morfológicas. Con el objetivo de estudiar la influencia de la geometría de la sección transversal (CS: cross-section) en el espectro energético de los portadores de carga, se consideran tres diferentes morfologías de sección transversal: rectangular (I), circular (II) y cuadrada (III). Con el propósito de comparar las secciones II y III, éstas se han tomado de igual área, con magnitud igual a πR_t^2 . Donde R_t es el radio de la sección transversal circular, por lo tanto la sección transversal cuadrada tiene como lado $h = \sqrt{\pi} R_t$. En cuanto a la sección transversal rectangular (I), ésta ha sido tomada con altura l y ancho ajustable w con el fin de analizar situaciones de asimetría. (Figura 3.2 .a)

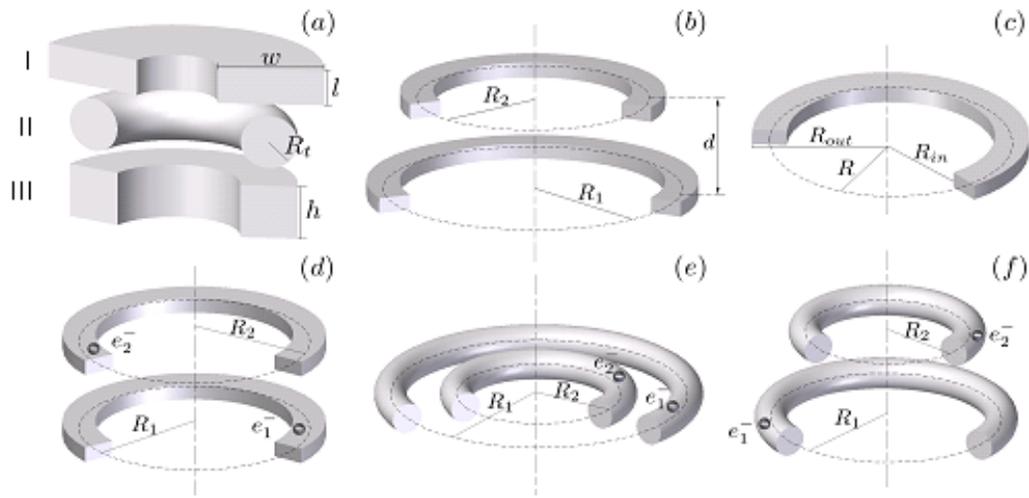


Fig. 3.2. Diagrama esquemático (3D) de: la sección transversal del anillo de tipo rectangular (I), circular (II) y cuadrada (III) (a). Parámetros geométricos para los QRs (b, c), portadores de carga en VCQRs de igual radio (d), en CDQRs (e) y en VCQRs de diferente radio (f).

Individualmente para cada anillo, se introduce una línea central, definida como una circunferencia con centro en el eje de simetría del sistema y que pasa justo por el centro geométrico de cada sección transversal considerada. Las líneas centrales tienen radios $R_1 = R$ y $R_2 = \alpha R$ para el anillo inferior y superior, respectivamente. La distancia entre anillos se denota por $d = \beta R$, y su valor coincide con la distancia entre los planos paralelos que contiene las líneas centrales de los anillos (Ver figura 2.1 .b). En este esquema R es el valor medio entre el radio interno (R_{in}) y externo (R_{out}) de un anillo, El parámetro adimensional α es la razón entre los respectivos radios R_2 y R_1 de las líneas centrales y el parámetro adimensional β así como R relaciona la distancia entre anillos d con el radio central R . Estas relaciones se dan de la siguiente forma:

$$R = \frac{R_{in} + R_{out}}{2}; \quad \alpha = \frac{R_2}{R_1}; \quad \beta = \frac{d}{R} \quad (3.1)$$

Estos parámetros ofrecen la posibilidad de tratar casos especiales a partir de un modelo general. Por ejemplo, en el caso en que $\alpha \rightarrow 1$ y $\beta \rightarrow 0$, la configuración que se tiene es la de un solo anillo toroidal. Otro ejemplo es el caso en que $\beta \rightarrow 0$, pero $\alpha \neq 1$, para esta situación la configuración corresponde a la de un par de anillos concéntricos. En forma general si $\alpha \neq 1$ y $\beta \neq 0$, los anillos conforman un sistema de anillos acoplados verticalmente. Una última posibilidad sigue siendo la de reducir el par de anillos cuánticos a un punto cuántico en forma de disco. Esto se obtiene para cuando $\alpha \rightarrow 0$, $\beta \rightarrow 0$ y el radio interior se tiende a cero ($R_{in} \rightarrow 0$).

Para estos sistemas, hemos considerado un modelo simplificado de barrera infinita, en el cual el potencial de confinamiento $V(\rho, \varphi, z)$ es igual a cero en el interior de cada anillo y a infinito fuera de ellos.

3.2.2. HAMILTONIANO PARA DOS ELECTRONES EN VCQRs Y CDQRs

En la figura 3.3 se representa una imagen (3D) de dos anillos toroidales de diferente radio acoplados verticalmente con un electrón confinado en cada uno de ellos (a). Para cada electrón en el interior de cada anillo se introduce un nuevo sistema coordenado, tal como se muestra en la figura 3.3.b.

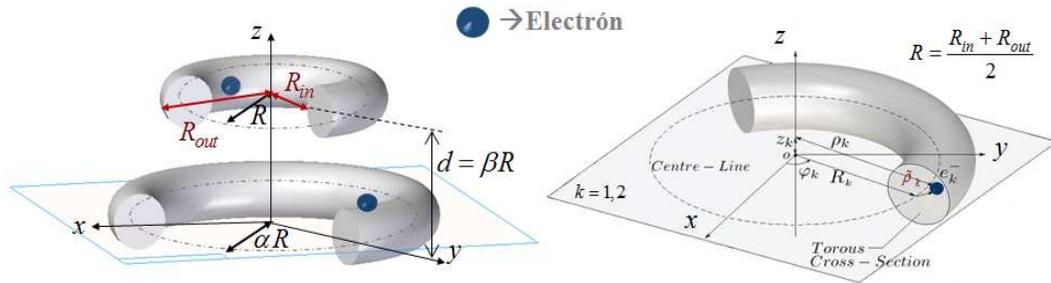


Fig. 3.3. Diagrama esquemático (3D) de dos electrones en VCQRs (izquierda) y sistema coordenado para cada electrón en el interior de cada anillo (derecha).

Del mismo modo como se trabajó en el capítulo 2 (Adimensionalización del Hamiltoniano (2.3) a partir de unidades efectivas), el Hamiltoniano adimensional para este sistema bi-electrónico con un campo magnético homogéneo aplicado en dirección Z , se puede escribir en coordenadas cilíndricas como:

$$H^{(3D)}(\rho, \varphi, z) = \sum_{k=1}^2 \left[-\Delta_k + i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_k} + \frac{1}{4} \gamma^2 \rho_k^2 + V(r_k) \right] + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \quad (3.2)$$

Siendo $\vec{r}_k = \vec{\rho}_k + \vec{z}_k$; $k=1,2$, los vectores de posición de los electrones medidos respecto al origen de coordenadas el cual se localiza en el centro de simetría del anillo inferior y $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ es el potencial adimensional de interacción Coulombiana entre los dos electrones:

$$U(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) = \frac{2}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + (z_1 - z_2)^2}}; \quad (3.3)$$

El potencial de confinamiento $V(r_k)$ como se mencionó anteriormente, se toma igual a cero dentro de cada toroide e infinitamente grande por fuera de ellos.

Con el fin de encontrar los valores propios del Hamiltoniano 3.2, se asume nuevamente que los anillos cuánticos tienen sección transversal muy estrecha ($R_k \gg R_r$), lo que permite desacoplar el movimiento rápido de los electrones en la dirección transversal del movimiento de rotación lento alrededor del eje Z mediante el uso de la aproximación adiabática (AA). Para desacoplar el movimiento rápido en dirección radial del movimiento lento de rotación alrededor del eje Z es necesario realizar las siguientes transformaciones de coordenadas sobre cada una de las componentes de los vectores de posición electrónica:

$$\rho_k = R_k + x_k; \quad x_k = \tilde{\rho}_{ik} \cos \varphi_k; \quad z_k = \tilde{\rho}_{ik} \sin \varphi_k; \quad 0 \leq \tilde{\rho}_k \leq R_k \text{ y } 0 \leq \varphi_k \leq 2\pi \quad (3.4)$$

Entonces, en el marco de la AA y de las transformaciones (3.4), se pueden encontrar los niveles más bajos de energía a partir del siguiente Hamiltoniano renormalizado ($\tilde{H} = R^2 H$ - Esto con el fin de evitar singularidades alrededor del punto $R = 0$):

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{2D} &= RH^{2D} \\ &= -\left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} + \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2}\right) - i\gamma \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2}\right) + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle + \tilde{V}_{eff}(\varphi_1 - \varphi_2) + \tilde{E}_0 \end{aligned} \quad (3.5a)$$

Donde

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{eff}(\varphi_1 - \varphi_2) &= \langle f_0^{(1)} f_0^{(2)} | R^2 U(|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|) | f_0^{(1)} f_0^{(2)} \rangle \Rightarrow \\ \tilde{V}_{eff}(\varphi_1 - \varphi_2) &= \frac{2R}{\sqrt{\beta^2 + (1 - \alpha)^2 + 4\alpha \sin^2(\varphi_1 - \varphi_2)/2}}; \end{aligned} \quad (3.5b)$$

Con

$$\langle \rho_k^2 \rangle = \langle f_0^{(1)} f_0^{(2)} | \rho_k^2 | f_0^{(1)} f_0^{(2)} \rangle \quad (3.5c)$$

Donde $f_0^{(k)} = f_0(\rho_{ik})$ y \tilde{E}_0 son la función de onda exacta (la cual se expresa en términos de las bien conocidas funciones de Bessel) y la correspondiente energía para un pozo cuántico bi-dimensional de barrera infinita asociado al movimiento de los electrones a lo largo de la sección transversal de los anillos.

Los valores propios \tilde{E} (Energías renormalizadas) del Hamiltoniano renormalizado (3.5a) se usaron coordenadas relativas y de centro de masa para las coordenadas angulares:

$$\begin{aligned} \phi &= \varphi_1 - \varphi_2 \quad \rightarrow \text{Coordenada relativa} \\ \theta &= \frac{\varphi_1 + \alpha^2 \varphi_2}{1 + \alpha^2} \quad \rightarrow \text{Coordenada del centro de masa} \end{aligned} \quad (3.6)$$

En estas coordenadas el Hamiltoniano (3.5a) corresponde a la suma de dos Hamiltonianos, uno asociado al movimiento relativo ($\tilde{H}_r(\phi)$) y otro asociado al movimiento del centro de masa ($\tilde{H}_{CM}(\theta)$) de los dos electrones. Mediante cálculos sencillos el Hamiltoniano (3.5a) en estas nuevas coordenadas se puede escribir como:

$$\tilde{H} = \tilde{H}_r(\phi) + \tilde{H}_{CM}(\theta) \quad (3.7)$$

$$\text{Donde: } \tilde{H}_{CM}(\theta) = \frac{1}{1 + \alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + MR^2 \gamma + \frac{1}{4} \gamma^2 R^2 \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle + \tilde{E}_0 \quad (3.8a)$$

$$\begin{aligned}\tilde{H}_r(\phi) &= -\left(\frac{1}{\alpha^2} + 1\right) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \tilde{V}_{eff}(\phi); \\ \tilde{V}_{eff}(\phi) &= \frac{2R}{\sqrt{\beta^2 + (1-\alpha)^2 + 4\alpha \sin^2(\phi)}/2}\end{aligned}\tag{3.8b}$$

3.2.3. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

La correspondiente ecuación de autovalores del sistema en las nuevas coordenadas puede ser expresada de la siguiente forma:

$$\tilde{H}\Psi(\phi, \theta) = \tilde{E}\Psi(\phi, \theta)\tag{3.9}$$

De la cual por separación de variables, la función de onda $\Psi(\phi, \theta)$ se puede plantear como el producto de dos funciones, una para la coordenada del centro de masa y otra para la coordenada relativa, denotadas por $\Theta_M(\theta)$ y por $\psi_{m,s}(\phi)$, respectivamente. De esta forma se encuentra dos ecuaciones de onda unidimensionales, expresadas a continuación:

$$\left[\frac{1}{1+\alpha^2} \frac{d^2}{d\theta^2} + MR^2\gamma + \frac{1}{4}\gamma^2 R^2 \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle + \tilde{E}_0 \right] \Theta_M(\theta) = \tilde{E}_{CM}(M) \Theta_M(\theta)\tag{3.9a}$$

$$\left[-\left(\frac{1}{\alpha^2} + 1\right) \frac{d^2}{d\phi^2} + \tilde{V}_{eff}(\phi) \right] \psi_{m,s}(\phi) = \tilde{E}_r(m, s) \psi_{m,s}(\phi)\tag{3.9b}$$

Aquí $\tilde{E}_{CM}(M)$ y $\tilde{E}_r(m, s)$ son las respectivas energías para el movimiento del centro de masa y el movimiento relativo, respectivamente. Aquí los números cuánticos M y m ($M, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) representan los momentos angulares de centro de masa y relativo, respectivamente, mientras que el número cuántico s , define la paridad de la función de onda. Las funciones pares ($s = +$) y las impares ($s = -$) corresponden a los estados singletes y tripletes, respectivamente.

La correspondiente ecuación de onda para el movimiento del centro de masa (3.9a), puede resolverse exactamente, encontrándose que la función de onda y los auto-valores de energía $\tilde{E}_{CM}(M)$ son respectivamente iguales a:

$$\Theta_M(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iM\theta}; \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots\tag{3.10a}$$

$$\tilde{E}_{CM}(\theta) = \frac{M^2}{1+\alpha^2} + MR^2\gamma + \frac{1}{4}\gamma^2 R^2 \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle + \tilde{E}_0\tag{3.10b}$$

Los autovalores de energía $\tilde{E}_r(m, s)$ para el término relativo de la ecuación de onda, hasta donde conocemos, sólo pueden obtenerse numéricamente mediante el uso de una técnica numérica. En el caso particular de este trabajo se ha hecho uso del método de Fourier. El procedimiento para la solución de la parte relativa se describe a continuación sin dejar de lado la generalidad que enmarca esta tesis.

Para reducir el problema (3.9b) a un problema estándar que se resuelve mediante el método de Fourier se realiza la sustitución $x = \phi/2$, obteniéndose la siguiente ecuación diferencial:

$$-\frac{1}{4}\left(1+\frac{1}{\alpha^2}\right)\frac{d^2\psi_{m,s}(x)}{dx} + [\tilde{V}(x) - \tilde{E}_r(m,s)]\psi_{m,s}(x) = 0; \quad (3.11)$$

$$\text{Con } \tilde{V}_{\text{eff}}(x) = \frac{2R}{\sqrt{\beta^2 + (1-\alpha)^2 + 4\alpha \sin^2 x}}.$$

Como $-2\pi \leq \phi \leq 2\pi$ entonces $-\pi \leq x \leq \pi$, lo que indica que el periodo de la función $\psi_{m,s}(x)$ es 2π . Las condiciones de contorno para esta función de onda son: $\psi_{m,s}(x=0) = \psi_{m,s}(x=\pi) = 0$ si $m = 2k+1$ y $\psi'_{m,s}(x=0) = \psi'_{m,s}(x=\pi) = 0$ si $m = 2k$, donde k es un entero.

Con $\psi_{m,s}(-\pi) = \psi_{m,s}(\pi)$ el problema es equivalente a minimizar (mediante el procedimiento variacional) la siguiente integral:

$$F = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{J}{4} (\psi'_{m,s})^2 + \{ \tilde{V}_{\text{eff}}(x) - \tilde{E}_r(m,s) \} \psi_{m,s}^2 \right] dx \quad (3.12)$$

Donde $J = (1 + 1/\alpha^2)$. Debido a que nuestro potencial de Coulomb tiene paridad par ($\tilde{V}_{\text{eff}}(x) = \tilde{V}_{\text{eff}}(-x)$), entonces las funciones $\psi_{m,s}(x)$ deben tener paridad par $\psi_{m,s}^+(x)$ o paridad impar $\psi_{m,s}^-(x)$, y por ende se puede expresar de la siguiente manera:

$$\psi_{m,s}(x) = \begin{cases} \psi_{m,s}^+(x) = \sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n^+(x); & \Phi_n^+(-x) = \Phi_n^+(x) = A_n \cos nx \\ \psi_{m,s}^-(x) = \sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n^-(x); & \Phi_n^-(-x) = -\Phi_n^-(x) = A_n \sin nx \end{cases} \quad (3.13a)$$

$$(3.13b)$$

Donde los coeficientes A_n son dados por:

$$A_n = \langle n | n \rangle = \delta_{nn'} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, & n = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}, & n \neq 0 \end{cases} \quad (3.14)$$

Reemplazando $\psi_{m,s}(x) = \sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n$ en la integral (3.13), se obtiene el siguiente

funcional:

$$F[c_n] = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{J}{4} \sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n' \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \Phi_{n'}' - \tilde{E}_r \sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \Phi_{n'} + \tilde{V}_{\text{eff}}(x) \sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \Phi_{n'} \right] dx \quad (3.15a)$$

En la ecuación (3.15a) aparecen tres contribuciones que se analizan por separado. El primer término es dado por la siguiente integral:

$$I_1 = \frac{J}{4} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n' \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \Phi_{n'}' \right] dx = \frac{J}{4} \sum_{n,n'=0}^{n_f} n^2 c_n c_{n'} \delta_{nn'} \quad (3.15b)$$

El segundo término es dado por:

$$I_2 = -\tilde{E}_r \int_{-\pi}^{\pi} \left[\sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \Phi_{n'} \right] dx = -\tilde{E}_r \sum_{n,n'=0}^{n_f} c_n c_{n'} \delta_{nn'} \quad (3.15c)$$

Y finalmente, realizando una expansión del término faltante, este último puede ser escrito como:

$$I_3 = \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}_{eff}(x) \left[\sum_{n=0}^{n_f} c_n \Phi_n \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \Phi_{n'} \right] dx \Rightarrow$$

$$I_3 = c_0^2 \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}_{eff}(x) \Phi_0^2 dx + c_0 \sum_{n'=1}^{n_f} c_{n'} \tilde{V}_{eff}(x) \Phi_0 \Phi_{n'} dx + c_0 \sum_{n'=1}^{n_f} c_{n'} \tilde{V}_{eff}(x) \Phi_0 \Phi_{n'} dx$$

$$+ \sum_{n,n'=1}^{n_f} c_n c_{n'} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{V}_{eff}(x) \Phi_n \Phi_{n'} dx \quad (3.15d)$$

Reemplazando las ecuaciones (3.13a) para funciones pares y (3.13b) para funciones impares, nosotros obtenemos el funcional $F[c_n]$ para ambas funciones. Además, con el fin de simplificar estas ecuaciones, se usa la siguiente notación:

$$V_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\tilde{V}_{eff}(x) \cos nx] dx, \quad \text{Para funciones pares} \quad (3.16a)$$

$$V_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\tilde{V}_{eff}(x) \sin nx] dx, \quad \text{Para funciones impares} \quad (3.16b)$$

Funcional $F[c_n]$ para funciones pares:

Reemplazando las ecuaciones (3.15b), (3.15c), (3.15d) y (3.16a) en la ecuación (3.15a), y mediante algunos cálculos sencillos se obtiene la siguiente ecuación integral:

$$F[c_n] = \left(\frac{J}{4} - \tilde{E}_r \right) \sum_{n,n'=0}^{n_f} n^2 c_n c_{n'} \delta_{nn'} + c_0^2 V_0 + 2\sqrt{2} c_0 \sum_{n'=1}^{n_f} c_{n'} V_{n'} + \sum_{n,n'=1}^{n_f} c_n c_{n'} [V_{n+n'} + V_{|n-n'|}] \quad (3.17)$$

Al derivar respecto los coeficientes c_n , obtenemos los siguientes resultados:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial c_0} = (V_0 - \tilde{E}_r) c_0 + \sqrt{2} \sum_{n'=1}^{n_f} V_{n'} c_{n'} = 0 \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial c_n} = \sqrt{2} c_0 V_n + \sum_{n'=1}^{n_f} \left\{ (V_{n+n'} + V_{|n-n'|}) + \left(\frac{J}{4} n^2 - \tilde{E}_r \right) \delta_{nn'} \right\} c_{n'} = 0$$

Este conjunto de n_f -ecuaciones independientes puede ser representado en forma matricial de la forma:

$$A_{nn'} \bar{c}_{n'} = A_{nn'} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_f \end{pmatrix} = 0; \quad \text{con} \quad A_{nn'} = \begin{cases} (V_0 - \tilde{E}_r) c_0 + \sqrt{2} \sum_{n'=1}^{n_f} V_{n'} c_{n'} \\ \sqrt{2} c_0 V_n + \sum_{n'=1}^{n_f} \left\{ (V_{n+n'} + V_{|n-n'|}) + \left(\frac{J}{4} n^2 - \tilde{E}_r \right) \delta_{nn'} \right\} c_{n'} \end{cases} \quad (3.19)$$

Los elementos de la matriz asimétrica $A_{nn'}$ pueden ser escritos como sigue:

$$\begin{aligned}
A_{00} &= V_0 - \tilde{E}_r ; A_{0n} = A_{n0} = \sqrt{2}V_n \\
A_{nn'} &= \left(\frac{J}{4} - \tilde{E}_r \right) \delta_{nn'} + V_{n+n'} + V_{|n-n'|} \\
n, n' &= 1, n_f
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Funcional $F[c_n]$ para funciones impares:

Reemplazando las ecuaciones (3.15b), (3.15c), (3.15d) y (3.16b) en la ecuación (3.15a), y nuevamente mediante algunos cálculos sencillos se obtiene la siguiente ecuación integral:

$$F[c_n] = \left[\left(\frac{J}{4} - \tilde{E}_r \right) \sum_{n,n'=1}^{n_f} n^2 c_n c_{n'} \delta_{nn'} + \sum_{n,n'=1}^{n_f} c_n c_{n'} [V_{n+n'} - V_{|n-n'|}] \right] \tag{3.21}$$

Las derivadas de este funcional respecto los coeficientes c_n , arroja el siguiente resultado:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial c_n} = \sum_{n'=1}^{n_f} \left\{ \left(\frac{J}{4} n^2 - \tilde{E}_r \right) \delta_{nn'} + (V_{n+n'} - V_{|n-n'|}) \right\} c_{n'} = 0 \tag{3.22}$$

Del mismo modo que para las soluciones pares, el anterior resultado define un conjunto de n_f -ecuaciones independientes, cuya representación matricial es de la forma:

$$A_{nn'} \vec{c}_{n'} = A_{nn'} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_f \end{pmatrix} = 0 ; \quad \text{con } A_{nn'} = \left(\frac{J}{4} n^2 - \tilde{E}_r \right) \delta_{nn'} + (V_{n+n'} - V_{|n-n'|}) \tag{3.23}$$

El anterior conjunto de soluciones, para las funciones de onda par e impar del movimiento relativo, permiten encontrar los niveles energéticos \tilde{E}_r para los dos electrones. Estos resultados junto con la energía del movimiento del centro de masa obtenida de forma exacta (ecuación (3.10b)), la cual ya contiene la energía asociada al movimiento en la dirección Z, (\tilde{E}_0); establecen la energía total del sistema.

3.2.4. DOS ELECTRONES EN ANILLOS CUÁNTICOS CONCENTRICOS – CDQRs

Con el propósito de verificar la efectividad del procedimiento numérico empleado en este trabajo, se analizará en primera instancia, el caso límite en que $R_t \rightarrow 0$, $\alpha \rightarrow 1$ y $\beta \rightarrow 0$, ya que de esta forma nuestro sistema de anillos cuánticos acoplados, se transforma en un único anillo uni-dimensional cuyos resultados de cálculo han sido reportados previamente por Zhu *et al* [92].

En la figura 3.4 se muestra la evolución de los siete primeros estados de la energía total re-normalizada $\tilde{E}(M, m, s) = \tilde{E}_{CM}(M) + \tilde{E}_r(m, s)$ como una función del radio medio del anillo R para $R_t = 0.001a_0^*$, $\beta \rightarrow 0$ y $\alpha \rightarrow 1$. Las líneas sólidas corresponden a los resultados de cálculo obtenidos en este trabajo, mientras que los símbolos con

“diamantes” negros representan los datos reportados en la Referencia [92]. Un simple vistazo a estos resultados permite concluir que existe un excelente acuerdo entre ambos conjuntos de datos, lo cual demuestra la efectividad del método empleado. El modelo numérico empleado en este trabajo tiene un mérito adicional, ya que los resultados obtenidos en la Referencia de Zhu y colaboradores, son el resultado de una solución exacta para un modelo particular de 1D-QR.

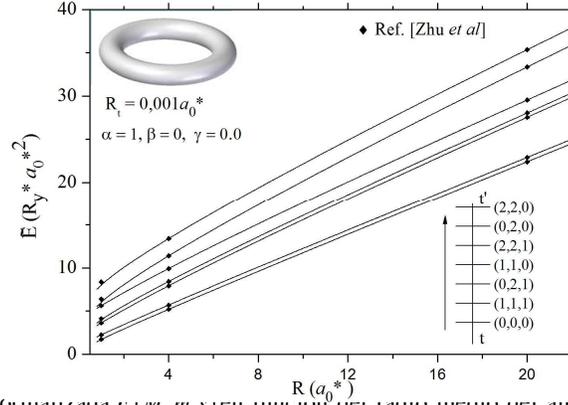


Fig. 3.4. Energía re-normalizada $E(m, m, s)$ en función del radio medio del anillo R para un anillo quasi-uni-dimensional. Los rombos sólidos corresponden a la solución exacta reportada en la referencia [92]

En la figura 3.4 se puede observar que la energía total re-normalizada experimenta un incremento monótono conforme el radio medio cambia de $1a_0^*$ a $25a_0^*$. La evolución de estas curvas es una consecuencia de una fuerte competencia entre la energía cinética re-normalizada, la cual es independiente del radio medio y la energía potencial re-normalizada, la cual es proporcional a éste. Por esta razón, para pequeños valores de R , el aporte a la energía total proveniente del término de energía cinética se impone sobre el aporte de la energía potencial. Esto significa que los electrones están débilmente correlacionados y es por ello que la pendiente de la curva para los diferentes estados cambia permanentemente. En este caso, el sistema bi-electrónico tiene un comportamiento más parecido a un gas de partículas. No obstante, cuando el radio medio se incrementa a partir de un cierto valor crítico, las pendientes de las curvas se tornan constantes. Este comportamiento es propio de un sistema bi-electrónico fuertemente correlacionado, en donde los electrones se disponen de un modo ordenado tal que se asemejan a un cristal que minimiza las repulsiones electrostáticas, el cual se conoce como cristal de Wigner [143].

La comparación de los anteriores resultados refleja la efectividad del método de Fourier empleado. Por ejemplo, las diferencias de energía son menores que $10^{-4} R_y^* a_0^{*2}$ cuando el radio central es mayor que $4a_0^*$. En este sentido, estos resultados pueden ser asumidos como una prueba indirecta de la exactitud del procedimiento numérico implementado.

En la figura 3.5 se muestra la evolución de algunos niveles de energía en función de la intensidad del campo magnético para tres diferentes valores de la razón de la α entre los radios de los anillos. Los paneles están dispuestos en orden de menor a mayor valor de α . El comportamiento de estas curvas es el resultado de una fuerte competencia entre los términos paramagnéticos y diamagnéticos que se encuentran presentes en el Hamiltoniano (3.2).

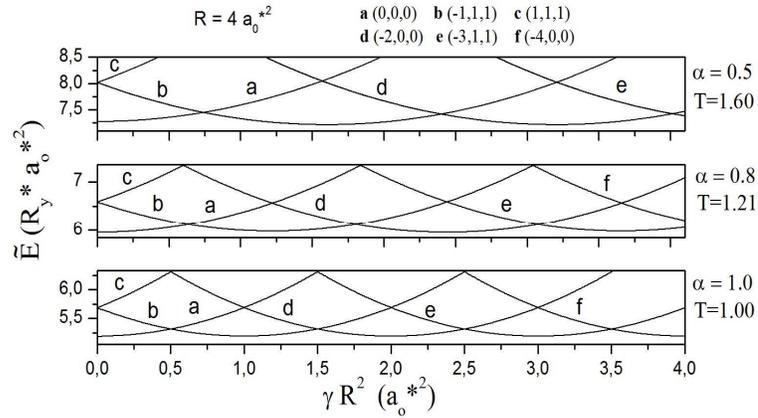


Fig. 3.5. Evolución de la energía re-normalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ para dos electrones en dos anillos concéntricos ($\beta = 0$) como función de la intensidad del campo magnético.

La contribución del término paramagnético es lineal con la intensidad de campo magnético mientras que la contribución del término diamagnético es cuadrática con el campo. En consecuencia, para pequeños valores de la intensidad del campo magnético, el término paramagnético se impone sobre el diamagnético, lo cual conlleva a que todas las curvas tengan una pendiente constante al inicio, siendo positiva si el número cuántico M del momentum angular del centro de masa es positivo ($M > 0$) o negativa en caso contrario ($M < 0$). A medida que la intensidad del campo magnético aumenta, se comienza a imponer el término diamagnético, lo cual se traduce en un cambio en la forma de la curva rectilínea hacia parabólica. Este incremento del campo es responsable de que todas las curvas con $M < 0$ alcancen un valor mínimo cuando el campo magnético adimensional toma los valores $\gamma = 2|M|/(1 + \alpha^2)$. En consecuencia, el estado de mínima energía experimenta un comportamiento oscilatorio conforme crece la intensidad del campo magnético (oscilaciones AB). El hecho de que los valores de γ para los cuales aparecen los mínimos sean dependientes de la razón α , conlleva a que el periodo de oscilación pueda ser modulado a través de la escogencia de los radios medios de los anillos. Un cálculo simple nos permite concluir que para anillos muy estrechos este periodo de oscilación es aproximadamente igual a $T = 2/(1 + \alpha^2)$ y por lo tanto esto explica el porqué de cuanto menor es la razón entre radios α , el periodo de oscilación de las oscilaciones AB aumenta para un mismo valor de R ($R = 4a_0^*$).

3.2.5. EFECTO DE LA SECCIÓN TRANSVERSAL SOBRE EL ESPECTRO DE DOS ELECTRONES EN VCQRs

En esta sección se analizan los efectos de tamaño y forma de un sistema de anillos cuánticos acoplados verticalmente según el modelo descrito en la sección 3.2.1 sobre la estructura energética de dos electrones.

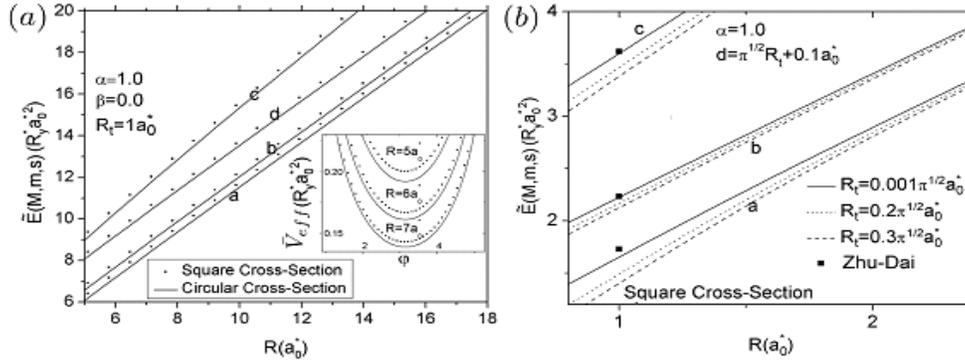


Fig. 3.6. Energías $\tilde{E}(M, m, s)$ en función del radio central de dos formas diferentes de anillo toroidal con secciones transversales: circular (línea continua) y cuadrada (línea punteada) (a) y tres valores diferentes del lado de la sección transversal cuadrada (b).

En la figura 3.6 se muestran algunos estados energéticos para dos electrones en dos anillos cuánticos concéntricos con sección trasversal circular (líneas continuas) y cuadrada (líneas punteadas) (figura 3.6a) y tres valores diferentes del lado h de la sección transversal cuadrada (figura.3.6b). En la primera gráfica (figura 3.6.a), se puede observar que los valores de energía de los electrones en el anillo con sección transversal cuadrada son siempre mayores que los de aquel con la sección transversal circular. Esta sensibilidad de la energía con la morfología de la sección transversal es consecuencia de la mayor profundidad y anchura del potencial efectivo renormalizado $\tilde{V}_{eff}(\phi)$ en un QR con sección transversal circular CS que en uno con sección transversal cuadrada. Este potencial puede apreciarse en el recuadro de la figura 3.6a. En la figura 3.6b los niveles energéticos para los dos electrones se presentan como una función del radio de la línea central de dos QRs con idéntica sección transversal (cuadrada) con lados h : $0.001\sqrt{\pi} a_0^*$ (línea continua), $0.2\sqrt{\pi} a_0^*$ (línea punteada), $0.3\sqrt{\pi} a_0^*$ (línea discontinua) y con una distancia de separación entre los anillos igual a $d=h+0.1a_0^*$, lo cual corresponde a una configuración de anillos acoplados verticalmente. A pesar de considerar la sección transversal de los anillos muy pequeña, se puede observar que a medida que aumenta el tamaño de la sección transversal, los valores de la energía disminuyen, lo que demuestra que la energía es muy sensible a la variación del tamaño de la sección transversal. Además, cuando el radio transversal R_t y el parámetro β tienden a cero, los estados de energía más bajos, consistentemente tienden a los valores exactos correspondientes a los símbolos negros (ver sección 3.2.4).

En el análisis de las energías del conjunto de niveles más bajos, se ha usado una notación corta para los diferentes números cuánticos y de espín en un orden creciente: a, b, c, etc. La comparación permite concluir que existe una excelente concordancia entre ambos grupos de resultados, lo que pone de manifiesto la eficacia de método que se ha

implementado. La notación establecida para los estados de energía $\tilde{E}(M, m, s)$ son los correspondientes a los mostrados en la siguiente tabla:

Tab. 3.1. Notación para algunos estados energéticos $\tilde{E}(M, m, s)$

a	b	c	d	e	f	g	h
$\tilde{E}(0,0,0)$	$\tilde{E}(0,0,0)$	$\tilde{E}(0,2,1)$	$\tilde{E}(2,0,0)$	$\tilde{E}(1,1,0)$	$\tilde{E}(2,2,1)$	$\tilde{E}(0,2,0)$	$\tilde{E}(3,1,1)$
i	j	k	l	m	n	o	p
$\tilde{E}(1,3,1)$	$\tilde{E}(3,1,0)$	$\tilde{E}(2,2,0)$	$\tilde{E}(0,4,1)$	$\tilde{E}(4,0,0)$	$\tilde{E}(1,3,0)$	$\tilde{E}(3,3,1)$	$\tilde{E}(4,2,1)$

Por último, se analiza el efecto de la sección transversal sobre las oscilaciones AB para los niveles más bajos de energía de los dos electrones. En el caso de QRs acoplados de forma concéntrica ($\beta=0$) con sección transversal circular se han considerado dos situaciones: la primera corresponde al caso en el que los anillos se “fusionan” en uno solo ($\alpha=1$) y la segunda corresponde al caso de dos anillos cuya razón entre sus radios es $\alpha=1.5$. Las curvas de energía en función del campo magnético renormalizado para estas dos configuraciones se muestran en la figura 3.7 (a) y 3.7 (b), respectivamente. De estas figuras se observa nuevamente (tal como se observó en la figura 3.5, en la sección anterior) que a menor separación entre los anillos, mayor es el valor de la energía del sistema y del periodo T de las oscilaciones AB (Las cuales aún se siguen presentando debido a que la sección transversal de los anillos siendo muy pequeña - $R_i = 0.001a_0^*$). El aumento en la energía se debe a que los electrones, al disminuir la separación entre ellos, se encuentran más fuertemente correlacionados debido a la interacción coulombiana, lo que produce a un aumento en la energía de los mismos. En cuanto al aumento en el periodo de las oscilaciones respecto a una disminución de la separación lateral entre anillos se debe a la dependencia inversa que existe entre el periodo T y la razón entre los radios α , tal como se mencionó en la sección anterior.

En la Figura 3.7c y 3.7d se grafica la energía total renormalizada $\tilde{E}(M, m, s)$ en función de la intensidad del campo magnético γ para los dos electrones en un único anillo ($\beta=0$) con sección transversal cuadrada y rectangular, respectivamente. De esta gráfica se observa que a pesar de que las oscilaciones AB tienden a un comportamiento sinusoidal (figura 3.7c), éstas se alejan de este comportamiento cuando los anillos no son muy estrechos (figura. 3.7d). Esto se debe a que la variación del ancho de los anillos w (definido como la diferencia entre los radios interior y exterior del anillo: $w = R_{out} - R_{int}$), produce una distorsión del período de las oscilaciones AB. Por lo tanto, se espera un “apagamiento” de las mismas para grandes valores del ancho w del QR. Claramente un aumento del ancho del QR, produce un cambio notable en la geometría de la estructura y esto lleva a una modificación interesante del espectro, como es la desaparición del típico comportamiento oscilatorio de la energía presente en QR estrechos.

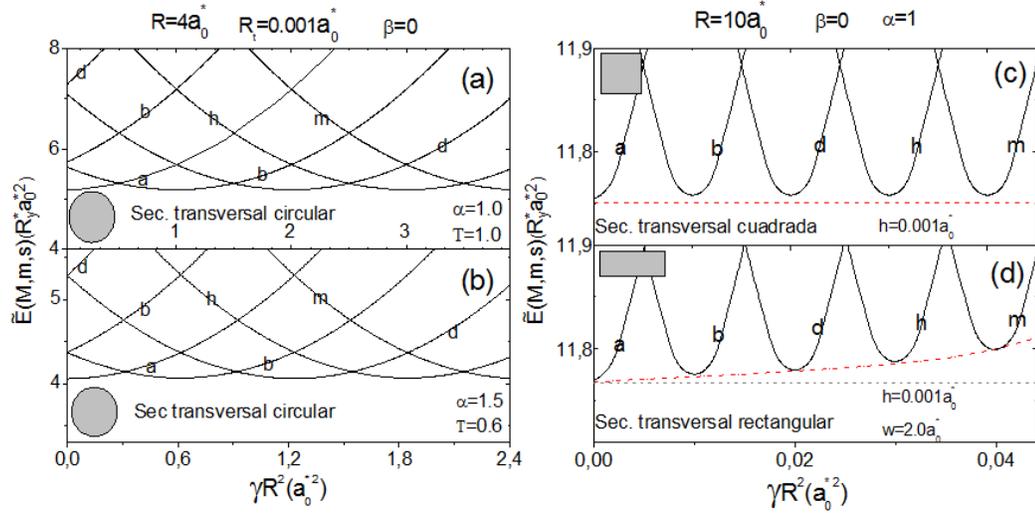


Fig. 3.7. Energías $\tilde{E}(M, m, s)$ de dos electrones en VCQRs como una función de la magnitud del campo magnético (renormalizado para el caso de (a) y (b)) para anillos de sección transversal: circular (a, b), cuadrada (c) y rectangular (d). Para las diferentes secciones transversales se usaron los siguientes parámetros: $R = 4a_0^*$, $R_i = 0.001a_0^*$ y $\beta = 0.0$ para la sección transversal circular y $R = 10a_0^*$, $\alpha = 1$ y $\beta = 0.0$ para las sección transversal cuadrada y rectangular.

No obstante este efecto es posible de observar sólo en su etapa inicial cuando el apagamiento de oscilaciones AB se hacen menos notable y las curvas de las energías en función de campo magnético comienzan a aumentar sus pendientes.

3.3. INFLUENCIA DE LOS DEFECTOS ESTRUCTURALES SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS ELECTRONES EN VCQRs NO UNIFORMES

Como se ha mencionado desde un principio, los QRs auto-ensamblados despliegan interesantes efectos debido a su particular topología, entre los cuales se destaca el comportamiento oscilatorio de la energía (oscilaciones AB) cuando un campo magnético es aplicado a lo largo del eje del anillo. Este efecto se manifiesta con claridad solo en QRs estrechos y homogéneos, tal como se ha visto en la anterior sección. Sin embargo las propiedades de los QRs cambian drásticamente si el anillo no es uniforme. Cualquier variación suave y pequeña en el ancho de los anillos y a la curvatura de los mismos puede producir la extinción de las oscilaciones AB [144] debido a que se presenta localización de los portadores de carga en la región que contiene los defectos. En nuestro estudio se muestra que la localización de electrones es mucho más fuerte para variaciones de la altura del anillo (capítulo 1). Por ejemplo, el aumento en la altura del QR en una capa de tan sólo 1nm disminuye la energía del movimiento transversal de los electrones en aproximadamente un 5%. Este efecto es incluso más interesante en el caso de dos electrones en anillos cuánticos delgados acoplados verticalmente con defectos estructurales en su morfología.

En esta sección se analiza la influencia de la no uniformidad estructural sobre el espectro energético de dos electrones confinados en un par de anillos cuánticos acoplados verticalmente con defectos locales en su morfología.

3.3.1. MODELO ESTRUCTURAL

El modelo planteado consta de dos electrones confinados en un par de anillos coaxiales muy delgados acoplados verticalmente representados esquemáticamente en la figura 3.8.

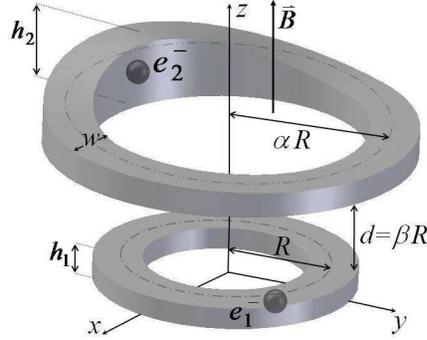


Fig. 3.8. Diagrama esquemático (3D) de anillos cuánticos acoplados verticalmente, con el anillo inferior uniforme y el superior no uniforme, con dos electrones capturados y un campo magnético uniforme aplicado a lo largo del eje z

Donde el radio de la línea central del anillo inferior (definida en la sección 3.2.1) $R_1 = R$ y del anillo superior se define como $R_2 = \alpha R$. Los dos anillos tiene el mismo ancho w , la separación entre ellos es dada por $d = \beta R$ y el campo magnético externo \vec{B} es aplicado a lo largo del eje Z. De igual manera como se trabajó en la anterior sección, se tiene que el parámetro adimensional α es la razón entre los respectivos radios R_2 y R_1 de las líneas centrales y el parámetro adimensional β así como R relaciona la distancia entre anillos d con el radio de la línea central R . El anillo inferior es considerado homogéneo con grosor h_1 constante ($h_1(\vartheta_1) = h = cte$), mientras que el grosor del anillo superior es considerado variable, depende de la coordenada angular ϑ_2 de acuerdo a la función $h_2(\vartheta_2) = h/\sqrt{1 + \sigma^2 \vartheta_2^2}$ definida en el intervalo $(-\pi < \vartheta_2 < \pi)$. Aquí el parámetro σ da el nivel de uniformidad de la superficie del anillo superior.

Para estos sistemas, hemos considerado un modelo simplificado de barrera infinita, $V_1(\rho_1, \vartheta_1, z_1)$ en el anillo inferior y $V_2(\rho_2, \vartheta_2, z_2)$ en el anillo superior, definidos de acuerdo a la siguiente expresión:

$$V_k(\vec{r}_k) = \begin{cases} 0; & 0 < z_k < h_k(\vartheta_k); R_k - \frac{w_k}{2} < \rho_k < R_k + \frac{w_k}{2} \\ \infty; & \text{En otro caso} \end{cases} \quad (3.24)$$

Donde $k=1$ para el anillo inferior y $k=2$ para el anillo superior.

3.3.2. HAMILTONIANO PARA DOS ELECTRONES EN VCQRs NO-UNIFORMES

Del mismo modo como se trabajo en el capítulo 2 (Adimensionalización del Hamiltoniano (2.3) a partir de unidades efectivas), el Hamiltoniano adimensional para este sistema bi-electrónico con un campo magnético homogéneo aplicado en dirección Z, se puede escribir (resumiendo algunos pasos descritos anteriormente) en coordenadas cilíndricas como:

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{(3D)} &= \tilde{H}_0 + \tilde{U}_{12}; \\ \tilde{H}_0 &= \sum_{k=1,2} \left[-\frac{1}{\rho_k} \frac{\partial}{\partial \rho_k} \rho_k \frac{\partial}{\partial \rho_k} - \frac{1}{\rho_k^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_k^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} + \frac{\gamma^2 \rho_k^2}{4} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta_k} + \tilde{V}_k(\rho_k, \vartheta_k, z_k) \right] \end{aligned} \quad 3.25a$$

Aquí, $\tilde{V}_1(\rho_1, \vartheta_1, z_1)$ es el potencial de confinamiento adimensional para cada electrón y \tilde{U}_{12} es el potencial de interacción coulombiana dado en forma adimensional por:

$$\tilde{U}_{12} = \frac{2}{r_{12}} = \frac{2}{\sqrt{(\rho_1 - \rho_2)^2 + 4\rho_1\rho_2 \sin^2\left(\frac{\vartheta_1 - \vartheta_2}{2}\right) + ((d + z_1) - z_2)^2}} \quad 3.25b$$

Realizando la sustitución $\rho_k = R_k + \chi_k$, donde $\frac{w_k}{2} < \chi_k < \frac{w_k}{2}$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= \sum_{k=1,2} \tilde{H}_{0k}; \\ \tilde{H}_{0k} &= -\frac{1}{(R_k + \chi_k)} \frac{\partial}{\partial \chi_k} (R_k + \chi_k) \frac{\partial}{\partial \chi_k} - \frac{1}{(R_k + \chi_k)^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_k^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} + \frac{\gamma^2 (R_k + \chi_k)^2}{4} \\ &\quad - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta_k} + V_k(\chi_k, \vartheta_k, z_k) \end{aligned} \quad (3.26)$$

Mediante la aproximación adiabática ($R_k \gg w_k, h_k$), se tienen las siguientes consideraciones,

$$AA \Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{(R_k + \chi_k)} \frac{\partial}{\partial \chi_k} (R_k + \chi_k) \frac{\partial}{\partial \chi_k} \approx \frac{\partial^2}{\partial \chi_k^2} \\ \frac{1}{(R_k + \chi_k)^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_k^2} \ll \text{El resto de términos de la ecuación (3.26)} \end{cases} \quad (3.27)$$

Con las cuales el Hamiltoniano (3.26) puede ser expresado por separación de variables (movimiento lento y movimiento rápido –AA) de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 &= \tilde{H}_0(\chi_{k=1,2}, z_{k=1,2}) + \tilde{H}_0(\vartheta_{k=1,2}); \\ \tilde{H}_0(\chi_{k=1,2}, z_{k=1,2}) &= \sum_{k=1,2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial \chi_k^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} + \frac{\gamma^2 (R_k + \chi_k)^2}{4} + \tilde{V}_k(\chi_k, \vartheta_k, \partial z_k) \right]; \\ \tilde{H}_0(\vartheta_{k=1,2}) &= \sum_{k=1,2} \left[-\frac{1}{(R_k + \chi_k)^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_k^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta_k} \right] \end{aligned} \quad 3.28$$

3.3.3. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

De acuerdo a la AA se tienen dos ecuaciones diferenciales que permiten encontrar los valores de energía \tilde{E}_k para el movimiento lento y para el movimiento rápido, respectivamente.

Por lo tanto tenemos:

I. Para el movimiento lento:

La función de onda es: $f(\chi_k, z_k) = f_\chi(\chi_k) f_z(z_k)$ con $f_\chi(\chi_k) = \sqrt{\frac{2}{w_k}} \cos\left(\frac{\pi\chi_k}{w_k}\right)$ y

$f_z(z_k) = \sqrt{\frac{2}{h_k(\vartheta_k)}} \sin\left(\frac{\pi z_k}{h_k(\vartheta_k)}\right)$. Entonces la ecuación de Schrödinger para el movimiento

lento de los electrones es:

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{0k}(\chi_k, z_k) f(\chi_k, z_k) &= \tilde{E}_k(\vartheta_k) f(\chi_k, z_k) \Rightarrow \\ \tilde{H}_{0k}(\chi_k, z_k) f_\chi(\chi_k) f_z(z_k) &= \tilde{E}_k(\vartheta_k) f_\chi(\chi_k) f_z(z_k); \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial \chi_k^2} - \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} + \frac{\gamma^2 (R_k + \chi_k)^2}{4} \right] f_\chi(\chi_k) f_z(z_k) = \tilde{E}_k(\vartheta_k) f_\chi(\chi_k) f_z(z_k)$$

Reemplazando $f_\chi(\chi_j)$ tenemos:

$$\left[-\frac{\partial^2 f_\chi(\chi_k)}{\partial \chi_k^2} + \tilde{V}_k(\chi_k) f_\chi(\chi_k) \right] = \tilde{E}_k(\vartheta_k) f_\chi(\chi_k); \quad (3.30)$$

donde,

$$\tilde{V}_k(\chi_k) = \begin{cases} \frac{\gamma^2}{4} (R_k + \chi_k)^2 + \frac{\pi^2}{h_k^2(\vartheta_k)} &; \quad |\chi_k| < \frac{w_k}{2} \\ \infty &; \quad |\chi_k| > \frac{w_k}{2} \end{cases} \quad (3.31)$$

Haciendo $\tilde{V}_k(\chi_k) = \tilde{V}_{0k} + \tilde{V}_{1k}(\chi_k)$, entonces

$$\tilde{V}_{0k} = \frac{\gamma^2}{4} R_k^2 + \frac{\pi^2}{h_k^2(\vartheta_k)} \quad \text{y} \quad \tilde{V}_{1k}(\chi_k) = \frac{\gamma^2}{4} (2R_k \chi_k + \chi_k^2) \quad (3.32)$$

Aproximación de orden cero

Realizando una primera aproximación, definida como aproximación de orden cero, tenemos para cada electrón:

$$\left[-\frac{\partial^2 f_\chi^{(0)}(\chi_k)}{\partial \chi_k^2} + \tilde{V}_{0k}(\chi_k) f_\chi^{(0)}(\chi_k) \right] = \tilde{E}_k^{(0)}(\vartheta_k) f_\chi^{(0)}(\chi_k); \quad (3.33)$$

Con $f_\chi^{(0)}(\chi_k) = \sqrt{\frac{2}{w_k}} \cos\left(\frac{\pi\chi_k}{w_k}\right)$.

Reemplazando \tilde{V}_{0k} , la solución de la ecuación (3.33) para los dos electrones es:

$$\tilde{E}^{(0)}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \sum_{k=1,2} \left\{ \frac{\gamma^2}{4} R_k^2 + \frac{\pi^2}{w_k^2} + \frac{\pi^2}{h_k^2(\vartheta_k)} \right\} \quad (3.34)$$

Aproximación de primer orden

De acuerdo a la teoría de perturbaciones, consideramos una nueva aproximación de primer orden para la energía $\tilde{E}^{(1)}(\vartheta_1, \vartheta_2)$, lo cual nos permite escribir la energía del sistema en una primera aproximación como:

$\tilde{E}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \tilde{E}^{(0)}(\vartheta_1, \vartheta_2) + \tilde{E}^{(1)}(\vartheta_1, \vartheta_2)$; donde $\tilde{E}^{(1)}(\vartheta_1, \vartheta_2)$ es la perturbación de primer orden en la energía. Para esta expresión tenemos entonces:

$$\tilde{E}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \sum_{k=1,2} \left[\tilde{E}^{(0)}(\vartheta_1, \vartheta_2) + \left\langle f_{\chi^k}^{(0)} \left| \tilde{V}_{1k}(\chi_k) \right| f_{\chi^k}^{(0)} \right\rangle \right] \quad (3.35)$$

Reemplazando la expresión (3.34), se obtiene:

$$\tilde{E}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \sum_{k=1,2} \left[\frac{\gamma^2}{4} R_k^2 + \frac{\pi^2}{w_k^2} + \frac{\pi^2}{h_k^2(\vartheta_k)} + \left\langle f_{\chi^k}^{(0)} \left| \frac{\gamma^2}{4} (2R_k \chi_k + \chi_k^2) \right| f_{\chi^k}^{(0)} \right\rangle \right] \quad (3.36)$$

donde,

$$\left\langle f_{\chi^k}^{(0)} \left| \frac{\gamma^2}{4} (2R_k \chi_k + \chi_k^2) \right| f_{\chi^k}^{(0)} \right\rangle = \int_{-w_k/2}^{w_k/2} \frac{2\gamma^2}{4w_k} (2R_k \chi_k + \chi_k^2) \cos^2 \left(\frac{\pi}{w_k} \chi_k \right) d\chi_k = \frac{\gamma^2}{4} \frac{w_k^2}{2} \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2} \right)$$

Entonces la energía del sistema en la aproximación de primer orden queda:

$$\tilde{E}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \sum_{k=1,2} \left[\frac{\gamma^2}{4} (R_k^2 + \delta w_k^2) + \frac{\pi^2}{w_k^2} + \frac{\pi^2}{h_k^2(\vartheta_k)} \right]; \quad \delta = \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{\pi^2} \right) \approx \frac{1}{36} \quad (3.37)$$

Como $R_1 = R$; $R_2 = \alpha R$ y $d = \beta R$, entonces:

$$\tilde{E}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \frac{\gamma^2}{4} \left\{ R^2 (1 + \alpha^2) + \delta (w_1^2 + w_2^2) \right\} + \left(\frac{\pi^2}{w_1^2} + \frac{\pi^2}{w_2^2} \right) + \left(\frac{\pi^2}{h_1^2(\vartheta_1)} + \frac{\pi^2}{h_2^2(\vartheta_2)} \right); \quad (3.38)$$

$$\tilde{E}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \frac{\gamma^2}{4} R^2 (1 + \alpha^2) + \tilde{E}_0(\vartheta_1, \vartheta_2); \quad (3.39)$$

$$\tilde{E}_0(\vartheta_1, \vartheta_2) = \frac{\gamma^2}{4} \delta (w_1^2 + w_2^2) + \left(\frac{\pi^2}{w_1^2} + \frac{\pi^2}{w_2^2} \right) + \left(\frac{\pi^2}{h_1^2(\vartheta_1)} + \frac{\pi^2}{h_2^2(\vartheta_2)} \right);$$

Para los dos anillos, nosotros consideramos los defectos en altura como una función de la coordenada angular ϑ de la siguiente manera:

$$\frac{\pi^2}{h_1^2(\vartheta_1)} = \frac{\pi^2}{h_1^2} \quad \text{y} \quad \frac{\pi^2}{h_2^2(\vartheta_2)} = \frac{\pi^2}{h_2^2} (1 + \sigma^2 \vartheta_2^2)^2 \quad (3.40)$$

En donde se ha tenido en cuenta que h_1 y h_2 son las alturas máximas de los dos anillos y σ es una constante arbitraria que determina el nivel de no homogeneidad estructural (ver sección 3.2.1).

II. Para el movimiento rápido:

De (3.28) y usando los resultados obtenidos en (3.37), el Hamiltoniano para el movimiento angular (rápido) es:

$$\tilde{H}_0(\vartheta_1, \vartheta_2) = \sum_{k=1,2} \left[-B_k \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_k^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta_k} + \frac{\gamma^2}{4} R_k^2 + \tilde{E}_0(\vartheta_k) \right] \quad (3.41)$$

Donde

$$B_k = \left\langle f_{\chi^k}^{(0)} \left| \frac{1}{(R_k + \chi_k)^2} \right| f_{\chi^k}^{(0)} \right\rangle \quad (3.42)$$

$$\Rightarrow B_k = \int_{-w_k/2}^{w_k/2} \frac{2}{w_k} \left(\frac{1}{(R_k + \chi_k)^2} \right) \cos^2 \left(\frac{\pi}{w_k} \chi_k \right) d\chi_k = \frac{1}{R_k - 3\delta w_k^2}$$

De esta expresión se tiene que el término $3\delta w_j^2 \ll R_j^2$, entonces se pueden considerar las siguientes aproximaciones:

$$B_k \approx \frac{1}{R_k^2} \Rightarrow B_1 \approx \frac{1}{R^2}; \quad B_2 \approx \frac{1}{\alpha^2 R^2} \quad (3.43)$$

Usando las coordenadas relativas y del centro de masa, definiendo una nueva unidad de campo magnético en términos del flujo magnético, como se presenta a continuación:

$$\Theta = \frac{(\vartheta_1 + \alpha^2 \vartheta_2)}{(1 + \alpha^2)}; \quad \vartheta = \vartheta_1 - \vartheta_2 \quad (3.43.a)$$

$$\Rightarrow \vartheta_1 = \Theta - \frac{\vartheta}{1 + \alpha^2} \quad \text{y} \quad \vartheta_2 = \Theta + \frac{\vartheta}{1 + \alpha^2} \quad (3.43.b)$$

$$\text{y} \quad \frac{\gamma^2 R_k^2}{2} = \frac{\tilde{\Phi}_k}{\Phi_0} = \Phi_k \quad \text{con} \quad \Phi_0 = \frac{hc}{e} \quad (3.43.c)$$

Y usando (3.40) y (3.43) entonces el Hamiltoniano renormalizado $\tilde{H}^R = \tilde{H}_0 R^2 + \langle \tilde{U}_{12} \rangle R^2 = \tilde{H}_0 R^2 + \langle \tilde{U}_{12}^R \rangle$ es:

$$\tilde{H}^R(\vartheta, \Theta) = -\frac{1}{1 + \alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} - \left(1 + \frac{1}{\alpha^2}\right) \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + 2i\Phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + (1 + \alpha^2) \Phi^2 + \left[\frac{\gamma^2}{4} \delta(w_1^2 + w_2^2) + \frac{\pi^2}{w_1^2} + \frac{\pi^2}{w_2^2} \right] R^2 \quad (3.44)$$

$$+ [A_0 + A_1 \Theta^2 + A_2 \vartheta^2 + A_3 \Theta \vartheta] + \langle \tilde{U}_{12}^R \rangle$$

en el cual,

$$A_0 = \left(\frac{\pi^2}{h_1} + \frac{\pi^2}{h_1} \right) R^2; \quad A_1 = \frac{2\sigma^2 \pi^2}{h_2^2} R^2; \quad A_2 = \frac{2\sigma^2 \pi^2}{h_2^2 (1 + \alpha^2)^2} R^2; \quad A_3 = -\frac{4\sigma^2 \pi^2}{h_2^2 (1 + \alpha^2)} R^2 \quad (3.45)$$

Y $\langle \tilde{U}_{12}^R \rangle$ es el potencial promedio de interacción Coulombiana entre los dos electrones:

$$\langle \tilde{U}_{12}^R \rangle = \left\langle f_{\chi}(z_1, z_1) f_z(z_1, z_1) \left| \tilde{U}_{12} R^2 \right| f_{\chi}(z_1, z_1) f_z(z_1, z_1) \right\rangle \quad (3.46)$$

Si hacemos $w_1 = w_2 = w$ y $h_1 = h_2 = h$, entonces:

$$\langle \tilde{U}_{12}^R \rangle = 2R \left[(1 - \alpha)^2 + 4\alpha \sin^2 \left(\frac{\vartheta}{2} \right) + \beta^2 + \frac{h^2 + w^2}{18R^2} \right]^{-1/2} \quad (3.47a)$$

$$A_0 = \left(\frac{2\pi^2}{h} \right) R^2; \quad A_1 = A_0 \sigma^2; \quad A_2 = \frac{A_1}{(1 + \alpha^2)^2}; \quad A_3 = -\frac{2A_1}{(1 + \alpha^2)} \quad (3.47b)$$

Con estas consideraciones, el Hamiltoniano renormalizado del sistema en las coordenadas del centro de masa y relativa más los términos perturbativos queda expresado de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
\tilde{H}^R(\vartheta, \Theta) &= \tilde{H}_{cm}^R(\Theta) + \tilde{H}_{rel}^R(\vartheta) + \tilde{H}_{pert}^R(\Theta, \vartheta) \\
\tilde{H}_{cm}^R(\Theta) &= -\frac{1}{1+\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} + 2i\Phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + A_1 \Theta^2 + (1+\alpha^2) \Phi^2 \\
\tilde{H}_{rel}^R(\vartheta) &= -\left(1 + \frac{1}{\alpha^2}\right) \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} + A_2 \vartheta^2 + \langle \tilde{U}_{12}^R \rangle \\
\tilde{H}_{pert}^R(\Theta, \vartheta) &= A_3 \Theta \vartheta + A_4 ; \text{ donde } A_4 = A_0 + \left[\frac{\gamma^2}{2} \delta w^2 + \frac{2\pi^2}{w^2} \right] R^2 = A_0 + \Phi \delta w^2 + \frac{2\pi^2}{w^2} R^2
\end{aligned} \tag{3.48}$$

Para resolver las respectivas ecuaciones de autovalores, nosotros hemos empleado el método de Fourier-Galerkin para el Hamiltoniano en la coordenada del centro de masa y en la coordenada relativa, respectivamente.

III. Método de Fourier para el movimiento del centro de masa

La ecuación de Schrödinger para el centro de masa es:

$$\tilde{H}_{cm}^R(\Theta) \Xi_M(\Theta) = \tilde{E}_M^R \Xi_M(\Theta); \tag{3.49a}$$

$$\left[-\frac{1}{1+\alpha^2} \frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} + 2i\Phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + A_1 \Theta^2 + (1+\alpha^2) \Phi^2 \right] \Xi_M(\Theta) = \tilde{E}_M^R \Xi_M(\Theta) \tag{3.49b}$$

Aquí \tilde{E}_M^R es la energía renormalizada, el subíndice M es el número cuántico asociado al momento angular del centro de masa y $\Xi_M(\Theta)$ es la función de onda para el movimiento del centro de masa, la cual satisface la condición $\Xi_M(\Theta + 2\pi) = \Xi_M(\Theta - 2\pi)$ en el intervalo $-\pi < \Theta < \pi$. Expandiendo esta función en series de Fourier, tenemos:

$$\Xi_M(\Theta) = \sum_{M=-M_0}^{M_0} C_M A_M e^{iM\Theta}; \quad A_M = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}; \quad C_M = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \Xi_M(\Theta) e^{-iM\Theta} d\Theta \tag{3.50}$$

Mediante la aplicación del método variacional a la ecuación (3.49b) y usando la función de onda (3.50), el problema es equivalente a minimizar la siguiente integral:

$$F[C_M] = \int_{-\pi}^{\pi} \left\{ \frac{1}{1+\alpha^2} \frac{\partial \Xi}{\partial \Theta} \frac{\partial \Xi^*}{\partial \Theta} - i\Phi \left[\frac{\partial \Xi^*}{\partial \Theta} \Xi - \Xi^* \frac{\partial \Xi}{\partial \Theta} \right] + [\tilde{V}_{eff}(\Theta) - \tilde{E}_M^R] \Xi^* \Xi \right\} d\Theta \tag{3.51}$$

con $\tilde{V}_{eff}(\Theta) = A_1 \Theta^2 + (1+\alpha^2) \Phi^2$. Finalmente el anterior funcional queda expresado como:

$$F[C_M^*] = \sum_M \sum_{M'} A_M^2 \int_{-\pi}^{\pi} \left\{ \frac{M^2}{1+\alpha^2} - 2M\Phi + [\tilde{V}_{eff}(\Theta) - \tilde{E}_M^R] \right\} C_M^* C_{M'} e^{i(M-M')\Theta} d\Theta \tag{3.52}$$

Resolviendo la anterior integral para $M = M'$ y $M \neq M'$ y normalizando ($A_M^2 = 1/2\pi$), se tiene que:

$$F[C_M^*] = \begin{cases} \sum_M \sum_{M'} \left[\left(\frac{M^2}{1+\alpha^2} - 2M\Phi + (1+\alpha^2) \Phi^2 - \tilde{E}_M^R \right) + \frac{\pi^2}{3} A_1 \right] C_M^* C_{M'} & ; M = M' \\ \sum_M \sum_{M'} \left[\frac{2A_1}{(M-M')^2} \cos(M-M')\pi \right] C_M^* C_{M'} & ; M \neq M' \end{cases} \tag{3.53}$$

Derivando respecto a los coeficientes C_M , obtenemos los siguientes resultados:

$$\frac{\partial F[C_M^*]}{\partial C_M^*} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \sum_M \sum_{M'} \left[\left(\frac{M^2}{1+\alpha^2} - 2M\Phi + (1+\alpha^2)\Phi^2 - \tilde{E}_M^R \right) + \frac{\pi^2}{3} A_1 \right] C_{M'} = 0 & ; M = M' \\ \sum_M \sum_{M'} \left[\frac{2A_1}{(M-M')^2} \cos(M-M')\pi \right] C_{M'} = 0 & ; M \neq M' \end{cases} \quad (3.54)$$

Este conjunto de $2M$ independientes, puede ser representado en forma matricial

$$A_{MM'} \vec{C}_{M'} = 0, \text{ con} \quad (3.55)$$

$$A_{MM'} = \begin{cases} \sum_M \left(\frac{M^2}{1+\alpha^2} - 2M\Phi + (1+\alpha^2)\Phi^2 - \tilde{E}_M^R \right) + \frac{\pi^2}{3} A_1 & ; M = M' \\ \sum_M \left(\frac{2A_1}{(M-M')^2} \cos(M-M')\pi \right) & ; M \neq M' \end{cases}$$

IV. Método de Fourier para el movimiento relativo

La ecuación de Schrödinger para el movimiento relativo es:

$$\tilde{H}_{rel}^R(\vartheta) \Psi_m(\vartheta) = \tilde{E}_{rel}^R(m, s) \Psi_m(\vartheta); \quad (3.56a)$$

Donde $\Psi_m(\vartheta)$ es la función de onda que describe el movimiento relativo, y satisface las condiciones $\Psi_m(0) = \Psi_m(2\pi)$ si $m = 2k + 1$, y $\Psi_m'(0) = \Psi_m'(2\pi) = 0$ si $m = 2k$ en el intervalo $-2\pi < \vartheta < 2\pi$. $\tilde{E}_{rel}^R(m, s)$ es la energía del movimiento relativo de los dos electrones. Los números cuánticos M , m y s son los mismos descritos en la sección anterior.

Reemplazando el Hamiltoniano (3.48) para el movimiento relativo, la ecuación de onda (3.56a) queda entonces:

$$-\left(1 + \frac{1}{\alpha^2}\right) \Psi_m''(\vartheta) + \left[2R \left[(1-\alpha)^2 + 4\alpha \sin^2\left(\frac{\vartheta}{2}\right) + \beta^2 + \frac{h^2 + w^2}{18R^2} \right]^{-1/2} + A_2 \vartheta^2 \right] \Psi_m(\vartheta) = \tilde{E}_r^R(m, s) \Psi_m(\vartheta) \quad (3.56b)$$

Aquí el número cuántico s está asociado al spin total del sistema de dos electrones, $s = 0$ corresponde al estado singlete (la solución de la anterior ecuación diferencial es par) y $s = 1$ al estado triplete (la solución es impar).

El intervalo de periodicidad es la solución de la ecuación (1.56b) es 4π . Para reducirlo al intervalo estándar, hacemos la sustitución $x = \vartheta / 2$;

$$-B\Psi'(x) + [\tilde{V}_{eff}(x) - \tilde{E}_r^R(m, s)]\Psi(x) = 0; \quad -\pi < x < \pi; \quad (3.57a)$$

$$\tilde{V}_{eff}(x) = \left\{ 2R \left[(1-\alpha)^2 + 4\alpha \sin^2 x + \beta^2 + \frac{h^2 + w^2}{18R^2} \right]^{-1/2} + 4A_2 x^2 \right\}; \quad B = \frac{1}{4} \left(1 + \frac{1}{\alpha^2} \right) \quad (3.57b)$$

Con $\Psi(\pi) = \Psi(-\pi)$. Esta ecuación es equivalente a la que surge al minimizar el siguiente funcional:

$$F = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{B}{4} (\Psi')^2 + \{ \tilde{V}_{eff}(x) - \tilde{E}_r^R(m, s) \} \Psi^2 \right] dx \quad (3.58)$$

Puesto que el potencial $\tilde{V}_{eff}(x)$ tiene paridad par ($\tilde{V}_{eff}(x) = \tilde{V}_{eff}(-x)$), entonces las funciones $\Psi(x)$ deben tener paridad par [$\Psi_+(x)$] o impar [$\Psi_-(x)$], esto resume en la siguiente expresión:

$$\Psi(x) = \begin{cases} \Psi_+(x) = \sum_{n=0}^{n_f} c_n \psi_n^+(x); & \psi_n^+(-x) = \psi_n^+(x) = A_n \cos nx \\ \Psi_-(x) = \sum_{n=0}^{n_f} c_n \psi_n^-(x); & \psi_n^-(-x) = -\psi_n^-(x) = A_n \sin nx \end{cases} \quad (3.59)$$

En la cual el coeficiente A_n es dado por

$$A_n = \langle n | n \rangle = \delta_{nn} = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, & n = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}, & n \neq 0 \end{cases} \quad (3.60)$$

Reemplazando $\Psi(x) = \sum_{n=0}^{n_f} c_n \psi_n$ en la ecuación integral (3.58), obtenemos la siguiente expresión:

$$F[c_n] = \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \left[\frac{B}{4} \sum_{n=0}^{n_f} c_n \psi_n \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \psi_{n'} - \tilde{E}_r^R \sum_{n=0}^{n_f} c_n \psi_n \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \psi_{n'} + \tilde{V}_{eff}(x) \sum_{n=0}^{n_f} c_n \psi_n \sum_{n'=0}^{n_f} c_{n'} \psi_{n'} \right] dx \quad (3.61)$$

Reemplazando la ecuación (3.59) para funciones pares y para funciones impares, es posible obtener el funcional $F[c_n]$ para ambas funciones. Con el fin de simplificar la escritura matemática en estas ecuaciones emplearemos la siguiente notación:

$$\begin{aligned} \tilde{V}_n &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\tilde{V}_{eff}(x) \cos nx] dx, & \text{para funciones pares} \\ \tilde{V}_n &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} [\tilde{V}_{eff}(x) \sin nx] dx, & \text{para funciones impares} \end{aligned} \quad (3.62)$$

Funcional $F[c_n]$ para funciones pares

Mediante una serie de sencillos cálculos en la reducción del funcional (3.61) empleando las funciones pares, se puede llegar a la siguiente expresión:

$$F[c_n] = \left[\left(\frac{B}{4} - \tilde{E}_r^R \right) \sum_{n,n'=0}^{n_f} n^2 c_n c_{n'} \delta_{nn'} + c_0^2 \tilde{V}_0 + 2\sqrt{2} c_0 \sum_{n'=1}^{n_f} c_{n'} \tilde{V}_{n'} + \sum_{n,n'=1}^{n_f} c_n c_{n'} [\tilde{V}_{n+n'} + \tilde{V}_{|n-n'|}] \right] \quad (3.63)$$

La cual derivando respecto a los coeficientes c_n , arroja los siguientes resultados:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial c_0} &= (\tilde{V}_0 - \tilde{E}_r^R) c_0 + \sqrt{2} \sum_{n'=1}^{n_f} \tilde{V}_{n'} c_{n'} = 0 \\ \frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial c_n} &= \sqrt{2} c_0 \tilde{V}_n + \sum_{n'=1}^{n_f} \left\{ (\tilde{V}_{n+n'} + \tilde{V}_{|n-n'|}) + \left(\frac{B}{4} n^2 - \tilde{E}_r^R \right) \delta_{nn'} \right\} c_{n'} = 0 \end{aligned} \quad (3.64)$$

Este conjunto de n_f ecuaciones independientes puede ser representado en forma matricial:

$$A_{nn'} \vec{c}_{n'} = 0; \quad \text{con } A_{nn'} = \begin{cases} (\tilde{V}_0 - \tilde{E}_r^R) c_0 + \sqrt{2} \sum_{n'=1}^{n_f} \tilde{V}_{n'} c_{n'} \\ \sqrt{2} c_0 \tilde{V}_n + \sum_{n'=1}^{n_f} \left\{ (\tilde{V}_{n+n'} + \tilde{V}_{|n-n'|}) + \left(\frac{B}{4} n^2 - \tilde{E}_r^R \right) \delta_{nn'} \right\} c_{n'} \end{cases} \quad (3.65)$$

Los elementos de esta matriz simétrica pueden escribirse de la siguiente manera

$$A_{00} = \tilde{V}_0 - \tilde{E}_r^R ; A_{0n} = A_{n0} = \sqrt{2}\tilde{V}_n$$

$$A_{nn'} = \left(\frac{B}{4} - \tilde{E}_r^R \right) \delta_{nn'} + \tilde{V}_{n+n'} + \tilde{V}_{|n-n'|}$$

$$n, n' = 1, n_f$$
(3.66)

Funcional $F[c_n]$ para funciones impares

De la misma manera en que se procedió para las funciones pares, se obtiene el funcional reducido para funciones impares, sabiendo además que $\psi_0^- = \psi_0'^- = 0$. El funcional para funciones impares queda de la forma:

$$F[c_n] = \left[\left(\frac{B}{4} - \tilde{E}_r^R \right) \sum_{n,n'=1}^{n_f} n^2 c_n c_{n'} \delta_{nn'} + \sum_{n,n'=1}^{n_f} c_n c_{n'} \left[\tilde{V}_{n+n'} - \tilde{V}_{|n-n'|} \right] \right]$$
(3.67)

Derivando respecto a los coeficientes c_n , obtenemos:

$$\frac{1}{2} \frac{\partial F}{\partial c_n} = \sum_{n'=1}^{n_f} \left\{ \left(\frac{B}{4} n^2 - \tilde{E}_r^R \right) \delta_{nn'} + \left(\tilde{V}_{n+n'} - \tilde{V}_{|n-n'|} \right) \right\} c_{n'} = 0$$
(3.68)

Este conjunto de n_f ecuaciones independientes puede ser representado en forma matricial:

$$A_{nn'} \bar{c}_{n'} = 0 \quad \text{con} \quad A_{nn'} = \left(\frac{B}{4} n^2 - \tilde{E}_r^R \right) \delta_{nn'} + \left(\tilde{V}_{n+n'} - \tilde{V}_{|n-n'|} \right)$$
(3.69)

Los vectores y valores propios encontrados numéricamente para la matriz (3.55) para el movimiento del centro de masa y matrices (3.65) y (3.69) para el movimiento relativo permiten obtener de manera analítica las funciones de onda que a continuación pueden utilizarse como base en el marco de método de Galerkin al considerar diferentes tipos de perturbaciones. En este caso la energía total puede representarse en la forma:

$$\tilde{E}(M, m, s) = \tilde{E}_M^R(\Theta, \vartheta) + \tilde{E}_r^R(\Theta, \vartheta) + \tilde{E}_{pert}^R(\Theta, \vartheta)$$
(3.70)

3.3.4. ESPECTRO ENERGÉTICO PARA DOS ELECTRONES EN UN QR NO UNIFORME

Hemos realizado los cálculos numéricos de las energías renormalizadas en unidades de $(R_y^*(a_0^*))^2$ de los dos electrones en función del flujo magnético y de diferentes parámetros geométricos de los anillos. Esto con el fin de analizar el efecto del tamaño de los anillos y la no-uniformidad de sus superficies.

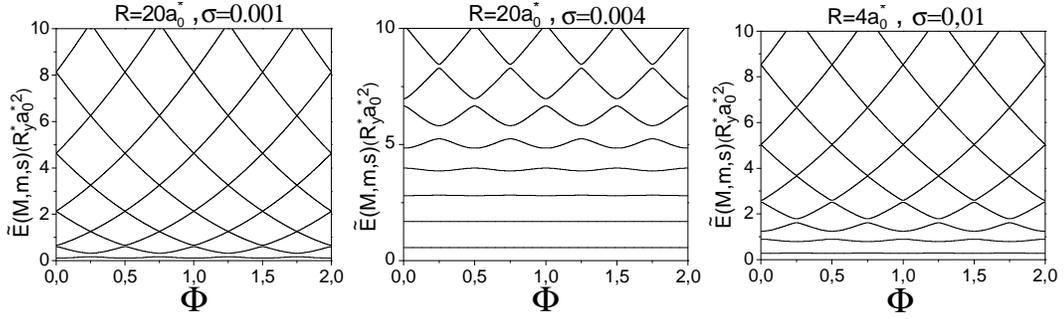


Fig. 3.9. Energías renormalizadas en unidades de $(R_y^*(a_0^*)^2)$ de un electrón en función del flujo magnético en un único QR con dos diferentes radios R , diferentes niveles de homogeneidad σ , y una altura máxima $h = 0.2a_0^*$

En primer lugar, se calculan las energías ε de un electrón en un único QR 1D ($\beta \rightarrow 0, \alpha \rightarrow 1$) con una suave falta de homogeneidad de su superficie ($\sigma \rightarrow 0$, para el caso de QR uniformes) cuyos resultados de cálculo han sido reportados previamente por Zhu *et al.* [92] (ver figura 3.9).

En la anterior figura se observa que el aumento del valor del parámetro σ (el cual caracteriza el nivel de homogeneidad de la superficie del QR) desde 0,001 hasta 0,04 manteniendo el mismo radio del anillo de $20a_0^*$ conduce a un apagamiento sucesivo de las oscilaciones AB de los niveles energéticos más bajos. Esto es una consecuencia del hecho de que en estos niveles, la rotación del electrón al introducir los defectos se transforma paulatinamente en una vibración en las proximidades de la región que presenta el defecto estructural. Como se vio en el capítulo 2, el electrón presenta mayor probabilidad de encontrarse en la región donde la superficie del anillo tiene un máximo de altura. Esto conduce a la aparición de estados localizados correspondientes a la vibración del electrón en la región de mayor altura. También se puede ver en esta misma figura que aparece un mayor número de estados localizados a medida que el radio del QR no uniforme se hace mayor.

3.3.5. ESPECTRO ENERÉTICO PARA DOS ELECTRONES EN VCQRs NO UNIFORMES

A continuación se analiza el efecto de la no homogeneidad en la morfología de los QRs acoplados verticalmente sobre la energía de dos electrones capturados en ellos. En la figura 3.10 se presenta la variación de la energía renormalizada para dos electrones confinados en anillos cuánticos acoplados verticalmente (anillo inferior uniforme y anillo superior no uniforme) como una función del flujo magnético a través de los anillos. En este caso el análisis de las oscilaciones AB en estas estructuras es más complicado que en el caso de un solo electrón, debido a la superposición de varios factores que definen la correlación electrón-electrón, tales como la separación entre ellos, la dimensionalidad y la geometría de la estructura.

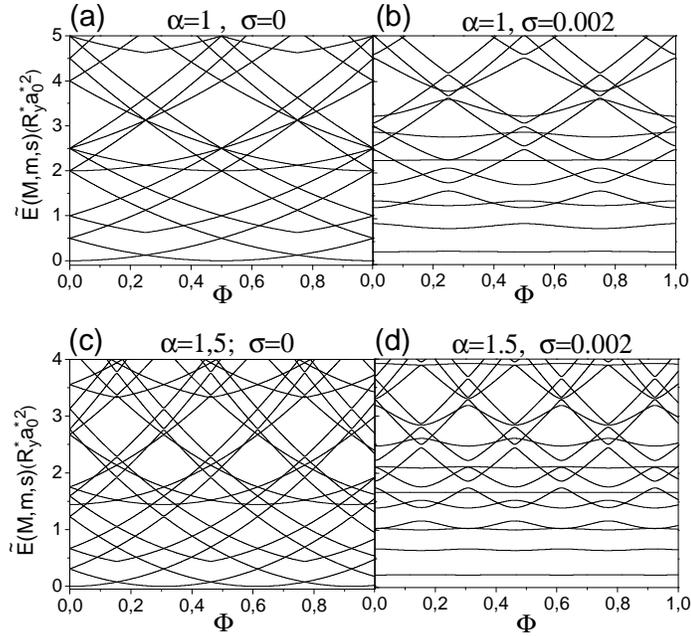


Fig. 3.10. Energías renormalizadas (niveles más bajos) en unidades de $(R_y^* a_0^*)^2$ de dos electrones en función del flujo magnético en VCQRs en donde uno de los anillos presenta un defecto estructural. Se han considerado variaciones de homogeneidad (σ) de 0 a 0.2 para anillos con un mismo radio ($\alpha=1$) y con radios diferentes ($\alpha=1.5$). Otros parámetros de los anillos son $R=20a_0^*$, $w=1a_0^*$, $h=0.2a_0^*$, $\beta=0.1$.

De la anterior figura se muestra la variación de los niveles más bajos de energía respecto al flujo magnético para el caso de dos anillos con geometría idéntica ($\alpha=1$) y para el caso en que el anillo superior (no uniforme) tiene un radio 50% mayor ($\alpha=1.5$) que el anillo inferior (uniforme). Comparando las figuras 3.9 y 3.10 se observan muchas más intersecciones de las curvas de energía en el caso de dos anillos acoplados que en el caso de un solo anillo, independientemente de las diferencias entre las dimensiones de los anillos. Sin embargo, el efecto de la no uniformidad en el grosor de uno de los anillos sobre las oscilaciones AB es similar en las dos situaciones consideradas en estas dos gráficas. El apagamiento de las oscilaciones AB se hace más pronunciado a medida que aumenta el parámetro σ de 0 a 0.002, conduciendo a la aparición de un mayor número de estados localizados. Este apreciable número de estados localizados evidencia una notable sensibilidad de la energía del sistema ante mínimas variaciones del grosor de los anillos. Este efecto no se manifiesta de forma tan significativa para variaciones del ancho o de la sección transversal, las cuales se analizaron en la sección 3.2.

Por último, en la Figura 3.11 se muestra la dependencia de las energías con el radio del anillo inferior (uniforme) en ausencia de campo magnético (a, b) y con un campo magnético fuerte (c, d) con el anillo superior uniforme (a, c) y no uniforme (b, d).

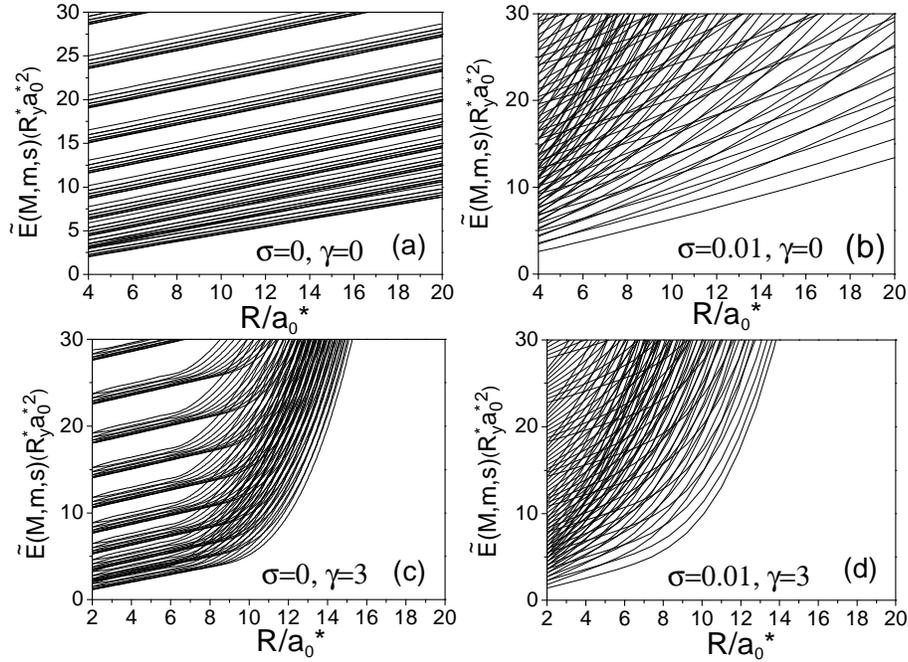


Fig. 3.11. Energías renormalizadas en unidades de $(R_y^* a_0^*)^2$ de dos electrones en función del radio de los anillos acoplados verticalmente, sin campo magnético (a,b) y con un campo magnético fuerte $\gamma = 3$, $B \approx 25T$ (c, d). Otros parámetros de los anillos son $\alpha = 4$, $\beta = 0.1$, $h = 0.01a_0^*$, $w = 0.1a_0^*$.

Cuando los radios de los dos anillos son muy diferentes ($\alpha = 4$), las distancias promedio entre los electrones son grandes y la estructura típica corresponde a un cristal de Wigner y por esta razón los electrones están fuertemente localizados. La energía de repulsión electrostática es dominante y por lo tanto, la dependencia de la energía normalizada total con el radio R es casi lineal. Se puede ver en la anterior figura que para el caso de campo magnético cero las energías de los dos electrones en anillos uniformes (figura 3.11a) forman bandas de subniveles con igual pendiente respecto al radio R , mientras que cuando uno de los anillos no es uniforme (figura 3.11b), aparecen dos grupos de líneas con pendientes diferentes que proporcionan muchos cruces entre ellas. Como se había visto en el capítulo 2 para el caso del cráter, un aumento de la pendiente del cráter proporcionaba un aumento en la separación de los subniveles de energía y una disminución en la separación de cada grupo de subniveles, presentándose una superposición entre ellos y por lo tanto cruces entre las curvas de energía. En el caso presentado en la figura 3.11 un efecto similar produce el campo magnético externo, que añade a la energía renormalizada del sistema el término diamagnético, proporcional a R^4 dando como resultado un aumento abrupto de la energía para radios grandes y modificando la energía potencial resultante haciéndola parecida a un cráter. Esto es en nuestra opinión una explicación de la modificación de las curvas energéticas que se observan bajo influencia de campo magnético (figura 3.11c, d) o un defecto estructural (figura 3.11b, d).

3.4. EFECTO DE LA PRESENCIA DE DOS DONADORAS SOBRE LA ENERGÍA DE DOS ELECTRONES EN UN QR

Motivados por las posibilidades de construir sistemas nanoscópicos de dos niveles que puedan utilizarse como parte funcional en dispositivos aplicados a la optoelectrónica, la espintrónica, e incluso a las tecnologías de la información cuántica. Recientemente, se ha propuesto utilizar un sistema ionizado de dos donadoras acopladas (D_2^+) confinado en un punto cuántico [145]. El análisis teórico del sistema D_2^+ en un QD esférico ha demostrado que el confinamiento estructural puede ampliar notablemente la diferencia de energía entre los dos estados electrónicos más bajos y los demás estados excitados, lo que favorece la identificación del sistema de cuasi-dos niveles requerido para los propósitos de computación cuántica [146]. En este sentido se puede esperar que un QR con uno o dos electrones capturados y en presencia de un sistema de dos impurezas será un mejor candidato para este fin que un QD esférico, por el hecho de que las brechas entre los niveles de energía más bajos en el QR son mayores y la localización de los electrones es más fuerte. Además, un campo magnético externo aplicado a lo largo del eje de simetría da una posibilidad adicional para controlar las propiedades de los estados moleculares debido a la notable influencia que puede llegar a tener sobre el espectro energético del sistema. Motivados entonces por la posibilidad de que un sistema de dos donadoras ionizadas pueda tener un papel importante en el desarrollo de nanotecnología, hemos desarrollado un estudio teórico de las propiedades moleculares de un sistema conformado por dos donadoras ionizadas fijas y dos electrones confinados en un QR toroidal, este sistema es el equivalente artificial a una molécula de hidrógeno, por lo que lo denominaremos “*molécula artificial de hidrógeno - H₂*”. Además, el estudio del comportamiento cuántico del este sistema puede servir de base para entender mejor algunas de las propiedades de sistemas bi-excitónicos, confinados en QRs tipo II, en el caso límite cuando la masa efectiva de los huecos es mucho mayor que la de los electrones.

3.4.1. MODELO ESTRUCTURAL DE UNA MOLÉCULA DE HIDRÓGENO

Con el fin de tener en cuenta el efecto del espesor de un QR, se ha utilizado recientemente la técnica de aproximación adiabática [147, 148] con el fin de calcular los niveles de energía más bajos de un ión (artificial) negativo de hidrógeno en un anillo cuántico estrecho de forma toroidal. En el presente trabajo hemos utilizado un enfoque similar con el fin de estudiar los estados más bajos de energía de una molécula de hidrógeno artificial - H₂, la cual consta de dos donadoras ionizadas ubicados en el eje de simetría del anillo en las posiciones $\vec{a} = (0, 0, \zeta/2)$ y $\vec{b} = -\vec{a} = (0, 0, -\zeta/2)$, respectivamente, y dos electrones aportados por ellas confinados en el interior del anillo. El anillo cuántico tiene una línea central circular cuyo radio R es mucho mayor que el radio de la sección transversal del anillo R_t ($R \gg R_t$). Para este sistema estructural, hemos considerado un modelo simplificado de barrera infinita, en el cual el potencial de confinamiento $\hat{U}_k(\rho, \phi, z)$ es igual a cero en el interior del anillo y a infinito fuera de él. Este modelo de molécula de hidrógeno artificial se esquematiza en la figura 3.12.

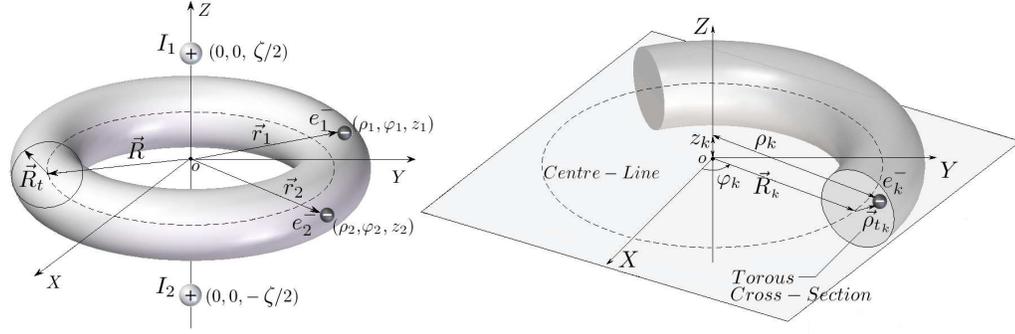


Fig. 3.12. Diagrama esquemático (3D) de una molécula de hidrógeno artificial, compuesta por dos donadoras ionizadas (I_1, I_2) ubicadas sobre el eje Z y dos electrones confinados en el interior del anillo. En la imagen de la derecha se esquematizan las coordenadas para cada electrón, donde $k=1,2$.

3.4.2. HAMILTONIANO PARA LA MOLÉCULA ARTIFICIAL DE HIDRÓGENO

Del mismo modo como se ha trabajado en los anteriores capítulos, el Hamiltoniano adimensional describe la molécula de hidrógeno artificial con un campo magnético homogéneo aplicado en dirección Z, se puede escribir (resumiendo algunos pasos descritos anteriormente) en coordenadas cilíndricas como:

$$\hat{H}^{3D}(\rho_k, \varphi_k, z_k) = \sum_{k=1}^2 \left[-\Delta_k + \frac{\gamma^2 \rho_k^2}{4} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi_k} + \hat{U}_k(\vec{r}_k) - \frac{2}{|\vec{r}_k - \vec{a}|} - \frac{2}{|\vec{r}_k - \vec{b}|} \right] + \hat{U}_{ee} + \hat{U}_{ii} \quad (3.71)$$

Aquí, $\hat{U}_k(\vec{r}_k)$ es el potencial de confinamiento adimensional para cada electrón y \hat{U}_{ii} es el potencial adimensional de interacción coulombiana ión-ión, \hat{U}_{ee} el de interacción coulombiana electrón-electrón, definidos de la siguiente forma: $\hat{U}_{ee} = 2/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$; $\hat{U}_{ii} = 2/|\vec{a} - \vec{b}|$. Los términos $-2/|\vec{r}_k - \vec{a}|$ y $-2/|\vec{r}_k - \vec{b}|$ en el Hamiltoniano (3.71) son los potenciales de interacción electrón-ión. Donde $\vec{r}_k = \vec{\rho}_k + \vec{z}_k$; $k=1,2$, son los vectores posición de los electrones medidos respecto al origen de coordenadas el cual se localiza en el centro de simetría del anillo

Para desacoplar el movimiento rápido en dirección radial del movimiento lento de rotación alrededor del eje Z es necesario realizar las siguientes transformaciones de coordenadas sobre cada una de las componentes de los vectores posición de los dos electrones: $\rho_k = R_k + x_k$; $x_k = \tilde{\rho}_k \cos \varphi_k$; $z_k = \tilde{\rho}_k \sin \varphi_k$; $0 \leq \tilde{\rho}_k \leq R_k$.

Es importante notar que la magnitud de los vectores \vec{R}_k es R ($|\vec{R}_1| = |\vec{R}_2| = R$) tal como se muestra en la figura 3.12. Por lo tanto mediante la aproximación adiabática ($R_k \gg R_t$), es posible obtener una ecuación de onda para el estado base $f_0^{(k)}(\rho_{tk})$, $k=1,2$ y su correspondiente energía E_0 para cada electrón, correspondientes a un pozo circular finito de radio R_t . Posteriormente, con el fin de encontrar los niveles de energía más bajos, se resuelve la ecuación de onda con el correspondiente al Hamiltoniano:

$$\hat{H}_a = -\frac{1}{R^2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} \right) - i\gamma \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right) + \frac{\gamma^2}{4} \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle + 2E_0 + \frac{2}{\zeta} + \hat{U}_{ei} + \hat{U}_{eff}(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (3.72)$$

donde,

$$\hat{U}_{eff}(\varphi) = \left\langle f_0^{(1)} f_0^{(2)} \left| \frac{2}{\sqrt{|\vec{r}_{i1} - \vec{r}_{i2}|^2 + 4R^2 \sin^2(\varphi/2)}} \right| f_0^{(1)} f_0^{(2)} \right\rangle \quad (3.73a)$$

$$\hat{U}_{ei} = -2 \left\langle f_0^{(k)} \left| \hat{U}_+(\rho_{ik}, \varphi_{ik}) + \hat{U}_-(\rho_{ik}, \varphi_{ik}) \right| f_0^{(k)} \right\rangle; \quad k=1,2 \quad (3.73b)$$

$$\hat{U}_{\pm}(\rho_{ik}, \varphi_{ik}) = \frac{1}{\sqrt{(\rho_{ik} \sin \varphi_{ik} \pm \zeta/2)^2 + (R + \rho_{ik} \sin^2 \varphi_{ik})^2}}; \quad (3.73c)$$

$$\langle \rho_k^2 \rangle = \left\langle f_0^{(k)} \left| \rho_k^2 \right| f_0^{(k)} \right\rangle; \quad k=1,2 \quad (3.73d)$$

Aquí se ha hecho uso de la coordenada relativa $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$ ya que el potencial efectivo \hat{U}_{eff} y el Hamiltoniano (3.71) dependen únicamente de la diferencia de las coordenadas angulares. Esto permite que la ecuación de onda correspondiente se pueda separar mediante el uso de las coordenadas relativa (φ) y del centro de la masa $\vartheta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$, lo que indica que el Hamiltoniano para las dos partículas pueda reescribirse como la suma de los términos relativo $\hat{H}_r(\varphi)$ y del centro de masa $\hat{H}_{cm}(\vartheta)$:

$$\hat{H}_a = \hat{H}_{cm}(\vartheta) + \hat{H}_{\varphi}(\varphi) + 2E_0 + \frac{2}{\zeta} + \hat{U}_{ei} \quad (3.74a)$$

$$\hat{H}_{cm}(\vartheta) = -\frac{1}{2R^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle \quad (3.74b)$$

$$\hat{H}_r(\varphi) = -\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \hat{U}_{eff}(\varphi) \quad (3.74c)$$

3.4.3. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER DE LA MOLÉCULA DE HIDROGÉNO

La respectiva ecuación de autovalores para el Hamiltoniano (3.74), es separable en coordenadas relativa y del centro de masa, por lo que puede expresarse de la siguiente manera:

$$\hat{H}_a \Psi(\varphi_1, \varphi_2) = E(M, m, s) \Psi(\varphi_1, \varphi_2); \quad (3.75)$$

$$\Psi(\varphi_1, \varphi_2) = e^{iM\vartheta} \psi_{m,s}(\varphi); \quad M, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \quad s = 0, 1 \quad (3.76)$$

En la anterior expresión se tiene que $e^{iM\vartheta}$ es la solución de la ecuación de onda asociada al Hamiltoniano en la coordenada del centro de masa \hat{H}_{cm} , con autovalores de energía $E_{cm}(M) = M^2/2R^2 + M\gamma + \gamma^2 R^2 \langle \rho_1^2 + \rho_2^2 \rangle / 4$. El factor restante $\psi_{m,s}(\varphi)$ es la solución de la siguiente ecuación diferencial para el movimiento relativo:

$$-\frac{2}{R^2} \frac{d^2 \psi_{m,s}(\varphi)}{d\varphi^2} + \hat{U}_{eff}(\varphi) \psi_{m,s}(\varphi) = E_r(m, s) \psi_{m,s}(\varphi) \quad (3.77)$$

y satisface las condiciones periódicas de frontera:

$$\psi_{m,s}(-\varphi) = (-1)^s \psi_{m,s}(\varphi); \quad \psi_{m,s}(\varphi) (-1)^M = \psi_{m,s}(\varphi \pm 2\pi); \quad (3.78)$$

con autovalores de energía $E_r(m, s)$. Entonces la energía total de la molécula de hidrógeno artificial corresponde a la expresión

$E(M, m, s) = E_{cm}(M) + E_r(m, s) + \hat{U}_{ei} + 2/\zeta$. En nuestro trabajo numérico para este problema no se ha visto la necesidad de mostrar los cálculos realizados en la solución de la ecuación diferencial (3.77) con condiciones periódicas de frontera (3.78), debido a que se ha trabajado dentro del marco del método de Fourier-Galerkin, estudiado a lo largo de esta tesis.

3.4.4. EFECTO DEL TAMAÑO DEL ANILLO Y DE LA POSICIÓN DE LAS DONADORAS

Teniendo en cuenta la misma notación de números cuánticos M , m y s , definidos en la sección 3.2.3, se realiza una comparación entre los cálculos numéricos para las energías renormalizadas $\tilde{E} = E(M, m, s)R^2$, obtenidos en este trabajo, con los reportados en las referencias [92, 148] para dos electrones en un QR unidimensional, se presentan en la tabla 3.2.

Tab. 3.2. Algunos niveles de energías renormalizada en unidades de $(R_i^*(a_0^*))^2$ de la molécula de hidrógeno para dos radios diferentes de la línea central del anillo R , diferentes distancias de separación entre iones ζ y en ausencia de campo magnético externo. El valor del radio de la sección transversal se tomó $R_i = 0.001a_0^*$, con el fin de que el anillo fuera casi unidimensional y así poder comparar con los resultados de la ref. [148] para cuando la separación entre iones es muy grande.

(M, m, s)	$R = 1a_0^*$					$R = 4a_0^*$				
	$\tilde{E}[148]$	Molécula artificial				$\tilde{E}[148]$	Molécula artificial			
		$\zeta = 100$	$\zeta = 20$	$\zeta = 1$	$\zeta = 0.1$		$\zeta = 100$	$\zeta = 20$	$\zeta = 1$	$\zeta = 0.1$
(0,0,0)	1.72	1.65	-0.79	-3.44	13.72	5.18	4.96	-9.11	5.43	293.19
(1,1,1)	2.23	2.16	-0.31	-2.92	14.24	5.68	5.46	-8.61	5.93	293.68
(0,2,1)	3.61	3.53	1.09	-1.54	15.63	7.92	7.69	-6.38	8.16	295.91
(2,0,0)	3.72	3.66	1.19	-1.44	15.72	7.18	6.96	-7.11	7.43	295.18

Como la separación entre los iones positivos se incrementa de $\zeta = 0.1a_0^*$ a $\zeta = 100a_0^*$ y el radio de la sección transversal del anillo tiende a cero ($R_i = 0.001a_0^*$), las contribuciones de las interacciones ión-ión y electrón-ión llegan a ser muy pequeñas y por lo tanto, las energías de la molécula artificial de hidrógeno mostradas en la tabla 3.2, sucesivamente tienden a los valores de energía (renormalizada) de dos electrones limitados a moverse en anillo cuántico unidimensional [92, 148]. Esta correcta tendencia de los resultados obtenidos con el modelo propuesto puede ser considerada como una prueba indirecta de la eficacia y la aceptabilidad del procedimiento numérico empleado.

En la figura 3.13, se muestra el resultado del cálculo de la energía del estado base de la molécula artificial de hidrógeno con campo magnético nulo en función de la separación entre los iones y considerando diferentes valores del espesor 3.13a y de los radios 3.13b del QR. A partir de estas curvas se puede observar la similitud entre las curvas de potencial de la actual (real) molécula de hidrógeno (líneas punteadas ref. [149]) y las de la molécula artificial, obtenidas en este trabajo de investigación (líneas continuas). Estos resultados ilustran una amplia gama de posibilidades para modificar la distancia

de equilibrio y la altura de la barrera de la molécula artificial, variando el espesor o el radio de la línea central del anillo.

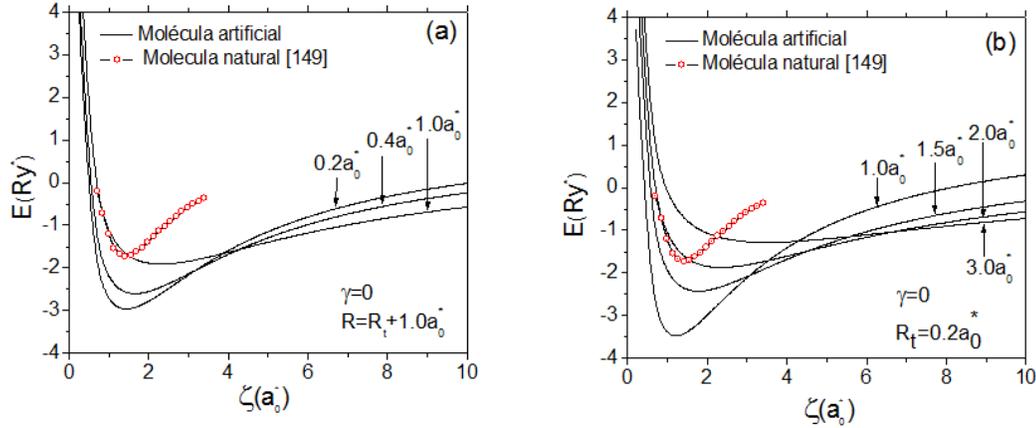


Fig. 3.13. Energía del estado base de una molécula de hidrógeno artificial (en ausencia de campo magnético) en función de la distancia ζ entre los iones, para diferentes grosores del anillo (a) y diferentes radios de la línea central (b). La línea punteada corresponde a la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural.

En la figura 3.13a, se puede observar que las curvas de potencial para la molécula artificial tienen en común un punto de intersección para cuando la separación de los iones es de aproximadamente $4a_0^*$ y la energía de la molécula es aproximadamente $-1.7R_y^*$. Esta particularidad puede estar relacionada con la transformación que sufre la localización de los electrones a medida que la separación de los iones se hace mayor a $4a_0^*$. Para pequeñas distancias de separación entre los iones, la atracción electrón-ión es mayor que la repulsión electrón-electrón, y por lo tanto, los electrones tienen más probabilidad de situarse cerca de la frontera interior del anillo, es decir, los electrones se ubican más cerca de los iones; pero cuando la separación entre los iones es mayor que $4a_0^*$, los electrones se desplazan hacia la frontera exterior de anillo y el orden de las curvas de energía para diferentes anchos del anillo se invierte.

En la figura 3.13b, se puede observar claramente los cruces de las curvas de potencial en diferentes puntos y la inversión del orden de los niveles de energía. Este hecho es una consecuencia de la interacción entre la repulsión y la atracción entre partículas, ya que si la separación entre los iones es muy pequeña, la mayor contribución a la energía de la molécula está dada por la repulsión ion-ion seguida por la atracción electrón-ión, mientras que el más pequeño aporte está dado por la repulsión electrón-electrón. Como la contribución positiva de la interacción ion-ion define el signo de la energía y éste es el mismo para cualquier radio del anillo, entonces el orden de los niveles depende únicamente de los valores relativos de los otros dos tipos de interacción. Los valores absolutos tanto de la atracción electrón-ión y la repulsión electrón-electrón son mayores a medida que el radio de la línea central del anillo se hace más pequeño. Para pequeñas distancias de separación entre los iones, el aporte negativo de la atracción electrón-ión puede ser mayor que el aporte positivo a la energía de la repulsión electrón-electrón, y por lo tanto la energía total de la molécula artificial con radio de la línea central más pequeño se hace menor. Por el contrario, para grandes distancias entre los iones, el término asociado a la repulsión es mayor que el asociado a la atracción, y por esta razón, a mayor radio de la línea central se presenta una disminución del valor de la

energía del estado base. Debido a este hecho, las curvas de energía de la figura 3.13b presentan intersecciones e inversión del orden de las energías del estado fundamental para diferentes radios R de la línea central del QR.

En la figura 3.14, se muestran curvas de potencial similares a las expuestas en la figura 3.13. Estas curvas corresponden a algunos de los niveles de energía más bajos de la molécula de hidrógeno artificial, en la cual se ha considerado un radio de la línea central del anillo $R=1a_0^*$ y de la sección transversal $R_t=0.2a_0^*$. Se ve claramente que todas las curvas de potencial presentan un mínimo de profundidad con alturas de la barrera mayores a $3R_y^*$, de aquí que todos estos estados energéticos se vuelven muy estables.

De acuerdo con esta misma figura, se puede observar que el estado fundamental de la molécula artificial es un estado singlete y éste es seguido por el primer estado triplete. Este comportamiento es independiente de la separación ión-ión.

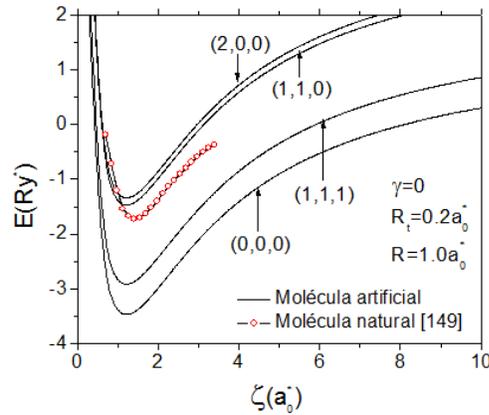


Fig. 3.14. Algunos de los estados más bajos de energía de una molécula de hidrógeno artificial (en ausencia de campo magnético) en función de la distancia ζ entre los iones. La línea punteada corresponde a la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural [149].

3.4.5. EFECTO DE UN CAMPO MAGNÉTICO UNIFORME SOBRE EL ESPECTRO ENERGETICO DE LA ARTIFICIAL

Por último, algunos niveles de energía $E(M, m, s)$ de los dos electrones de la molécula artificial en el QR como una función del campo magnético renormalizado (γR^2) se muestran en la figura 3.15 para un radio de la línea central $R=3a_0^*$, un radio de la sección transversal $R_t=0.2a_0^*$ y dos diferentes separaciones entre los iones $\zeta=0.5a_0^*$ (figura 3.14a) y $\zeta=5a_0^*$ (figura 3.15b). Con el fin de comprender la notable evolución de las curvas de energía que se muestra en la figura 3.15, se debe tener en cuenta que estas curvas son el resultado de la fuerte competencia entre dos pares de términos presentes en el Hamiltoniano (3.71). El primer par corresponde a los términos del potencial de atracción y de repulsión, y el segundo par corresponde a los términos diamagnético y paramagnético. El primer par de términos permite explicar la razón por la que la energía toma valores positivos o negativos. Por ejemplo, si la separación entre los iones es menor que $\zeta=0.5a_0^*$, la contribución del término de repulsión ión-ión es predominante y la energía total toma valores positivos (figura 3.15a), pero si esta separación es mayor que $\zeta=5a_0^*$, entonces el término atractivo electrón-ión se hace más significativo y la energía total mínima toma valores negativos (Figura 3.15b).

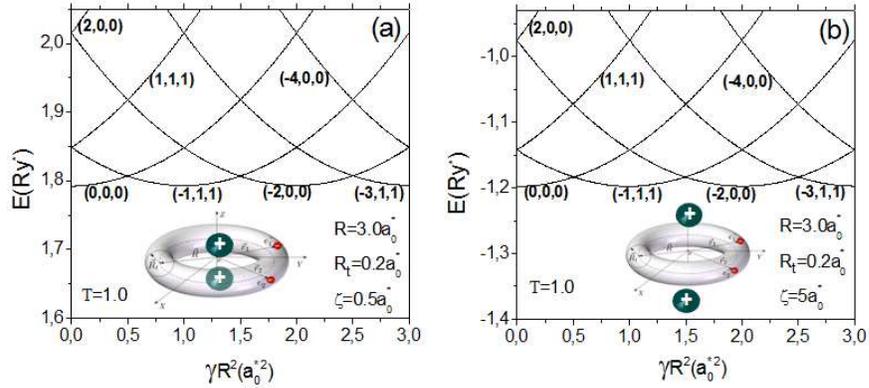


Fig. 3.15. Estados más bajos de energía de una molécula de hidrógeno artificial en función del campo magnético renormalizado (γR^2) en un anillo cuántico toroidal con separación entre iones $\zeta = 0.5a_0^*$ (a) y $\zeta = 5a_0^*$ (b). El radio de la línea central y de la sección transversal son los mismos en las dos gráficas y equivalen a $R = 3a_0^*$ y $R_t = 0.2a_0^*$, respectivamente.

La presencia del campo magnético en el segundo par de términos en el Hamiltoniano (3.71) permite explicar dos aspectos importantes del comportamiento de la energía respecto al campo magnético: Por un lado, el término paramagnético varía linealmente con el campo magnético y el momento angular M , este término es el responsable de la división de los niveles de energía, cuyo momento angular M tiene signos diferentes. Por otro lado, y de acuerdo a la figura 3.15, se puede observar un comportamiento oscilatorio de la energía del estado fundamental del complejo molecular, con un periodo (renormalizado) de oscilación $T = \gamma R^2 = 1$ que se mantiene constante para cualquier valor del radio de la línea central del anillo. Este resultado corresponde a las mencionadas oscilaciones AB, las cuales se presentan para la energía de la molécula artificial debido a que se ha considerado el radio de la sección transversal muy pequeño, es decir, se ha considerado un anillo cuántico muy estrecho.

Capítulo 4

EXCITONES NEUTRO Y CARGADO POSITIVAMENTE EN UN ANILLO CUÁNTICO

El estudio de las propiedades experimentales del par electrón-hueco en materiales semiconductores en bloque, entraña una gran dificultad porque son muy inestables frente a la disociación, lo cual se debe a que tienen las energías de enlace muy pequeñas y los tiempos de vida muy cortos. No obstante, con el advenimiento de los sistemas de baja dimensionalidad esta dificultad se ha podido superar, gracias a que en condiciones de fuerte confinamiento, la energía de enlace se incrementa fuertemente como consecuencia de un mayor acercamiento entre el electrón y el hueco, lo cual conduce a que el tiempo de vida de este sistema aumente bruscamente.

Este particular sistema electrón-hueco, denominado excitón neutro, goza de mayor atención en lo que se refiere al estudio de nanoestructuras con simetría anular. Es un hecho que la existencia de las oscilaciones AB de excitones neutros en QRs tipo I (esto es, cuando ambas partículas están confinadas en el anillo) sigue siendo actualmente, motivo de controversia. Esto se debe a que algunos trabajos predicen que las oscilaciones AB pueden ser muy débiles o incluso pueden no aparecer para un excitón en un anillo de ancho finito [150,151].

Motivados por recientes experimentos de luminiscencia en anillos semiconductores, nosotros estudiamos teóricamente los estados cuantizados de un excitón neutro y un excitón cargado positivamente (trión- X^+) confinado en un anillo [152]. Se sabe experimentalmente que estos complejos pueden existir en nanoestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad en estado estable incluso a temperatura ambiente [153]. Sin embargo un trión confinado en un QR representa un sistema del que poco se sabe, debido a que los problemas de tres cuerpos son muy difíciles de resolver en un espacio 3D no homogéneo, incluso numéricamente. No obstante, con el fin de evaluar el dominio experimental de los parámetros relevantes en el análisis de triones en QRs, hemos adoptado un modelo simple de anillo estrecho. Las ecuaciones de onda 3D para los excitones neutros y cargados positivamente se pueden separar y reducir a una ecuación 1D más simple que describe una rotación circular de las partículas con interacciones renormalizadas entre ellas. En este capítulo se muestra de forma general y resumida este procedimiento dentro del marco del método de Fourier.

Para el estudio del excitón neutro y del excitón cargado positivamente hemos adoptado un modelo simple de un anillo estrecho, en el que su altura Δh y anchura w son mucho menores que el radio de su línea central $R_c = R$.

Para este sistema hemos considerado un modelo simplificado de barrera infinita, en el cual el potencial de confinamiento es igual a cero en el interior del anillo y a infinito fuera de él.

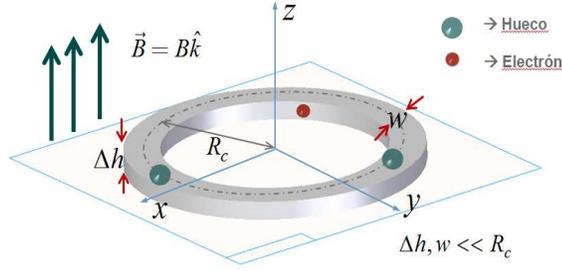


Fig. 4.1. Diagrama esquemático de un excitón cargado positivamente en un QR de ancho w , altura Δh y radio de la línea central $R_c = R$

4.1. HAMILTONIANO GENERALIZADO PARA UN EXCITÓN EN UN QR

Dentro del marco de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano para diferentes tipos de complejos excitónicos en un QR en presencia de un campo magnético uniforme orientado a lo largo del eje Z perpendicular al plano del anillo ($\vec{B} = B\hat{k}$), puede ser representado como:

$$H = \sum_i \left[\frac{1}{2m_i} \left(\vec{p}_i - \frac{q_i}{c} \vec{A}_i \right)^2 + V_i(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{q_i q_j}{\epsilon |\vec{r}_i - \vec{r}_j|}, \quad (4.1)$$

Aquí \vec{r}_i es el vector posición de cada partícula, m_i , q_i , ϵ , $\vec{p}_i = -i\hbar\nabla_i$ son la masa efectiva $m_i = m_e$ para el electrón y $m_i = m_h$ para el hueco, la carga ($\pm e$), la permitividad eléctrica del material y el operador de momento lineal, respectivamente, para la i -ésima partícula ($i = 1, \dots, n$), siendo n el número total de partículas. Escogiendo el gauge para el potencial vector de cada partícula como $\vec{A}_i = (\vec{B} \times \vec{r}_i)/2$, haciendo uso de los parámetros efectivos para el excitón (definidos en el capítulo 2) y teniendo en cuenta el carácter casi 1D del movimiento de cada partícula, el Hamiltoniano (4.1) puede ser reducido a la siguiente forma adimensional:

$$H = \sum_i H_i + \sum_{i \neq j} \frac{s_i s_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (4.2)$$

Aquí $s_i = 1$ para el hueco $s_i = -1$ para el electrón. El Hamiltoniano uni-particular en la expresión (4.2) en coordenadas cilíndricas y en el límite adiabático puede ser escrito como:

$$H_i = H_{fast}^{(i)} + H_{slow}^{(i)};$$

$$H_{fast}^{(i)} = \frac{1}{\mu_i} \left[-\frac{\partial^2}{\partial z_i^2} - \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial}{\partial \rho_i} \rho_i \frac{\partial}{\partial \rho_i} + \frac{\gamma^2 \rho_i^2}{4} \right] + V_i(\rho_i, z_i); \quad (4.3)$$

$$H_{slow}^{(i)} = \frac{1}{\mu_i} \left[-\frac{1}{\rho_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_i^2} + i\gamma s_i \frac{\partial}{\partial \vartheta_i} \right]$$

En la expresión (4.3) las funciones $V_i(\rho_i, z_i)$ son potenciales de confinamiento para las correspondientes partículas y $\mu_i = \mu/m_i$ siendo $\mu = m_e m_h / (m_e + m_h)$ la masa reducida del sistema.

La forma general del Hamiltoniano (4.3) que describe simultáneamente los excitones neutros y cargados (triones) en anillos muy delgados (cuando el grosor de la capa Δh y el ancho del anillo w son ambos mucho menores que el radio \bar{R}) puede ser simplificada a la siguiente expresión:

$$H(\eta) \approx (2 + \eta) \left(\frac{\pi^2}{h^2} + \frac{\pi^2}{w^2} \right) - \frac{1}{I_h} \left(\frac{\partial^2}{\partial \vartheta_{h1}^2} + \eta \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_{h1}^2} \right) - \frac{1}{I_e} \frac{\partial^2}{\partial \vartheta_e^2} + \frac{\gamma^2 \bar{R}^2}{4} \left(\frac{1 + \eta}{\mu_h} + \frac{1}{\mu_e} \right) + \quad (4.4)$$

$$+ i \frac{\gamma}{\mu_h} \left(\frac{\partial}{\partial \vartheta_{h1}} + \eta \frac{\partial}{\partial \vartheta_{h2}} \right) - i \frac{\gamma}{\mu_e} \frac{\partial}{\partial \vartheta_e} + \eta V_c(\vartheta_{h1} - \vartheta_{h2}) - V_c(\vartheta_{h1} - \vartheta_e) - \eta V_c(\vartheta_{h2} - \vartheta_e)$$

Aquí el caso $\eta = 0$ corresponde al excitón neutro y $\eta = 1$ al trión X^+ , además se utilizaron las notaciones:

$$\bar{R}^2 \approx R^2 + w^2/12,$$

$$V_c(\vartheta_{h1} - \vartheta_{h2}) \approx 2\sqrt{w^2/4 + \bar{R}^2} \sin^2(\vartheta_{h1} - \vartheta_{h2})/2, \quad (4.5)$$

$$I_i \approx \mu_i \bar{R}^2; \quad i = e, h;$$

El Hamiltoniano correspondiente para los triones X^- se obtiene al remplazar en la expresión (4.4) los subíndices $e, h1$ y $h2$ por $h, e1$ y $e2$ respectivamente.

4.2. MÉTODO DE FOURIER PARA LOS COMPLEJOS EXCITÓNICOS

El Hamiltoniano (4.4), el cual describe de forma general los complejos X y X^+ para $\eta = 0$ y $\eta = 1$, respectivamente, puede ser parcialmente separado usando coordenadas relativas y del centro de masa como:

$$\Theta = [I_h(\vartheta_{h1} + \eta\vartheta_{h2}) + I_e\vartheta_e]/I; \quad \vartheta_1 = \vartheta_{h1} - \vartheta_e; \quad \vartheta_2 = \vartheta_{h2} - \vartheta_e; \quad I = (1 + \eta)I_h + I_e \quad (4.6)$$

Aprovechando la simetría azimutal del sistema, las autofunciones del Hamiltoniano (4.4) se encuentran de la forma:

$$H(\eta)\Psi(\Theta, \vartheta_1, \vartheta_2, \eta) = E(\eta)\Psi(\Theta, \vartheta_1, \vartheta_2, \eta); \quad \Psi(\Theta, \vartheta_1, \vartheta_2, \eta) = e^{iM\Theta}\Phi(\vartheta_1, \eta\vartheta_2) \quad (4.7)$$

siendo $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ el momentum angular correspondiente a la rotación del centro de masa y $E(\eta)$ la energía del complejo excitónico.

En la anterior expresión la parte relativa $\Phi(\vartheta_1, \eta\vartheta_2)$ de la función de onda satisface la ecuación:

$$-\frac{1}{I_\mu} \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_1^2} + \eta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_2^2} \right) + i\gamma \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta_1} + \eta \frac{\partial \Phi}{\partial \vartheta_2} \right) - \frac{2\eta}{I_e} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vartheta_1 \partial \vartheta_2} + V_{Coul}(\vartheta_1, \vartheta_2) \Phi = (E - E_0) \Phi; \quad (4.8)$$

$$E_0(\eta) = (2 + \eta) \left(\frac{\pi^2}{h^2} + \frac{\pi^2}{w^2} \right) + \frac{M^2}{I} + \frac{\gamma^2 \bar{R}^2}{4} \left(\frac{1 + \eta}{\mu_h} + \frac{1}{\mu_e} \right) - \gamma M \frac{(1 + \eta) I_h m_e - I_e m_h}{[(1 + \eta) I_h + I_e] (m_h + m_e)} \quad (4.9)$$

Aquí se han utilizado las notaciones:

$$V_{Coul}(\vartheta_1, \vartheta_2) = \eta V_c(\vartheta_1 - \vartheta_2) - V_c(\vartheta_1) - \eta V_c(\vartheta_2); \quad (4.10)$$

$$I_\mu = I_h I_e / (I_h + I_e)$$

para la energía de interacción Coulombiana y el momento de inercia reducido electrón-hueco, respectivamente.

En nuestros cálculos numéricos, nosotros hemos solucionado (4.8) mediante el método de Fourier. Para el caso del excitón neutro se realiza una expansión simple en series de Fourier y doble para el del excitón cargado positivamente. A continuación presentemos las formulas correspondientes por separado.

Excitón neutro

En el caso del excitón neutro cuando $\eta = 0$ la función de onda en la ecuación (4.8) depende solamente de una variable $\Phi = \Phi(\vartheta_1)$ la cual se busca en forma de una-serie de Fourier simple (truncada):

$$\Phi(\vartheta_1) = \sum_{m=-N}^N c_m e^{im\vartheta_1}; \quad V_C(\vartheta_1) = \sum_{m=-N}^N v_m e^{im\vartheta_1}; \quad (4.11)$$

N es un número grande correspondiente a la cantidad de armónicos que se conserva. La sustitución de las expansiones (4.11) en la ecuación (4.8) nos permite obtener el siguiente sistema lineal de ecuaciones algebraicas respecto los coeficientes desconocidos c_n :

$$\sum_{n=1}^{N_f} [(E - E_0) \delta_{n,n'} + A_{n,n'}] c_{n'} = 0; \quad N_f = 2N + 1; \quad (4.12)$$

donde

$$m, m' = -N, -N + 1, \dots, 0, \dots, N - 1, N$$

$$n = m + N + 1; \quad n' = m' + N + 1;$$

$$A_{n,n'} = \left(\frac{m}{I_\mu} + \gamma m \right) \delta_{n,n'} + 2v_{m-m'}$$

$$v_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} V_C(\vartheta_1) e^{im\vartheta_1} d\vartheta_1$$

(4.13)

y E_0 corresponde a la expresión (4.9) para cuando $\eta = 0$.

$$E_0(0) = 2 \left(\frac{\pi^2}{h^2} + \frac{\pi^2}{w^2} \right) + \frac{M^2}{I} + \frac{\gamma^2 \bar{R}^2}{4} \left(\frac{1}{\mu_h} + \frac{1}{\mu_e} \right) - \gamma M \frac{I_h m_e - I_e m_h}{[I_h + I_e] (m_h + m_e)} \quad (4.14)$$

Excitón cargado positivamente

Siguiendo el método de Fourier, nosotros buscamos una solución de la ecuación (4.8) para el caso del excitón cargado positivamente ($\eta=1$) en forma de doble-series de Fourier:

$$\Phi(\vartheta_1, \vartheta_2) = \sum_{m_2=-N}^N \sum_{m_1=-N}^N c_{m_1, m_2} e^{im_1 \vartheta_1} e^{im_2 \vartheta_2}; \quad V_C(\vartheta_p) = \sum_{m_p=-N}^N v_{m_p} e^{im_p \vartheta_p}; \quad (4.15)$$

$$\vartheta_p = \vartheta_1, \vartheta_2, \text{ y } \vartheta_1 - \vartheta_2; \quad m_p = m_1, m_2, \text{ y } m_1 - m_2$$

El método de Fourier estándar permite reducir la ecuación (4.8) al siguiente sistema lineal de ecuaciones algebraicas:

$$\sum_{n=1}^{N_f} [(E - E_0) \delta_{n, n'} + A_{n, n'}] c_{n'} = 0; \quad N_f = (2N + 1)^2; \quad (4.16)$$

donde

$$n = (m_2 + N)(2N + 1) + m_1 + N + 1;$$

$$n' = (m_2' + N)(2N + 1) + m_1' + N + 1;$$

$$m_1, m_2, m_1', m_2' = -N, -N + 1, \dots, 0, \dots, N - 1, N \quad (4.17)$$

$$A_{n, n'} = \left(\frac{m_1^2 + m_2^2}{I_\mu} + \gamma(m_1 + m_2) \right) \delta_{n, n'} + v_{m_1 - m_2 + m_2' - m_1'} \delta_{m_1 + m_2, m_2' + m_1'} - v_{m_1 - m_1'} \delta_{m_2, m_2'} - v_{m_2 - m_2'} \delta_{m_1, m_1'}$$

$$v_m = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} V_C(\vartheta) e^{im\vartheta} d\vartheta$$

y E_0 corresponde a la expresión (4.9) para cuando $\eta=1$:

$$E_0(1) = 3 \left(\frac{\pi^2}{h^2} + \frac{\pi^2}{w^2} \right) + \frac{M^2}{I} + \frac{\gamma^2 \bar{R}^2}{4} \left(\frac{2}{\mu_h} + \frac{1}{\mu_e} \right) - \gamma M \frac{2I_h m_e - I_e m_h}{[2I_h + I_e](m_h + m_e)} \quad (5.18)$$

4.3. ESPECTRO ENERGÉTICO DE LOS COMPLEJOS EXCITÓNICOS

En nuestro procedimiento numérico hemos calculado los valores de energías más bajas de un excitón neutro ($\eta=0$) confinado en QR con diferentes parámetros geométricos y en presencia de un campo magnético uniforme γ aplicado en la dirección de crecimiento del anillo.

Al analizar las propiedades electrónicas de los complejos excitónicos es conveniente comparar sus características con las correspondientes a los átomos y las moléculas naturales: con el átomo de hidrogeno en el caso del excitón neutro y con el ión de la molécula de hidrogeno en el caso del excitón positivamente cargado. Los análogos atómicos y moleculares pueden considerarse como casos limites de los complejos excitónicos cuando la razón entre la masa del electrón y del hueco tiende a cero. En este límite los complejos excitónicos se hacen más estables y las energías de enlace se incrementan, mientras que las brechas entre los niveles crecen. Por este motivo es interesante analizar el efecto de la variación de esta razón entre las masas sobre el espectro energético de los complejos moleculares. Teniendo en cuenta este acontecimiento utilizaremos a continuación un nuevo parámetro definido como $\tau = m_e/m_h$ el cual puede variarse entre cero y uno, cero corresponde a los análogos atómicos y moleculares (mayor estabilidad) y uno (menor estabilidad) al caso cuando las masas de los portadores de carga se hacen casi iguales. En la figura 4.2 se muestran

las curvas de energía del excitón neutro en función del campo magnético para un radio del anillo $\bar{R}=5a_0^*$ y $10a_0^*$, altura $\Delta h=0.2a_0^*$ y ancho $w=0.2a_0^*$ y para el caso cuando el parámetro τ es igual a 0.2, correspondiente aproximadamente al del compuesto InAs/GaAs. En esta figura se observa que para los dos casos los niveles de energía se dividen en dos grupos con diferente respuesta frente al campo magnético externo: el primer grupo son los niveles más bajos, que permanecen invariantes respecto la variación del campo magnético y el otro son los niveles superiores, muy sensibles al campo magnético presentando muchos cruces y un reordenamiento de los niveles.

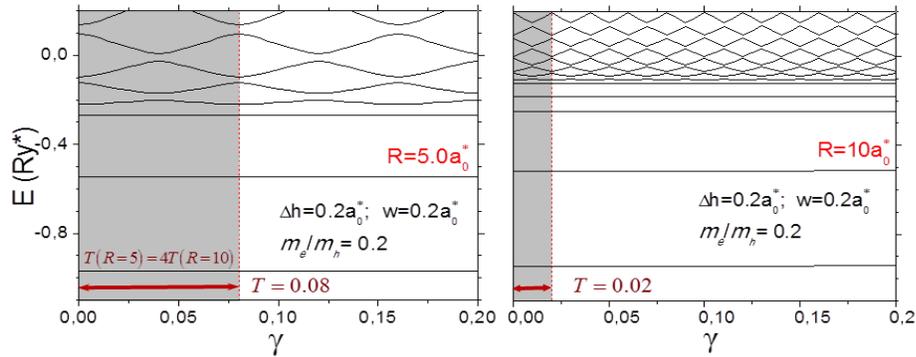


Fig. 4.2. Niveles más bajos de energía de un excitón neutro X en función del campo magnético

En el primer grupo la atracción electrostática es dominante y tanto el electrón como el hueco oscilan alrededor de su centro de masa en un estado ligado, por lo que se observan estados localizados respecto a la rotación relativa, que no produce ni momentos angulares ni magnéticos, mientras que en el segundo grupo domina la energía cinética y el sistema se comporta como un conjunto de rotores independientes cada uno con su momento angular y magnético individual. La comparación de las curvas para los dos diferentes radios muestra que el incremento del radio conlleva a una subida leve de niveles de ambos grupos, acompañada de un incremento del número de estados localizados. Esto es debido al hecho de que la energía resultante de los dos componentes: la electrostática (negativa y proporcional a R^{-1}) y la energía cinética (positiva y proporcional a R^{-2}) crece levemente a medida que el radio aumenta. Por otro lado al aumentar el radio, el rol de la energía cinética (que destruye los estados oscilatorios transformándolos en los estados rotacionales) disminuye, aumentando entonces el número de los estados localizados.

En la figura 4.3 presentamos dependencias similares de los niveles de energía del campo magnético para un excitón cargado positivamente, X^+ (triión), en un QR con parámetros geométricos $R=5a_0^*$, $\Delta h=0.2a_0^*$ y $w=0.2a_0^*$ para dos diferentes valores de la razón entre las masas electrón-hueco $\tau=0.01$ y 1.0. En el primer caso el espectro de energía es similar al de la molécula de hidrógeno ionizada con un movimiento de rotación del centro de masa muy lento debido a que la masa del hueco es mucho mayor que la masa del electrón. Por lo tanto la densidad de los niveles de energía en la gráfica del lado izquierdo es significativamente mayor que en la del lado derecho de la figura 4.3.

En estas curvas se observan dependencias similares a las oscilaciones AB en un anillo 1D con defectos en el primer caso y en un anillo 1D casi perfecto en el segundo. La diferencia entre estos dos casos se debe a la competencia entre los movimientos de CM

y relativo, en el primer caso el mayor aporte en la energía lo da el movimiento relativo con un potencial no uniforme alrededor el hueco localizado, mientras que en el segundo el movimiento de CM libre es dominante.

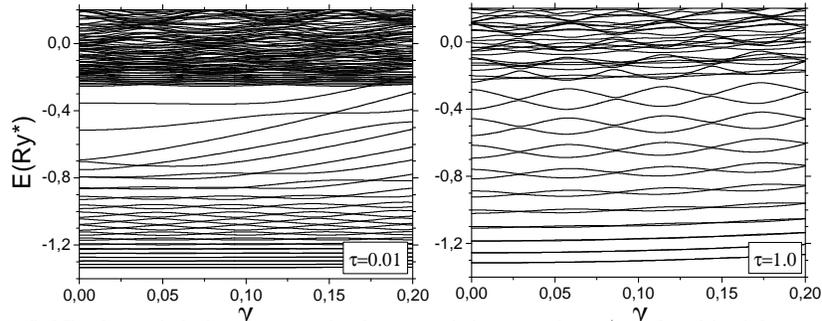


Fig. 4.3. Niveles más bajos de energía de un excitón cargado X^+ en función del campo magnético

Con el propósito de demostrar la fuerte dependencia de la estructura del espectro energético del trión X^+ de la razón de las masas electrón-hueco presentamos en la figura 4.4 los estados más bajos de energía como función del parámetro τ en ausencia de campo magnético (izquierda) y con un campo magnético uniforme aplicado en la dirección de crecimiento del cristal (derecha). Los parámetros geométricos considerados son $R = 5a_0^*$, $\Delta h = 0.2a_0^*$ y $w = 0.2a_0^*$.

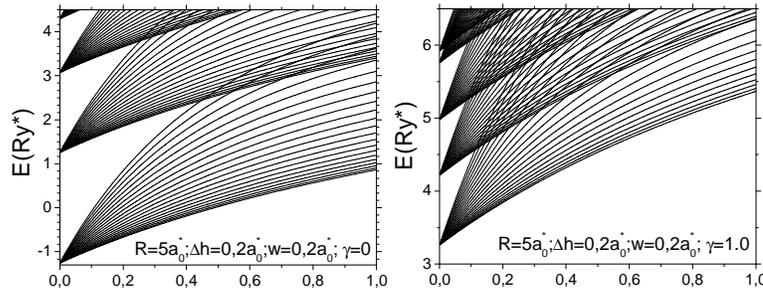


Fig. 4.4. Niveles más bajos de energía de un excitón cargado X^+ en función de la razón de masas electrón-hueco

Se ve que las energías de todos los niveles energéticos en todas las bandas suben significativamente con el crecimiento del parámetro τ debido al crecimiento del aporte de la energía cinética en comparación con la energía potencial.

En conclusión, utilizando el método de series de Fourier, el espectro de energía de los estados más bajos de un excitón neutro X y un excitón cargado positivamente X^+ confinados en un QR estrecho ha sido calculado en función del tamaño del anillo, la magnitud del campo magnético aplicado y la razón entre las masas efectivas electrón-hueco. Se ha revelado en este estudio una fuerte sensibilidad de la estructura del espectro energético frente a todos estos factores.

CONCLUSIONES

El análisis realizado en este trabajo en relación con los sistemas de pocas partículas, confinadas en puntos cuánticos auto-ensamblados con estructura anular y con una morfología no uniforme, estudiados a lo largo de varios capítulos, nos permite establecer algunos aspectos importantes que se resumen en las siguientes conclusiones:

- En primer lugar, en este trabajo se ha presentado una metodología, eficaz y relativamente sencilla, para calcular el espectro energético de sistemas de pocas partículas confinadas en heteroestructuras que presentan simetría axial, en presencia de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento. Haciendo uso de la aproximación adiabática, y basados en el Método de Fourier-Galerkin, hemos reducido el problema general a una ecuación unidimensional para el caso de una, dos y tres partículas confinadas en nanoestructuras axialmente simétricas. Una de las características más atractivas de nuestro método es su universalidad de aplicación a modelos de puntos cuánticos con diferentes tipos de defectos estructurales a partir de una base exacta.
- Se ha realizado el análisis de una partícula en un punto cuántico en forma de cráter tridimensional con una morfología no-uniforme que se aproxima más a la forma real que exhiben experimentalmente estas nanoestructuras, a través de un modelo separable que permite encontrar los niveles energéticos y las funciones de onda en una forma exacta, incluso aunque la estructura no tenga simetría axial y se encuentre en presencia de un campo magnético.
- Los resultados obtenidos para este modelo revelan una gran sensibilidad de la energía del sistema ante pequeñas variaciones de la pendiente en el grosor del QD que se manifiesta en el apagamiento de las oscilaciones de Aharonov-Bohm para el estado base y algunos de los primeros estados excitados. Otra importante consecuencia que trae la variación de la pendiente en el grosor, en presencia de defectos estructurales en el QD es una notoria transformación de los estados electrónicos rotacionales más bajos en estados fuertemente localizados.
- El análisis de las energías de los dos electrones en anillos concéntricos así como en anillos acoplados verticalmente con diferentes radios muestra una fuerte influencia de la variación de la dimensión de la sección transversal de los anillos. En consecuencia, cualquier pequeña no homogeneidad del grosor de uno de los anillos conduce a una localización de los estados más bajos y el número de estados localizados aumenta abruptamente ante pequeñas variaciones del grosor en las regiones no-homogéneas.
- La estructura del espectro energético de dos electrones confinados en un anillo cuántico en presencia de dos impurezas donadoras ionizadas ubicadas en el eje de simetría del anillo muestra un comportamiento similar al que exhibe una molécula de hidrogeno. Se demuestra que las formas de las curvas de potencial de la molécula artificial se pueden modificar esencialmente mediante la variación de las posiciones de las donadoras, el radio y el grosor de los anillos.

- Se ha propuesto un método simple, basado en el formalismo de Galerkin para analizar el espectro energético de un excitón neutro y de un excitón cargado positivamente confinado en un QR delgado. Se han calculado las energías de los niveles más bajos en función del radio de anillo, del ancho del grosor, de la razón entre las masas efectivas del electrón y el hueco y de la intensidad de campo magnético aplicado a lo largo de eje simetría tanto para los anillos uniformes como con defectos estructurales. Nuestros resultados muestran que cualquier pequeña variación en el ancho o el grosor del QR en las regiones defectuosas produce la extinción de las oscilaciones AB para un buen número de los niveles energéticos más bajos del excitón, resultado que puede resultar de mucha importancia para comprender los resultados experimentales sobre dichos sistemas, ya que los QRs fabricados actualmente presentan importantes variaciones morfológicas tanto en el ancho, como en la altura.

REFERENCIAS

- [1] Dong, H., Wang, D., Sun, G., Hinestroza, J., Assembly of Metal Nanoparticles on Electrospun Nylon 6 Nanofibers by Control of Interfacial Hydrogen Bonding Interactions (2008), *Chemistry of Materials*, 20, 21, 6627-6632
- [2] T. Appenzeller, *Science* **254**, 1300-1335 (1991)
- [3] Euroresidentes, nanotecnología, <http://www.euroresidentes.com/futuro/nanotecnologia.htm>
- [4] W. R. Fahrner: *Nanotechnology and nanoelectronics – Materials, devices and measurement techniques*; Springer – Verlag Berlin Heidelberg (2005)
- [5] M. R. Geller, *Quantum Phenomena In Low-Dimensional Systems*, arXiv:cond-mat/0106256v1
- [6] J. Cibert, P. M. Petroff, G. J. Dolan, S. J. Pearton, A. C. Gossard, and J. H. English, *Appl. Phys. Lett.* **49**, 1275 (1986)
- [7] John H. Davis, (The physics of low-dimensional semiconductors-an introduction), Cambridge University Press. (1998), p. 80
- [8] W. Hornischer, P. Grambow, T. Demel, E. Bauser, D. Heitmann, K. von Klitzing, and K. Ploog, *Appl. Phys. Lett.* **60**, 2998 (1998)
- [9] M. Kastner, *Physics Today*, January, 24 (1993); M. Bayer, O. Stern, P. Hawrylak, S. Fafard, and A. Forchel, *Nature*, 405, 923 (2000); D. Gammon, *Nature*, 405, 899 (2000)
- [10] P. Harrison: *Quantum Wells, Wires and Dots*, Wiley-Interscience (2005)
- [11] F. Capasso y S. Datta, *Physics Today*, febrero (1990)
- [12] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs: *Quantum Dots*, Springer-Verlag, New York (1997)
- [13] D. Leonard, K. Pond, P.M. Petro_, *Phys. Rev. B* 50 (1994)
- [14] J. Zou, X. Z. Liao, D. J. H. Cockayne, and R. Leon, *Phys. Rev. B* 59, 12279 (1999)
- [15] M. Grundmann, O. Stier, and D. Bimberg, *Phys. Rev. B* 52, 11969 (1995)
- [16] P. W. Fry, I. E. Itskevich, D. J. Mowbray, M. S. Skolnick, J. J. Finley, J. A. Barker, E. P. O'Reilly, L. R. Wilson, I. A. Larkin, P. A. Maksym, M. Hopkinson, M. Al-Khafaji, J. P. R. David, A. G. Cullis, G. Hill, and J. C. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 733 (2000)
- [17] R. Tsu and L. Ioriatti, *Superlatt. Microstruc.*, 1, 295 (1985); R. Tsu and D. Babi'c, *Appl. Phys. Lett.*, 64, 1806 (1994); Z.Y. Deng, J.K. Guo and T.R. Lai, *Phys. Rev. B*, 50, 5736 (1994); H. Paredes-Gutiérrez, J.C. Cuero-Yépez and N. Porrás-Montenegro, *J. Appl. Phys.*, 75, 5150 (1994).
- [18] B. Szafran, F. M. Peeters, S. Bednarek, T.Chwiej, and Adamowski, *Phys. Rev. B* 70, 35401 (2004); G. Piacente, I. V.Schweigert, J. J. Betouras, and, F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* 69, 45324 (2004)
- [19] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, *Phys. Lett. A* 96 365 (1983)
- [20] Y. Aharonov, D. Bohm, *Phys. Rev.* 115 485 (1959)
- [21] Y. Sugimoto, N. Ikeda, N. Carlsson, K. Asakawa, N. Kawai, and K. Inoue, *J. Appl. Phys.* 91, 922 (2002); M. Geller, C. Kapteyn, L. Müller-Kirsch, R. Heitz, and Bimberg, *. Stat. Sol. (b)* 238, 258 (2003)
- [22] D. Bimberg, N. Kirstaedter, N. N. Ledentsov, Z. I. Alferov, P. S. Kopev, V. M. Ustinov, IEEE; *J. Sel. Top. Quantum Electron* 3, 196 (1997), D. Pan, E. Towe, S. Kennerly, *Electron Lett.*, 34, 1019 (1998)
- [23] M. A. Lampert, *Phys. Rev. Lett.* 1, 450 (1958)
- [24] G. Onido, L. Reining, and A. Rubin, *Rev. Mod. Phys.* 74, 601(2002)
- [25] S. Doniach, and E. H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physics*, Academic Press, New York (2004)
- [26] R. Mattuck, *Guide to Feynman Diagrams in Many-Body Problem*, Dover Publication, New York (1974)
- [27] T. Kawazu, T. Kousuke, and H. Sasaki, *Physica E* 32, 226 (2006)

- [28] A. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, Dover Publications, New York (2003)
- [29] Y-L Liu, *Phys. Rev. B* **71**, 014404 (2005)
- [30] S. Tarucha, D.G. Austing, T. Honda, R.J. van der Haage, L. Kouwenhoven, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3613.
- [31] A. Lorke, R.J. Luyken, *Physica B* **256** (1998) 424
- [32] F.D.M. Haldane, in: *Proceedings of the International School of Physics “Enrico Fermi” Course CXXI*, North-Holland, Amsterdam, 1994
- [33] J. Voit, *Rep. Prog. Phys.* **57** (1994) 977
- [34] H.J. Schulz, in: E. Akkermans, G. Montambaux, J. Pichard, J. Zinn-Justin (Eds.), *Proceedings of Les Houches Summer School LXI*, Elsevier, Amsterdam, 1995
- [35] E.B. Kolomeisky, J.P. Straley, *Rev. Mod. Phys.* **68** (1996) 175
- [36] W. A. Little, *Phys. Rev. A* **134**, 1416 (1964)
- [37] V. L. Ginzburg, *Phys. Lett.* **13**, 101 (1964)
- [38] L. Esaki and R. Tsu, *IBM., J. Res. Dev.* **14**, 61(1970)
- [39] T. Ando, A. B. Fowler and F. Stern, *Reviews of Modern Physics*, **54**, N° 2, 437 (1982)
- [40] D. R. Bowler, *J. Phys.: Condens Matter* **16**, R721-R754 (2004)
- [41] F. C. Frank and J. H. van der Merwe, *Proc. Roy. Soc. London A* **198**, 216 (1949)
- [42] M. Volmer and A. Weber, *Z. Physik. Chem.* **119**, 277 (1926)
- [43] I. N. Stranski and L. Krastanow, *Sitz. Ber. Akad. Wiss, Math.-naturwiss. Kl. Abt. IIb* **146**, 797 (1938).
- [44] D. J. Eaglesham and M. Cerullo, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 1943 (1990)
- [45] J. H. Zhu, K. Brunner, and G. Abstreiter, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 424 (1998)
- [46] W. Wu, J. R. Tucker, G. S. Solomon, and J. S. Harris, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 523 (1996)
- [47] Y. Nabetani, T. Ishikawa, S. Noda, and A. Sasaki, *J. Appl. Phys.* **76**, 347(1994)
- [48] J. Zou, X. Z. Liao, D. J. H. Cockayne, and R. Leon, *Phys. Rev. B.* **59**, 12279(1990)
- [49] D. Granados and J. M. García, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 2401 (2003)
- [50] Lorke, R. J. Luyken, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**, 1857 (2001).
- [51] T. Raz, D. Ritter, and G. Bahir, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1706 (2003)
- [52] A. Lorke, R. Blossey, J. M. Garcia, M. Bichler, and G. Abstreiter, *Mat. Sci. Eng. B* **88**, 225 (2002).
- [53] J. M. Garcia, G. Medeiros-Ribeiro, K. Schmidt, T. Ngo, J. L. Feng, A. Lorke, J. Kotthaus, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 2014 (1997)
- [54] R. Blossey and A. Lorke, *Phys. Rev. E* **65**, 021603 (2002)
- [55] J. M. Garcia, T. Mankad, P. O. Holtz, P. J. Wellman, and P. M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **72**, 3172 (1998)
- [56] A. Lorke, R. Luyken, A. Govorov, J. Kotthaus, J. M. García, and P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 2223 (2000)
- [57] A. Aierken, T. Hakkarainen, J. Riikonen and M. Sopanen, *Nanotechnology* **19**, 245304 (2008)
- [58] T. Raz, D. Ritter, G. Bahir, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1706 (2003)
- [59] A. O. Govorov, A. V. Kalamientsev, R. Waburton, K. Karrai, S. E. Ulloa, *Physica E* **13**, 790 (2002)
- [60] A. O. Govorov, S. E. Ulloa, K. Karrai, R. J. Waburton, *Phys. Rev. B* **66**, 081309 (2002)
- [61] R. Timm, H. Eisele, A. Lenz, L. Ivanova, G. Balakrishnan, D. L. Huffaker and M. Dähnel, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 256101 (2008)
- [62] J.H. He, Y.L. Chueh, W.W. Wu, S.W. Lee, L.J. Chen and L.J. Chou, *Thin Solid Films*, **469–470**, 478 (2004)
- [63] R.A. Webb, S. Washburn, C.P. Umbach and R.B. Laibowitz, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 2696 (1985)

- [64] J. Planelles, J.I. Climente y J.L. Movilla, “Aharonov-Bohm effect for pedestrian”, in Symmetry, Spectroscopy and Schur, Proceedings of the Prof. B.G. Wybourne Commemorative Meeting, Eds.: R.C. King, M. Bylicki, and J. Karwowski, N. Copernicus Univ. Press, Torun 2006, pp.223-230 (“Aharonov-Bohm effect for pedestrian”, J. Planelles, J. I. Climente, J. L. Movilla cond-mat/0506691 -June 2005)
- [65] K. Niemelä, P. Pietiläinen, P. Hyvönen and T. Chakraborty, “Fractional oscillations of electronic states in a quantum ring”, Europhys. Lett. 36, 533 (1996)
- [66] S. Viefers, P. Koskinen, P.S. Deo y M. Maninen, “Quantum rings for beginners: energy spectra and persistent currents”, Physica E (Amsterdam) 21, 1 (2004)
- [67] U.F. Keyser, C. Fühner, S. Borck, R.J. Haug, M. Bichler, G. Abstreiter y W. Wegscheider, “Kondo effect in a few-electron quantum ring”, Phys. Rev. Lett. 90, 196601 (2003)
- [68] J. R. Haynes, Phys. Rev. Lett. **17**, 866 (1966)
- [69] S. Huant, S. P. Najda, and B. Etienne, Phys. Rev. Lett, **65**, 1486 (1990)
- [70] A. J. Shields, M. Pepper, M. Y. Simmons, and D. A. Ritchie, Phys. Rev. B **52**, 5523(1995); H. Buhmann, L. Mansouri, J. Wang, P. H. Beton, N. More, L. Eaves, M. Henini, M. Potemski, Phys. Rev. B **51**, 7969 (1995); G. Finkelstein, H. Shtrikman, I. Bar-Joseph, Phys. Rev. B **53** (1996) R 1709
- [71] B. Stébé and A. Ainame, Superlattices Microstructure **5**, 545 (1989)
- [72] T. Pang and S. G. Louie, Phys. Rev. Lett. 65, 1635 (1990); D. E. Phelps and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B, **27**, 4883 (1983); I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, J. H. Marín, Phys. Stat. Sol. (b) **220**, 171 (2000); I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, J. H. Marín, and L. E. Oliveira, Phys. Stat. Sol. (b), **210** 605 (1998); F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, J. H. Marín, and L. E. Oliveira, J. Phys.: Condens. Matter, **10**, 7283 (1998); J. H. Marín , *Cálculo del Estado Base de los Sistemas de Pocas Partículas Confinadas en Pozos Cuánticos de GaAs-GaAlAs*, Tesis de Maestría, UIS, 1997.
- [73] R. J. Warburton, C. S. Durr, K. Karrai, J. P. Kotthaus, G. Madeiros-Ribeiro, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **79**, 5282 (1997)
- [74] J. M. Luttinger, W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955)
- [75] W. Kohn, J. M. Luttinger, Phys. Rev. **98**, 915 (1955)
- [76] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981); Bastard G, *Wavemechanics Applied to Semiconductor heterostructures*, (Halsted, New York, 1988)
- [77] G. Bastard, E. E. Mendez, L. L. Chang and L. Esaki, Phys. Rev. B **26**, 1974 (1982)
- [78] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, and L. F. García, Phys. Stat. Sol. (b) **224**, 757(2001)
- [79] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, Phys. Stat. Sol. (b) **213**, 325(1999)
- [80] S. Le Goff and B. Stébé, Phys. Rev. B **47**, 1383 (1993)
- [81] P. A. M. Maksym and T. Chakraborty, Phys. Rev. Lett. **65**, 108 (1990)
- [82] J. J. S. De Groot, J. E. M. Hornos, and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B **46**, 12773(1992)
- [83] J-L Zhu, J. Z. Yu, Z. Q. Li, and Y. Kawazoe, J. Phys.: Condensed Matter **8**, 7857 (1990); M. El-Said, J. Phys. I, France **5**, 1027 (1995)
- [84] X-F He, Phys. Rev. B **42**, 11751 (1990); I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, Phys. Stat. Sol. (b) **234**, 590 (2002)
- [85] A. Matulis and F. M. Peeters, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 7751 (1994)
- [86] K. L. Janssens, F. M. Peeters, and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **63**, 205311 (2000)
- [87] B. Szafran, J. Adamowski, and S. Bednarek, Physica E **5**, 185 (2000)
- [88] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. D, **31**, 3391 (1998)
- [89] R. Escorcía, R. Robayo, and I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol. (b) **230**, 431(2002)
- [90] F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **53**, 1468 (1996)
- [91] L. Wendler and V. M. Fomin, Phys. Rev. B **51**, 17 814 (1995); D. Xu and J-L. Zhu, Phys. Rev. B **72**, 075326 (2005); A. Puente and Ll. Serra, Phys. Rev B **63**, 125334 (2001); J. Adamowski, M. Sobkowicz, B. Szafran, and S. Bednarek, Phys. Rev. B **62**, 4234 (2000)
- [92] J-L Zhu, X. Yu, Z. Dai, and X. Hu, Phys. Rev. B **68**, 045324 (2003)

- [93] B. Partoens and F. Peeters, Phys. Rev. Lett. **84**, 4433 (2000); S. Bednarek, T. Chwiej, J. Adamowski and B. Szafran, Phys. Rev. B **67**, 205316 (2003)
- [94] B. Partoens, A. Matulis, and F. Peeters, Phys. Rev. B **59**, 1617 (1999)
- [95] L. A. Lavenère-Wanderley, A. Bruno-Alfonso and A. Latgé, J. Phys.: Condens. Matter **14** 259 (2002)
- [96] S.-R. Eric Yang, Phys. Rev. B **74**, 075315 (2006)
- [97] Y. V. Pershin and C. Piermarocchi, Phys. Rev. B **72**, 125348 (2005)
- [98] A. Bruno-Alfonso, and A. Latgé, Phys. Rev. B **77**, 205303 (2008)
- [99] I. Filikhin, V.M. Suslov, B. Vlahovic, Physica E **33**, 349 (2006)
- [100] V. M. Fomin, V. N. Gladilin, S. N. Klimin, and J. T. Devreese, Phys. Rev. B **76**, 235320 (2007)
- [101] J Even and S Loualiche, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, L289 (2004)
- [102] R. D. Guerrero, J. C. Granada, N. Porrás-Montenegro, Revista Colombiana De Física **35**, 51 (2003)
- [103] T. Chakraborty and P. Pietiläinen, Phys. Rev. B **50**, 8460 (1994)
- [104] F. García, J. H. Marín, H. Paredes Gutiérrez, and I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol. (c) **2**, No. 10, 3630 (2005)
- [105] J. H. Marin, F. García, and I. D. Mikhailov, Braz. J. Phys. **36**, 940 (2006); B. Szafran, S. Bednarek, and M. Dudziak, Phys. Rev. B **75**, 235323 (2007)
- [106] F. J. Culchac, J. C. Granada, and N. Porrás-Montenegro, Phys. Stat. sol. (c) **4**, No. 11, 4139 (2007)
- [107] B. Szafran and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **72**, 155316 (2005)
- [108] A.V. Chaplik, Pisma Zh. Eksp. Teor. Phys. **62**, 885 (1995) [JETP Lett. **62**, 900 (1995)]
- [109] R.A. Römer and M.E. Raikh, Phys. Rev. B **62**, 7045 (2000)
- [110] A. V. Maslov and D. S. Citrin, Phys. Rev. B **67**, 121304(R) (2003)
- [111] A. M. Fischer, V. L. Jr. Campo, M. E. Portnoi and R. A. Römer, Phys. Rev. Lett **102**, 096405 (2009)
- [112] L G.G.V. Dias da Silva, S. E. Ulloa and T. V. Shahbazyan, Physica E **32**, 37 (2006)
- [113] Hui Hu, Jia-Lin Zhu, Dai-Jun Li and Jia-Jiong Xiong, , Phys. Rev. B **63**, 195307 (2001)
- [114] J. Song and S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **63**, 125302 (2001)
- [115] A. O. Govorov, S. E. Ulloa, K. Karrai and R. J. Warburton, Phys. Rev. B **66**, 081309 (2002)
- [116] L. G. G. V. Dias da Silva, S. E. Ulloa and A. O. Govorov, Phys. Rev. B **70**, 155318 (2004)
- [117] M. Grochol, F. Grosse, and R. Zimmermann, Phys. Rev. B **74**, 115416 (2006)
- [118] M. D. Teodoro, V. L. Campo, Jr, V. Lopez-Richard, E. Marega, Jr, G. E. Marques, Y. Galvao Gobato, F. Iikawa, M. J. S. P. Brasil, Z.Y. AbuWaar, V. G. Dorogan, Yu. I. Mazur, M. Benamara, and G. J. Salamo, Phys. Rev. Lett. **104**, 86401 (2010)
- [119] E. Ribeiro, A. O. Govorov, W. Carvalho, Jr. and G. Medeiros-Ribeiro, Phys. Rev. Lett. **92**, 126402 (2004)
- [120] P. Boonpeng, W. Jevasuwan, S. Suraprapapich, S. Ratanathamphan, S. Panyakeow, Microelectronic Engineering **86**, 853 (2009)
- [121] K. L. Janssens, F. M. Peeters, and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **63**, 205311 (2000)
- [122] O. Voskoboinikov *et al*, Physica E **24** 87-21 (2004)
- [123] F. Rodríguez-Prada, *et. al.*; *Superlattice and microstructures* **49**, 258-263 (2011)
- [124] F. Rodríguez-Prada, M. Fulla and J. Marín; *Superlattice and microstructures* **49**, 252-257 (2011)
- [125] F. Rodríguez-Prada, J. Marín and I. D. Mikhailvo; *Journal of Physics: Conference Series* **245**, 012020 (2010)
- [126] J.J. Plalacios y P. Hawrylak, “Correlated few-electron states in vertical double-quantum-dot systems”, Phys. Rev. B **51**, 1769 (1995)

- [127] S.S. Li, J.B. Xia, Z.L. Yuan, Z.Y. Xu, W. Ge, X.R. Wang, Y. Wang, J. Wang y L.L. Chang, “Effective-mass theory for InAs/GaAs strained coupled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **54**, 11575 (1996)
- [128] S.S. Li y J.B. Xia, “Intraband optical absorption in semiconductor coupled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **55**, 15434 (1997)
- [129] L.R.C. Fonseca, J.L. Jiménez y J.P. Leburton, “Electronic coupling in InAs/GaAs self-assembled stacked double-quantum-dot systems”, *Phys. Rev. B* **58**, 9955 (1998)
- [130] X.Q. Li y Y. Yan, “Quantum computation with coupled quantum dots embedded in optical microcavities”, *Phys. Rev. B* **65**, 205301 (2002)
- [131] T. Ota, M. Stopa, M. Rontani, T. Hatano, K. Yamada, S. Tarucha, H. Z. Song, Y. Nakata, T. Miyazawa, T. Ohshima y N. Yokoyama, “Molecular states observed in a single pair of strongly coupled self- assembled InAs quantum dots”, *Superlattices and Microstructures* **34**, 159 (2003)
- [132] A. Bertoni, M. Rontani, G. Goldoni, F. Troiani y E. Molinari, “Field- controlled suppression of phonon-induced transitions in coupled quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 4729 (2004).
- [133] J. I. Climente, A. Bertoni, G. Goldoni y E. Molinari, “Phonon-induced electron relaxation in weakly confined single and coupled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **74**, 035313 (2006)
- [134] D. Granados, J.M. García, T. Ben y S.I. Molina, “Vertical order in stacked layers of self-assembled In(Ga)As quantum rings on GaAs (001)”, *Appl. Phys. Lett.* **86**, 071918 (2005)
- [135] F. Suárez, D. granados, M.L. Dotor y J.M. García, “Laser devices with stacked layers of InGaAs/GaAs quantum rings”, *Nanotechnology* **15**, S126 (2004)
- [136] J.I. Climente y J. Planelles, “Far-infrared absorption of vertically coupled self-assembled quantum rings”, *Phys. Rev. B* **72**, 155322 (2005)
- [137] F. Malet, M. Barranco, E. Lipparini, R. Mayol, M. Pi, J.I. Climente y J. Planelles, “Vertically coupled double quantum rings at zero magnetic field”, *Phys. Rev. B* **73**, 245324 (2006).
- [138] T. Mano, T. Kuroda, S. Sanguinetti, T. Ochiai, T. Tateno, J. Kim, T. Noda, M. Kawabe, K. Sadoka, G. Kido y N. Koguchi, “Self-assembly of concentric quantum double rings”, *Nano Letters* **5**, 425 (2005)
- [139] T. Kuroda, T. Mano, T. Ochiai, S. Sanguinetti, K. Sakoda, G. Kido and N. Koguchi, “Optical transitions in quantum ring complexes”, *Phys. Rev. B* **72**, 205301 (2005)
- [140] B. Szafran y F.M. Peeters, “Few-electron eigenstates of concentric double quantum rings”, *Phys. Rev. B* **72**, 155316 (2005)
- [141] J. Planelles y J.I. Climente, “Semiconductor concentric double rings in a magnetic field”, *Eur. Phys. J. B* **48**, 65 (2005)
- [142] J.I. Climente, J. Planelles, M. Barranco, F. Mallet y M. Pi, “Electronic structure of few-electron concentric double quantum rings”, *Phys. Rev. B* **73**, 235327 (2006)
- [143] Wigner, E. "On the Interaction of Electrons in Metals". *Physical Review* **46** (11): 1002. Bibcode 1934PhRv...46.1002W. doi:10.1103/PhysRev.46.1002 (1934)
- [144] Pershin Y V and Piermarocchi C. *Phys. Rev. B* **72** 195340 ; Bruno-Alfonso A and Latgé A 2008 *Phys. Rev.* **B77** 205303 (2005)
- [145] J. L. Movilla, A. Ballester and J. Planelles, *Phys. Rev. B* **79**, 195319 (2009)
- [146] S. Kang, Y. M. Liu and T. Y. Shi, *Commun. Theor. Phys.* **50**, 767 (2008)
- [147] F.J. Betancur, W. Gutiérrez, J.C. Piña, *Physica B* **396** 12 (2007)
- [148] J.H. Marín, W. Gutiérrez, I.D. Mikhailov, *J. Phys.: Conf. Ser.* **210** 012145–012045 (2010)
- [149] W. Kolos, L. Wolniewicz, *J. Chem. Phys.* **43** 2429 (1965)
- [150] Hui Hu, Jia-Lin Zhu, Dai-Jun Li and Jia-Jiong Xiong, *Phys. Rev. B* **63**, 195307 (2001)
- [151] J. Song and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63**, 125302 (2001)

- [152] M. Bayer, M. Korkusinski, P. Hawrylak, T. Gubrod, M. Michel, and A. Forchet, Phys. Rev. Lett., **90**, 186801 (2003)
- [153] A. B. Dzyubenko, H. A. Nickel, T. Yeo, B. D. McCombe, and A. Petrou, Phys. Stat. Sol.(b) **227**, 365 (2001)
-