

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE DONADORAS
CONFINADAS EN POZOS CUÁNTICOS CON
CURVATURA**

DARLY YARITZA CASTRO CARDENAS

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA

2019

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE DONADORAS
CONFINADAS EN POZOS CUÁNTICOS CON
CURVATURA**

DARLY YARITZA CASTRO CARDENAS

TRABAJO DE GRADO PARA OPTAR AL TÍTULO DE FÍSICO

DIRECTOR:
ILIA DAVIDOVICH MIKHAILOV, Ph. D. FÍSICA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA

2019

Section 48, Song of Myself

*I have said that the soul is not more than the body,
And I have said that the body is not more than the soul,
And nothing, not God, is greater to one than one's self is,
And whoever walks a furlong without sympathy
 walks to his own funeral drest in his shroud,
And I or you pocketless of a dime may purchase the pick
 of the earth,
And to glance with an eye or show a bean in its pod
 confounds the learning of all times,
And there is no trade or employment but the young man
 following it may become a hero,
And there is no object so soft but it makes a hub for the
 wheel'd universe,
And I say to any man or woman, Let your soul stand cool
 and composed before a million universes.*

*And I say to mankind, Be not curious about God,
For I who am curious about each
 am not curious about God,
(No array of terms can say how much I am at peace
 about God and about death.)*

*I hear and behold God in every object, yet understand
 God not in the least,
Nor do I understand who there can be more wonderful
 than myself.*

*Why should I wish to see God better than this day?
I see something of God each hour of the twenty-four,
 and each moment then,
In the faces of men and women I see God,
 and in my own face in the glass,
I find letters from God dropt in the street, and every one
 is sign'd by God's name,
And I leave them where they are, for I know that
 wheresoe'er I go,
Others will punctually come for ever and ever.*

Agradecimientos

Este trabajo marca la culminación de mi pregrado en física por ello en estos párrafos expreso mi agradecimiento a las personas que de diferentes maneras hicieron de estos años una grandiosa experiencia y enriquecieron mi aprendizaje como física y ser humana.

Mi querida familia me enseñó con ejemplo que el trabajo duro es vital para cumplir nuestras metas, indispensables en la vida, gracias por permitirme trabajar estos años en lo que más me gusta, aprender física. También a mis queridos padres, gracias por darme la oportunidad de vivir y darme una educación fundamentada en la resiliencia. Mamí aunque difiera en tu forma de pensar y ver el mundo, te amo, gracias por siempre brindarme tu amor incondicional y enseñarme a ver el conocimiento como algo valioso que nadie jamás te puede quitar.

Querido David gracias por quitarme la fobia a programar, sin ti hubiera sido diferente el inicio de este proyecto, gracias por ser mi amigo y llenar estos años de amor, de interesantes, agitadas y filosóficas conversaciones.

Es un honor haber estado bajo la dirección del profesor Ilia Mikhailov, muchas gracias por aceptarme como su estudiante. Agradezco enormemente sus valiosas enseñanzas, su asesoría y tiempo a todas mis inquietudes durante este trabajo, gracias también por el apoyo brindado como estudiante de pregrado en física.

A todos los profesores de la escuela de física con los que cursé el pensum académico y otros con los que compartí mis dudas, muchas gracias porque todos ustedes motivaron mi pasión por entender los fenómenos físicos de la naturaleza. En especial agradezco a los profesores: Fabio Duvan Lora, Zandra Lizarazo, Eduardo Orozco, Ilia Mikhailov, William Guitierrez, Rafael Torres, A.C. Gutiérrez, Yeinzón Rodriguez, Carlos Beltrán y Harold Paredes, gracias por compartir su conocimiento y experiencias haciendo física, sus aportes me motivaron a iniciar mis inclinaciones hacía la rama de la materia condensada.

También quiero agradecer a todos mis amigos, compañeros de la universidad y del grupo FICOMACO. En especial a David, Karen, Jenny, Sue, Natalia, Javier, Julian, Zuly, Cami, Leonardo, Daniel, Daniela, Nicole, Jennifer, gracias por su cariño y consejos durante estos años.

Finalmente agradezco el apoyo brindado por la escuela de física y la facultad de ciencias que permitieron mejorar mi bienestar y participar en diferentes eventos donde se presentó parte de este trabajo.

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	13
1 ESTADO DEL ARTE Y PROPUESTA DE INVESTIGACIÓN	17
1.1 MÉTODOS DE FABRICACIÓN DE POZOS CUÁNTICOS ENROLLADOS O NANOTUBOS	17
1.2 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA	19
1.3 IMPUREZAS POCO PROFUNDAS CONFINADAS EN POZOS CUÁNTICOS	21
1.4 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA	23
1.5 PROPIEDADES ESPECTRALES DE POZOS CUÁNTICOS CON CURVATURA	27
1.6 PROPUESTA DE INVESTIGACIÓN	28
2 MODELO MATEMÁTICO	30
2.1 CURVATURA DE UNA LÍNEA	30
2.2 GEOMETRÍA DE UN QW CON CURVATURA EN COORDENADAS NATURALES	32
2.3 HAMILTONIANO ADIMENSIONAL DE UNA IMPUREZA DONADORA EN COORDENADAS NATURALES	34
2.3.1 Aproximación adiabática en coordenadas naturales	35
3 ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	37
3.1 IMPUREZA DONADORA CONFINADA EN UN QW ENROLLADO EN UNA ESPIRAL CONSTRUIDA POR SEMICIRCUNFERENCIAS	37
3.1.1 Geometría de la espiral de semicircunferencias conjugadas	37
3.1.2 Potencial efectivo de una impureza donadora confinada en un QW enrollado en forma de espiral	38
3.1.3 Efecto de la posición de la impureza y la curvatura de la espiral	40

3.2	IMPUREZA DONADORA CONFINADA EN UN QW ENROLLADO EN ESPIRAL DE ARQUÍMEDES	44
3.2.1	Geometría de la Espiral de Arquímedes	44
3.2.2	Potencial efectivo de una impureza donadora confinada en un QW enrollado en una espiral de Arquímedes	47
3.2.3	Espectro energético de una impureza donadora confinada en un QW enrollado en una espiral de Arquímedes	50
3.2.4	Polarizabilidad de una donadora confinada en QW enrollado en una espiral	55
4	CONCLUSIONES	58
	BIBLIOGRAFÍA	59
	ANEXOS	-1

LISTA DE FIGURAS

1	Desarrollo histórico de los materiales.	13
2	Mecanismo Rolling-up. Esquema del desdoblamiento inducido cuando una una bicapa de InGaAs/GaAs se separa del sustrato mediante el grabado selectivo de la capa de sacrificial de AlAs. Fuente Detlef H. [2010].	17
3	a) Diagrama esquemático que muestra el proceso de enrollamiento de nanomembranas con la ayuda de una tensión superficial de gotas de oro. b) Imagen SEM de la morfología de la superficie. c) Microtubos enrollados de SiO/Si después del tratamiento con RTA (rapid thermal annealing). Imagen tomada de Xu et al. [2019].	18
4	Diagrama esquemático del mecanismo Rolling-up de una nanomembrana flotando sobre agua. Imagen tomada de Xu et al. [2019]. . .	19
5	Representación esquemática del cambio en la forma de los orbitales de una impureza donadora inducidos por la variación de: (a) el ancho del pozo y (b) la posición de la impureza donadora. Imagen tomada de Harrison P. [2016].	23
6	Circulo osculador de una curva plana L en el punto P_1	30
7	Marco TNB de Frenet-Serret	31
8	Representación esquemática de un pozo cuántico con curvatura. . .	32
9	Modelo Geométrico de un QW en coordenadas naturales	33
10	Sección transversal de un QW construido a partir de semicírculos.	38
11	Gráficos de la dependencia entre la separación del electrón excesivo y la impureza, el radio de curvatura y el potencial efectivo, con la coordenada tangencial $s - s_D$	39
12	Potencial efectivo a lo largo de la coordenada tangencial para diferentes posiciones de la impureza. Parámetros de la espiral: $R_o = 2a_o^*$ y $\Delta R = 0.2a_o^*$	40
13	Estados energéticos de una impureza donadora colocada en un QW enrollado, para dos radios iniciales diferentes en función de la posición la impureza.	41

14	Potencial efectivo para dos espirales de diferentes parámetros y diferente localización de la impureza donadora.	42
15	Densidad de estados electrónicos para una impureza donadora en diferentes posiciones dentro de un QW enrollado en espiral.	43
16	(a) Densidad electrónica de estados para tres posiciones de la impureza donadora, Espectro energético en función de la posición de la impureza a lo largo de espiral para: (b) $R_o = 3a_o^*$ y (c) $R_o = 1a_o^*$	44
17	Representación esquemática del corte horizontal de un QW enrollado en espiral de Arquímedes alrededor de eje Z	45
18	Variables geométricas $\tilde{\varphi}$ y R_s como funciones de la longitud de arco s	46
19	Coordenadas cartesianas en función de la longitud de arco. $a = b = 2a_o^*$	47
20	Potencial efectivo de una donadora ubicada al inicio de la espiral con parámetros $a = b = 2a_o^*$ y $n_F = 5$ para los valores de campo eléctrico $F = 0$ kV/cm y $F = 2$ kV/cm	48
21	Potencial efectivo de una donadora cercana al final de la espiral ($S_D/S_F = 0.6$) con parámetros $a = b = 2a_o^*$ y $n_F = 5$ para tres valores del campo eléctrico.	49
22	Lado izquierdo: Potencial efectivo con parámetros geométricos distintos y $S_D/S_F = 0.6$ para ambos parámetros. Lado derecho: Espectro energético en función de la posición de donadora.	51
23	Espectro energético en función de la posición de la donadora, para dos campos eléctricos a lo largo de eje x ($\theta = 0$).+ Parámetros de la espiral $a = b = 2a_o^*$	52
24	Niveles energéticos para tres diferentes direcciones del campo eléctrico.	53
25	Densidad de estados de donadoras en QWs para dos espirales con parámetros $a = b = 2(a_o^*)$ y $a = b = 1(a_o^*)$ y tres valores diferentes del campo eléctricos aplicados a lo largo de eje x ($\theta = 0$)	54
26	Densidad de estados de donadoras en QWs, en una espiral de parámetros $a = b = 2(a_o^*)$ y con diferentes valores de la posición de la donadora(S_D/S_F).	55
27	Energía y momento dipolar para el estado fundamental en función del campo eléctrico aplicado a lo largo del eje x	56
28	Densidad de estados de donadoras en QWs en una espiral, con parámetros $a = b = 2(a_o^*)$ y para diferentes valores de la posición de la donadora (S_D)	57

Resumen

TÍTULO: ESPECTRO ENERGÉTICO DE DONADORAS CONFINADAS EN POZOS CUÁNTICOS CON CURVATURAⁱ

AUTOR: Castro Cárdenas, Darly Yaritza ⁱⁱ.

PALABRAS CLAVE: Nanoestructuras 2D, Impureza donadora, Espectro energético, Pozos cuánticos enrollados, nanotecnología de enrollados.

DESCRIPCIÓN: En los últimos años se ha despertado un gran interés en posibles aplicaciones con nanoestructuras semiconductoras de películas delgadas enrolladas en forma de espiral. El dopaje cuidadoso de estas estructuras por impurezas donadoras permite controlar y modificar sus propiedades eléctricas y espectrales. En el presente trabajo de grado se analizan teóricamente las alteraciones de las propiedades espectrales de una impureza donadora, confinada en un pozo cuántico enrollado en forma de espiral bajo la influencia de un campo eléctrico externo. Se muestra cómo haciendo uso de coordenadas curvilíneas y de la aproximación adiabática el problema puede reducirse a una ecuación de onda bidimensional, la cual describe los estados ligados a la impureza donadora dentro del pozo cuántico enrollado cuya solución puede encontrarse con una expansión en doble serie de Fourier. Con este método se realiza un cálculo numérico que permite calcular las energías y la densidad de estados en función de la posición de la impureza donadora, el campo eléctrico externo y los parámetros geométricos de la espiral. Los resultados revelan una alta sensibilidad de las propiedades espectrales tanto a cambios estructurales y de la posición de la impureza donadora como a la variación del campo eléctrico externo. Particularmente, se encontró que un incremento paulatino del campo eléctrico puede generar un cambio abrupto del momento dipolar del sistema.

ⁱTrabajo de grado, Pregrado en Física.

ⁱⁱFacultad de Ciencias, Escuela de Física, Ilia Davidovich Mikhailov (Director)

Abstract

TITLE: ENERGY SPECTRUM OF CONFINED DONATORS IN ROLLED QUANTUM WELLS WITH CURVATURE. ⁱ.

AUTHOR: Castro Cárdenas, Darly Yaritza ⁱⁱ

KEYWORDS: 2D Nanostructures, Semiconductors, Nanostructures, Rolled-up quantum Well, rolled-up nanotechnology.

DESCRIPTION: In recent years, a great interest has been raised in possible applications of semiconductor nanostructures in the form of thin films rolled-up in a spiral. The careful doping of these structures by donor impurities permits to control and modify their electrical and spectral properties. In this graduation work, the alterations of the spectral properties of a donor impurity, confined in a quantum well rolled-up in the form of a spiral, under the influence of the external electric field, are theoretically analyzed. It is shown how by using the adiabatic approximation and curvilinear coordinates, the problem can reduce to a two-dimensional wave equation that describes the donor bound states inside rolled-up quantum well, whose solution can be found in a double Fourier series form. By using this method, the programs have been developed to calculate the energies and densities of the states as functions of on the donor's position, the external electric field and the geometric parameters of the spiral. The calculation results reveal a high sensitivity of the spectral properties on both the structural changes, the position of the donor impurity and the variation of the external electric field. Particularly, it has been found that a gradual increase of the electric field can generate an abrupt change in the dipole moment of the system.

ⁱBachelor's Thesis in Physics

ⁱⁱFaculty of Sciences, School of Physics, Ilia Mikhailov (Supervisor).

INTRODUCCIÓN

Los materiales han jugado un rol importante en el desarrollo de la civilización actual, desde épocas de la prehistoria el hombre ha utilizado diferentes materiales para su supervivencia y la mejora de su entorno, de hecho, el nombre de las diferentes eras de la historia y la prehistoria humana se asignaba según el material primario utilizado en ese tiempo Wikipedia contributors [2019]. Aunque esta convención ya fue abandonada se puede hacer una línea de tiempo del desarrollo histórico de los materiales (ver figura 1). Los materiales definen el límite y el futuro de la tecnología contemporánea, la eficiencia de los dispositivos existentes depende de los materiales con los que son fabricados, de este modo el desarrollo de nuevos materiales crea la posibilidad de obtener nuevos dispositivos y aplicaciones.



Figura 1: Desarrollo histórico de los materiales.

En la presente era, referida como la era del silicio, la dimensión de los dispositivos semiconductores se ha reducido drásticamente desde una escala micrométrica a una escala nanométrica, dando lugar a la nanotecnología como una nueva herramienta que facilita la manipulación de la materia a niveles atómicos y moleculares permitiendo fabricar nuevos dispositivos y transformar el campo de la Micro-electrónica al campo de la Nanoelectrónica Ullmann and T. [2017]. Los efectos físicos a escalas < 100 nm dejan la manifestación de conceptos y fenómenos contra-intuitivos que pueden no ser sobresalientes o no observados en los materiales en bloque.

Para analizar las propiedades cuánticas de los sistemas y nanoestructuras de dimensiones reducidas, surgió en la teoría del estado sólido una nueva área de investigación denominada sistemas de baja dimensionalidad (SBD), sistemas donde el movimiento de los portadores de carga es altamente restringido en una o varias direcciones. Los SBDs están clasificados en tres tipos de nanoestructuras; primero se encuentran las nanoestructuras 2D conocidas como pozos cuánticos (QW-Quantum Well), donde la región que presenta homogeneidad 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 ochenta se desarrollaron nuevas técnicas para fabricar sistemas con dos grados de confinamiento adicional: los hilos cuánticos (QWW-Quantum Well Wire), sistemas cuasi-unidimensionales, y la situación extrema, las estructuras cuasi cero dimensionales denominadas puntos cuánticos (QD-Quantum Dot).

Por otra parte desde el 2004 con el descubrimiento del grafeno, la comunidad científica ha descubierto más de 2500 materiales atómicamente delgados conocidos como materiales 2D N. and others.. En estos materiales se han encontrado un gran número de comportamientos exclusivos, e.g., excitones fuertemente ligados con niveles energéticos inusuales que dejan nuevas reglas de selección ópticas, excitones ligeros, propiedades magnéticas y plasmónicas ajustables, y nuevas fases topológicas, lo anterior mencionado los hace poseer propiedades eléctricas, mecánicas, ópticas y magnéticas exclusivas Chen et al. [2019], S. et al. [2018], Z. et al. [2017], C. et al. [2018]. De manera puntual, las capas cristalinas pueden ser combinadas libremente para crear nuevos materiales a partir de sus uniones por fuerzas de Van der Waals K. and V. [2013], de tal forma que se puede construir heteroestructuras con un amplio potencial para crear numerosos metamateriales y nuevos dispositivos con propiedades híbridas M. and S. [2019]. Una de las principales características de de los materiales 2D es su alto modulo de Young, su flexibilidad intrínseca permite destacarlos como materiales prometedores para construir nanoestructuras de diferentes morfologías. Específicamente las nanoestructuras enrolladas en forma de espiral o nanotubos Xi-ang et al. [2018], K. et al. [2018]. Recientemente los nanomateriales derivados de la nanotecnología de enrollamiento han atraído el interés mundial puesto que se han logrado avances notables al introducir esta tecnología en el diseño de dispositivos de almacenamiento de energía, en tubos láser para aplicaciones en óptica de comunicaciones; publicaciones recientes muestran cómo la introducción de nanoestructuras enrolladas permite aumentar la densidad de estados, el tiempo de vida de los estados excitados y el rango de capacidad de energía en baterías de litio L. et al. [2017], Z. et al. [2016], J et al. [2016], K. and V. [2013], Zetian et al. [2015].

De igual forma la síntesis de nanoestructuras 2D se basa principalmente en la formación de películas delgadas, sin embargo, no es posible obtener QWs completamente planos inclusive con técnicas experimentales modernas. Por esta razón, la elaboración de métodos de enrollamiento y el análisis de las propiedades físicas de películas delgadas con grosores a escala nanométrica, enrolladas en forma de nanotubo o de espiral han sido en la última década de gran atención en la ciencia de materiales. Una película delgada enrollada presenta una estructura intrigante dado que es la única que imita a un cristal con simetría cilíndrica Krause et al. [2006], Ch. et al. [2007], Ch et al. [2009], que genera propiedades mecánicas, magnéticas, eléctricas y ópticas especiales Ch et al. [2009], S. et al. [2007], K.J. et al. [2007], Vorobév et al. [2007], T. et al. [2006]. El progreso experimental en la fabricación de

nanoestructuras enrolladas logrado en la última década desencadenó la necesidad de una comprensión teórica del comportamiento de los portadores de carga en QWs con una curvatura arbitraria.

En cierto modo se debe esperar que las propiedades espectrales relacionadas con la variación de la curvatura en las secciones transversales presenten diferencias específicas. Un estudio teórico de este problema sugiere encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger con fronteras curvilíneas, un problema más complejo en comparación con el problema en una región con fronteras planas. Existe una bibliografía bastante limitada de investigaciones teóricas sobre este tema, en los trabajos encontrados se proponen distintos métodos para resolver la ecuación de onda de un portador de carga dentro de una nanoestructura con curvatura usando la aproximación de masa efectiva (AME) Pershin and Piermarocchi [2005], Bruno and A. [2008]. Principalmente estas investigaciones muestran algunos efectos generados por la formación de un potencial “geométrico” adicional, originado por la curvatura de la película da Costa R. C. T. [1981]. Este potencial *geométrico* produce unos mínimos adicionales en la energía potencial; en los puntos donde el radio de curvatura es pequeño y en las barreras, donde el radio de curvatura es máximo.

El problema similar para dos portadores de carga (un excitón, 2 electrones, etc.) o para una impureza donadora confinada en un QW con curvatura en la sección transversal, hasta el momento no se ha analizado. Sin embargo, la solución de este problema permitirá esclarecer el efecto de curvatura de las películas delgadas sobre sus propiedades espectrales, relacionadas con la excitación ocasionada por un láser o por el dopaje de impurezas tipo-n. Este efecto ha de ser esencial, e.g., una donadora confinada en una película delgada enrollada en forma de espiral, en este caso el confinamiento del electrón excesivo expulsado de la impureza ya no es puramente bidimensional, como en un QW plano debido a la posibilidad que el electrón excesivo tunele entre las diferentes capas de la espiral liberando el movimiento en la dirección transversal de la película.

En el grupo de investigación *FICOMACO*ⁱ la mayoría de estudios previos sobre las propiedades espectrales se han realizado para estructuras con una morfología plana, pozos cuánticos singular, doble, triple o una superred F. et al. [2016, 2017a,b], D. et al. [2013]. Aunque ya se ha reportado un número notable de publicaciones sobre las nanoestructuras 2D, el siguiente trabajo de investigación plantea por primera vez un modelo matemático versátil y eficiente para analizar teóricamente la influencia del dopaje con impurezas donadoras, en pozos cuánticos enrollados en forma de espiral sobre el espectro energético.

En virtud de las consideraciones anteriores se presenta la estructura del trabajo como sigue: En el capítulo 1 se describe brevemente el proceso de fabricación de películas delgadas con curvatura, también las aproximaciones utilizadas para analizar las

ⁱGrupo de Investigación en Física Computacional de la Materica condesada, UIS

propiedades espectrales; también se presenta una revisión bibliográfica, el panorama general del estado del arte y la propuesta de investigación. En el capítulo 2 se dan las herramientas matemáticas necesarias para abarcar el problema de investigación. El capítulo 3 se analizan los cálculos de las energías y la densidad de estados de una donadora confinada en un pozo cuántico enrollado en forma de espiral, como función de su posición y de la intensidad del campo eléctrico externo, aplicado perpendicularmente al eje del rollo para dos geometrías diferentes. Los resultados revelan una alta sensibilidad de las propiedades espectrales tanto a cambios estructurales y de la posición de la impureza donadora como a la variación del campo eléctrico externo. Particularmente, se encontró que un incremento paulatino del campo eléctrico puede generar un cambio abrupto del momento dipolar del sistema.

1. ESTADO DEL ARTE Y PROPUESTA DE INVESTIGACIÓN

1.1 MÉTODOS DE FABRICACIÓN DE POZOS CUÁNTICOS ENROLLADOS O NANOTUBOS

La nanotecnología de enrollamiento se basa en un procedimiento de auto-ensamblaje que permite reorganizar las nanoestructuras planas 2D en arquitecturas nanotubulares o enrollados en forma de espiral mediante la incorporación de campos de deformación inducidos por esfuerzos internos. La publicación Ya et al. [2000] propuso por primera vez un auto-enrollamiento de películas delgadas a partir de la formación de un potencial; en este método para fabricar nanotubos de InGaAs/GaAs de diámetros pequeños (~ 2 nm y 3 nm) se usan heteroestructuras tensas de una monocapa que luego se curva en rollos después de eliminarla del sustrato.

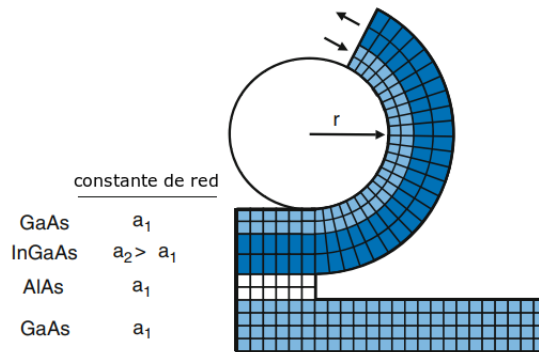


Figura 2: Mecanismo Rolling-up. Esquema del desdoblamiento inducido cuando una bicapa de InGaAs/GaAs se separa del sustrato mediante el grabado selectivo de la capa de sacrificial de AlAs. Fuente Detlef H. [2010].

En la figura 2 se muestra esquemáticamente el proceso de formación de un nanotubo para una heteroestructura de InGaAs/GaAs. En primer lugar se fabrica una heteroestructura de tres capas; primero se coloca el sustrato de GaAs con constante de red a_1 , enseguida una capa sacrificial de AlAs con la misma constante de red a_1 , luego una capa tensa de InGaAs con una red constante $a_2 > a_1$. Por encima de esta estructura se deposita una capa de GaAs con constante de red a_1 . El grabado

selectivo de la capa de sacrificial de AIs separa la bicapa tensa del sustrato, las fuerzas elásticas de cada una de las dos capas separadas tienen direcciones opuestas y originan una deformación tal que se produce un torque, bajo la acción de este torque la bicapa inicialmente plana se enrolla en un pergamino con un radio de curvatura r . Las capas enrolladas se unen formando así la pared del tubo unida perfectamente Detlef H. [2010].

Por otro lado el mecanismo de enrollamiento también puede generarse con la aplicación de una fuerza externa que impulse a las bicapas planas a enrollarse. A diferencia del método anterior donde el gradiente de tensión se produce internamente dentro de las bicapas, la fuerza aplicada solo actúa sobre las superficies de las nanomembranas Xu et al. [2019]. La fuerza externa puede ser aplicada de las siguientes maneras:

Por tensión superficial de un líquido; inicialmente se deposita una capa de metal sobre la nanomembrana a enrollar, se calienta el material y luego se disminuye lentamente su temperatura haciendo que la capa de metal se separe en pequeñas islas (ver figura 3). La tensión superficial entre las gotas de metal y la nanomembrana junto con la disminución de los esfuerzos intrínsecos en la nanomembrana inducen el proceso de enrollamiento Xu et al. [2019].

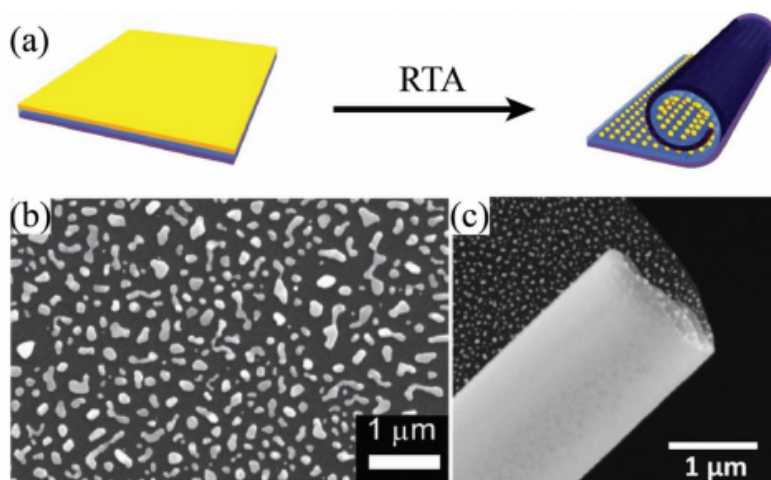


Figura 3: a) Diagrama esquemático que muestra el proceso de enrollamiento de nanomembranas con la ayuda de una tensión superficial de gotas de oro. b) Imagen SEM de la morfología de la superficie. c) Microtubos enrollados de SiO/Si después del tratamiento con RTA (rapid thermal annealing). Imagen tomada de Xu et al. [2019].

Y aunque no se ha logrado experimentalmente, trabajos teóricos han mostrado que la superficie de una nanomembrana flotando sobre agua no-ionizada puede enrollarse por medio de la adhesión de van der Waals a una estructura tubular, si ésta se coloca

cerca (ver imagen 4). Varios materiales podrían enrollarse utilizando este método (Au, PS y grafeno) y los parámetros (como el número de embobinado y el diámetro) de los tubos podrían controlarse con precisión mediante la rotación del sustrato Xia et al. [2010].

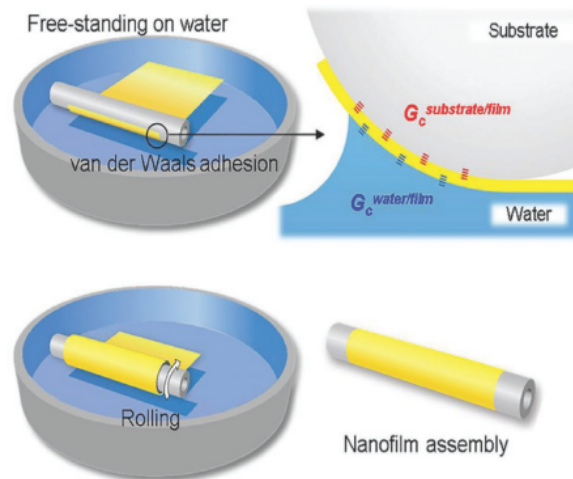


Figura 4: Diagrama esquemático del mecanismo Rolling-up de una nanomembrana flotando sobre agua. Imagen tomada de Xu et al. [2019].

1.2 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

En el estudio de las propiedades espectrales de un sólido se debe resolver la ecuación de Schrödinger para un sistema que incluye electrones y núcleos atómicos o iones. Como esta ecuación no tiene solución exacta, para resolverla se requieren una serie de aproximaciones. En este trabajo se estudian los estados de una impureza donadora incorporada a un material semiconductor, el cual se considera como un arreglo periódico de átomos, donde la posición de los átomos depende de la naturaleza de su enlace. El entrelazamiento consiste en el intercambio de electrones ubicados en las capas de valencia con los átomos vecinos mientras que los núcleos o iones (mucho más pesados) se mueven más lento que los electrones, por lo tanto sus posiciones pueden considerarse casi fijas definiendo de esta manera un potencial periódico constante.

El movimiento de los portadores de carga (electrones y huecos) en las bandas correspondientes al número n de un cristal con las curvas de dispersión $E_n(\mathbf{k})$, se describen a través de una onda de Bloch D.K. [2013] para las cuales su velocidad de grupo es:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{v} \rangle &= \left\langle \frac{\mathbf{p}}{m} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{p}} \right\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar} \left\langle \psi_n(\mathbf{k}) \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \mathbf{k}} \right| \psi_n(\mathbf{k}) \right\rangle \\
&= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}},
\end{aligned} \tag{1.2.1}$$

En materiales cuyas concentraciones tanto de electrones en la banda de conducción como de huecos en la banda de valencia son bajas, los portadores de carga ocupan los niveles energéticos más cercanos a los mínimos de las curvas de dispersión en cada caso. Con la asunción que la banda de conducción (o de valencia) más baja (más alta) de un semiconductor es isotrópica, no-degenerada y parabólica, con el mínimo de banda localizado en el centro, por consiguiente la dependencia $E_n(\mathbf{k})$ puede ser reemplazada por una expansión en series de Taylor a segundo orden

$$E_n(\mathbf{k}) \approx E(0) + \left. \frac{\partial E(k)}{\partial \mathbf{k}} \right|_{k=0} \mathbf{k} + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 E_n(0)}{\partial \mathbf{k}^2} \right|_{k=0} \mathbf{k}^2 \tag{1.2.2}$$

$$E_n(\mathbf{k}) \approx E_n(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_n(0)}{\partial \mathbf{k}^2} \mathbf{k}^2. \tag{1.2.3}$$

El mínimo en la banda ocurre cuando $k = 0$, y en este caso el gradiente de $E(k)$ es cero en $k = 0$; $E_n(0)$ es el ancho de banda. Esta dependencia para las ondas de Bloch es similar a la fórmula correspondiente a una onda De Broglie de una partícula que tiene una masa, m^* , denominada masa efectiva

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}. \tag{1.2.4}$$

Comparando las expresiones (1.2.3) y (1.2.4) se puede encontrar la definición de las masas efectivas de los portadores de carga que se les relaciona con las curvas de dispersión $E_n(\mathbf{k})$:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E_n(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}^2} \right), \tag{1.2.5}$$

la definición anterior permite interpretar el movimiento de un electrón (o hueco) excesivo en un cristal como el movimiento de una cuasi-partícula libre con una masa renormalizada m^* , diferente a la del electrón libre $m_0 = 9.11 \times 10^{-31}$ kg, sin tener en cuenta el potencial periódico, hay cristales donde la masa efectiva de los portadores de carga es mucho más pequeña o más grande que m_0 . La masa efectiva puede ser anisótropa e incluso negativa. Como puede observarse, la masa efectiva representa el

efecto de todas las fuerzas internas sobre el movimiento de los portadores de carga en la banda de conducción, permitiendo que la ecuación de Schrödinger para un electrón sea válida pero ahora con una masa renormalizada m^* .

La aproximación de masa efectiva (AME) es ampliamente utilizada para calcular las propiedades electrónicas de los portadores de carga en potenciales periódicos de semiconductores. La ventaja del método es que las complejidades del potencial periódico se ocultan en el tensor de masa efectiva m^* . Particularmente, la AME es útil en el análisis del efecto de las impurezas poco profundas incorporadas en pozos cuánticos con un potencial que varía lentamente respecto a la escala de la constante de red M . [2016]. Sin embargo, se debe recordar que ésta expresión es válida solo en la región más baja de la banda de conducción (o en el borde de la banda de valencia).

1.3 IMPUREZAS POCO PROFUNDAS CONFINADAS EN POZOS CUÁNTICOS

Uno de los grandes logros de los materiales semiconductores ha sido la capacidad de modificar sus propiedades electrónicas mediante la introducción en forma controlada de átomos con un número de valencia diferente. Los electrones de valencia del átomo introducido forman enlaces covalentes con los electrones de valencia del material en bloque, y añaden electrones de conducción o huecos en la banda de conducción o en la banda de valencia respectivamente, a estos átomos se les denominan impurezas. El proceso de agregar defectos a un material puro con la introducción de átomos distintos para modificar la conductividad de un semiconductor se conoce como dopaje. Tras el dopaje en la localidad de la impureza queda una carga libre que interactúa con los portadores libres disponibles en el semiconductor a través de un potencial de Coulomb.

Una impureza donadora es un átomo que dona electrones de conducción desde su capa de valencia a su electrón excesivo, éste electrón se encuentra débilmente ligado al ion fijo (con carga $+e$) de la impureza (ver figura 5). Tanto el electrón como el ion en los semiconductores están apantallados, y la interacción entre ellos disminuye por el campo eléctrico de las cargas inducidas de los átomos del cristal. El electrón excesivo introducido por una impureza donadora genera unos niveles electrónicos adicionales que están por debajo del mínimo de la banda de conducción, iguales a la energía de ionización, i.e., la energía mínima necesaria para escapar de la impureza donadora y saltar a la banda de conducción; ésta energía procedente de la atracción de Coulomb entre el núcleo iónico y el electrón es despreciable (de orden de la energía térmica ~ 0.02 eV), menor que el ancho de la banda prohibida, razón por la cual se denomina impureza poco profunda.

Debido al fuerte apantallamiento de la interacción electrostática y a la pequeña masa efectiva del electrón, la extensión de la función de onda del electrón ligado está dada por el radio de Bohr efectivo, que es cientos de veces más grande que el radio de Bohr atómico y mucho más grande que la constante de red M . [2016]. Las energías de una impureza donadora en un bloque de cristal, en presencia de un campo eléctrico externo \mathbf{F} , se encuentran en el marco de la AME que resuelve la ecuación de Schrödinger para un Hamiltoniano correspondiente a un átomo hidrogenoide con los parámetros renormalizados

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \left[e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_o\mathbf{r}} \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (1.3.1)$$

Para simplificar la ecuación (1.3.1), se realiza el siguiente cambio de variables

$$\text{Cambio de Variables} = \begin{cases} \mathbf{r} = a_B^* \tilde{\mathbf{r}} \\ E = Ry^* \mathcal{E}, \end{cases} \quad (1.3.2)$$

donde se define el Rydberg efectivo Ry^* como el menor nivel energético para el cual el electrón y el hueco están ligados con un radio de Bohr efectivo a_B^* y \mathcal{E} es la constante dieléctrica del material en bloque.

$$\begin{aligned} Ry^* &= \frac{e^2}{8\pi\epsilon_o\mathcal{E}a_B^*} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_o a_B} \frac{1}{\mathcal{E}} \frac{a_B}{a_B^*} = \frac{Ry}{\mathcal{E}} \left(\frac{a_B}{a_B^*} \right) \\ a_B^* &= \frac{4\pi\epsilon_o\hbar^2}{m_e e^2} \left(\mathcal{E} \frac{m_e}{m^*} \right) = a_B \mathcal{E} \frac{m_e}{m^*} \\ \alpha &= \frac{ea_B^*}{Ry^*}. \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

Aquí se utilizan las siguientes unidades adimensionales: la masa efectiva m^* como unidad de masa, el radio de Bohr efectivo a_B^* como unidad de distancia, el Rydberg efectivo Ry^* como unidad de energía y α como la unidad de campo. Para el GaAs con $\epsilon = 12.53$, se tiene $m^* = 0.067m_e$, siendo m_e la masa del electrón; $a_B^* \approx 9.87$ nm; $Ry^* \approx 5.83$ meV y $\alpha \approx 0.17$ cm/kV.

En estas unidades la ecuación (1.3.1) obtiene una forma idéntica al átomo de hidrógeno,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*a_B^*}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + \left[ea_B^*(\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}) - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_o a_B^* \tilde{\mathbf{r}}} \right] \psi(\mathbf{r}) = Ry^* \mathcal{E} \psi(\mathbf{r}) \quad (1.3.4)$$

$$-\tilde{\nabla}^2\psi(\tilde{\mathbf{r}}) + \left[\alpha(\mathbf{F} \cdot \tilde{\mathbf{r}}) - \frac{2}{\tilde{\mathbf{r}}} \right] \psi(\tilde{\mathbf{r}}) = \mathcal{E}\psi(\tilde{\mathbf{r}}); \quad (1.3.5)$$

las soluciones de la ecuación anterior son bien conocidas y pueden encontrarse en cualquier texto de mecánica cuántica. Sin embargo, cabe mencionar que hay autovalores discretos y continuos. Los estados continuos del electrón excesivo son estados de conducción deslocalizados, y los estados de conducción que están cercanos a la brecha de la banda no son los mismos que los estados de la banda de conducción en ausencia del potencial. Las energías de los estados excitados de la impureza donadora en un semiconductor en bloque, están dadas por la serie de Rydberg Cardona and P.Y. [2010], y se encuentran debajo de la banda de conducción,

$$E_n = -Ry^*/n^2, \quad (n = 1, 2, 3 \dots) \quad (1.3.6)$$

El problema similar para una donadora confinada en un pozo cuántico es más complicado y puede resolverse solo numéricamente. Sin embargo, está claro que el espectro de una donadora en un QW debe modificarse y depender tanto del ancho de QW como de la posición de la donadora, como se observa en el siguiente esquema

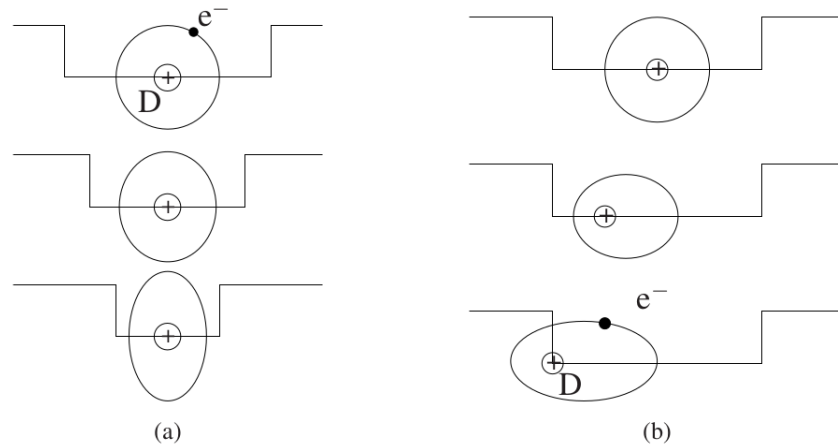


Figura 5: Representación esquemática del cambio en la forma de los orbitales de una impureza donadora inducidos por la variación de: (a) el ancho del pozo y (b) la posición de la impureza donadora. Imagen tomada de Harrison P. [2016].

1.4 APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

La palabra adiabático proviene del griego *adiabatos* compuesta con el prefijo *a* (privado de) y el sufijo *diabatos* (que puede travesar), luego la palabra *adiabatos* significa que no puede atravesar. Usualmente este término se usa en el contexto de la termodinámica para referirse a que un sistema no permite el intercambio térmico entre su interior y el exterior. Sin embargo en mecánica cuántica, la *aproximación adiabática* (AA) hace referencia a esas soluciones de la ecuación de Schrödinger que

hacen uso de una separación en la escala temporal entre los grados de libertad del sistema: variaciones lentas y rápidas de la función de onda; y usan esto para escribir la solución en forma aproximada como el producto de los estados lentos y rápidos, i.e., en mecánica cuántica el término adiabático significa que la superficie de energía potencial no cambia en el tiempo.

Un ejemplo común de la aproximación adiabática es la *Aproximación de Born-Oppenheimer*, donde toman en cuenta que los iones son mil veces más pesados en promedio que los electrones y por ende se mueven más lento, de esta manera se considera que los iones están en reposo instantáneamente respecto al electrón permitiendo desacoplar las variables del movimiento rápido (electrones) y del movimiento lento (iones-núcleos) de la ecuación de Schrödinger.

El Hamiltoniano de un sólido es

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \sum_i \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + \sum_j \frac{\mathbf{P}_j^2}{2M_j} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{j,j'} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} + \frac{1}{2} \sum_{i,i'} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} \\ & - \sum_{i,j} \frac{Z_j e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{R}_j - \mathbf{r}_i|}, \end{aligned} \quad (1.4.1)$$

donde \mathbf{r}_i y \mathbf{R}_i son los operadores de las posiciones y \mathbf{p}_i y \mathbf{P}_i son los operadores del momentum, de los electrones y los núcleos respectivamente. El primer y el segundo término son los operadores de la energía cinética de los electrones y de los núcleos respectivamente, el tercer término es la interacción electrostática entre los núcleos, el cuarto término es la interacción electrostática entre los electrones y el quinto término es la interacción electrostática entre los electrones y los núcleos.

El Hamiltoniano (1.4.1) no puede ser resuelto sin una serie de aproximaciones, primero se considera que los electrones se dividen en dos grupos: electrones de valencia y electrones del núcleo; luego la aproximación de Born-Oppenheimer separa el acoplamiento entre el movimiento electrónico con el movimiento nuclear, la cual supone que los electrones siguen el movimiento iónico adiabáticamente. Como resultado, se resuelve la parte electrónica del Hamiltoniano para obtener las energías de los electrones como funciones de las posiciones de los iones. Por otro lado, los iones no pueden seguir el movimiento electrónico consecuentemente solo ven un potencial electrónico adiabático promediado en el tiempo Cardona and P.Y. [2010]. De tal forma que el Hamiltoniano (1.4.1) se divide en tres partes:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{iones}(\mathbf{R}_i) + \mathbf{H}_e(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_{jo}) + \mathbf{H}_{e-ion}(\mathbf{r}_i, \delta\mathbf{R}_j), \quad (1.4.2)$$

el primer término representa los núcleos con su potencial y la contribución promediada en el tiempo de los electrones; el segundo término es el operador cinético de

los electrones alrededor de los núcleos en sus posiciones promediada \mathbf{R}_{j0} ; el tercer término es el Hamiltoniano de la interacción electrón-fonón que depende de las posiciones del electrón y la desviación de los iones de su posición promedio $\delta\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j0}$. La interacción electrón-fonón es responsable de efectos tales como la resistencia eléctrica y la superconductividad M. [2016].

A continuación se muestra el procedimiento matemático de la aproximación adiabática para una impureza donadora confinada en un QW plano.

$$\text{Potencial de Confinamiento} \quad V_{\text{conf}} = \begin{cases} 0 & 0 < z < d(x, y) \\ \infty & z < 0; \quad z > d(x, y) \end{cases} \quad (1.4.3)$$

$$\text{Posición de la impureza} \quad \mathbf{R}_d = (x_d, y_d, z_d), \quad (1.4.4)$$

las dimensiones de la nanoestructura son

$$\begin{aligned} d(x, y) &\sim 2 - 4\text{nm} \\ L &\sim 100\text{nm} \quad \longrightarrow \quad L \gg d(x, y). \end{aligned}$$

La ecuación de Schrödinger para el sistema en unidades adimensionales es

$$\left(-\nabla^2 + V_{\text{conf}} - \frac{2}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_d|} \right) \Psi(x, y, z) = \mathcal{E} \Psi(x, y, z), \quad (1.4.5)$$

para resolver la ecuación anterior se aplica el principio variacional de Schrödinger

$$F[\Psi] = \langle \Psi | \mathbf{H} - \mathcal{E} | \Psi \rangle \rightarrow \min \quad (1.4.6)$$

$$\begin{aligned} F[\Psi] &= \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^{d(x,y)} dz \Psi^*(x, y, z) \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_{\text{conf}} - \frac{2}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_d|} - \mathcal{E} \right] \Psi(x, y, z) \\ &= \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^{d(x,y)} dz \left\{ -\left(\frac{\partial \Psi}{\partial x} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial y} \right)^2 - \left(\frac{\partial \Psi}{\partial z} \right)^2 + \left[V_{\text{conf}} - \frac{2}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}_d|} - \mathcal{E} \right] \Psi^2 \right\}, \end{aligned}$$

y realizando el siguiente cambio de variables:

$$x = \tilde{x}L, \quad y = \tilde{y}L, \quad z = \tilde{z}d(x, y),$$

se obtiene

$$F[\Psi] = \int_0^1 d\tilde{x} \int_0^1 d\tilde{y} \int_0^1 d\tilde{z} \left\{ \underbrace{-\frac{1}{L^2} \left[\left(\frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{x}} \right)^2 + \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{y}} \right)^2 \right]}_{\text{Mvto. lento}} - \underbrace{\frac{1}{d^2} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{z}} \right)^2}_{\text{mvto. rapido}} + \left[V_{\text{conf}} - \frac{2}{|\mathbf{R} - \tilde{\mathbf{R}}_d|} - \mathcal{E} \right] \right\} \Psi^2, \quad (1.4.7)$$

donde $\frac{L^2}{d^2} \sim 0.001$, debido a que $L \gg d$ el primer término es un valor de energía cinética pequeño y corresponde al movimiento lento, mientras que el segundo término corresponde al movimiento rápido ya que la contribución cinética es más alta. Lo anterior puede interpretarse de la siguiente manera: el sistema físico permanece en su auto estado instantáneo si una perturbación actúa lo suficientemente suave y si existe una brecha entre el autovalor y el resto del espectro del hamiltoniano, i.e., el movimiento rápido a lo largo del eje z en cada punto "fijo" con coordenadas (x, y) , es independiente instantáneamente del movimiento lento en la dirección transversal (plano $x - y$). Por lo tanto se puede escribir la función de onda como el producto de dos funciones de onda

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_{fast}(z)\psi_{slow}(x, y); \quad (1.4.8)$$

$\psi_{fast}(z)$ es una función propia del electrón confinada en un pozo cuántico de ancho $d(x, y)$ y confinamiento de barrera infinita

$$T_1[\psi_{fast}] = \int_0^{d(x,y)} dz \left[-\left(\frac{\partial\psi_{fast}(z)}{\partial z}\right)^2 + (V_{conf} - E_f)\psi_{fast}^2(z) \right], \quad (1.4.9)$$

$$\boxed{E_f(x, y) = \frac{\pi^2}{d(x, y)}} \quad \boxed{\psi_{fast}(z) = \sqrt{\frac{2}{d(x, y)}} \sin\left(\frac{\pi z}{d(x, y)}\right)} \quad (1.4.10)$$

Siguiendo con el principio variacional

$$F[\Psi] = \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^{d(x,y)} dz \frac{2}{d(x,y)} \sin^2\left(\frac{\pi z}{d(x,y)}\right) \left\{ -\left(\frac{\partial\psi_{slow}}{\partial x}\right)^2 - \left(\frac{\partial\psi_{slow}}{\partial y}\right)^2 + [V_{ed}(x, y, z) - E]\psi_{slow}^2 \right\}$$

donde $V_{ed}(x, y, z)$ es el potencial atractivo entre el electrón excesivo y la impureza donadora.

$$V_{ed}(x, y, z) = -\frac{2}{\sqrt{(z - z_d)^2 + (x - x_d)^2 + (y - y_d)^2}}$$

para ψ_{slow} el problema se reduce a resolver la siguiente ecuación diferencial

$$-\nabla_{x,y}^2 \psi_{slow}(x, y) + [V_{ed}(x, y, z) + E_f(x, y)]\psi_{slow}(x, y) = E\psi_{slow}(x, y) \quad (1.4.11)$$

1.5 PROPIEDADES ESPECTRALES DE POZOS CUÁNTICOS CON CURVATURA

La primera investigación teórica que analizó la influencia de la variación de la curvatura en el espectro energético de un electrón confinado en un QW enrollado en una espiral fue realizada en el marco de la aproximación adiabática (AA), ver referencia I. and V. [2000], la AA permite separar el movimiento rápido del electrón en la dirección transversal (se supone que el grosor de un QW es muy pequeño respecto a la altura de la barrera) y de esta manera se reduce el problema 3D a uno 2D para una cinta con curvatura; en este trabajo se demostró que el problema se reduce aproximadamente al análisis de un Hamiltoniano efectivo unidimensional que describe el movimiento de un electrón a lo largo de una curva plana de forma arbitraria. Los autores encontraron que la curvatura de un QW produce un potencial adicional, conocido como “potencial geométrico”, con mínimos en los puntos con mayor curvatura y con máximos en las regiones planas donde se encuentran las barreras.

Posteriormente en la publicación Ortix and J. [2010] se realizó un análisis de las propiedades de uno y dos electrones confinados en una cinta enrollada en forma de una espiral de Arquímedes, donde se demuestra que el espectro electrónico depende fuertemente de los parámetros geométricos de la estructura (radio de curvatura y el número de giros), adicionalmente encuentran que el número de estados ligados es igual al número de giros de la espiral. Los trabajos teóricos mencionados anteriormente hasta el momento han sido los únicos en estudiar las propiedades espectrales de los QWs enrollados en forma de espiral.

Sin embargo, existen trabajos teóricos donde se analiza las propiedades de los QWs con curvaturas, pero en forma de nanotubos cilíndricos o cónicos K. et al. [2002], D. et al. [2013], D et al. [2009], F. et al. [2017b, 2016]. En el artículo D. et al. [2013] se estudió el espectro de un excitón confinado en un nanotubo cilíndrico y se comparan los resultados con el espectro de fotoluminiscente encontrado experimentalmente en el trabajo K. et al. [2002], usando la AME los autores analizaron la variación de la densidad de estados de un excitón con un hueco ligero en función del grosor de los QWs de GaAs/AlGaAs. Los nanotubos tienen un radio de curvatura muy grande y por eso no se analizan las propiedades que evidencian cambios inducidos por la curvatura de la nanoestructura. En otra publicación similar se investigó la energía de enlace de una impureza donadora confinada en dos nanotubos concéntricos de GaAs/GaAlAs sometidos a un campo magnético externo D et al. [2009], fue demostrado que el incremento del campo magnético produce un desdoblamiento de los niveles energéticos correspondientes a las combinaciones simétricas y antisimétricas de dos estados de la impureza en los cuales el electrón está localizado en el nanotubo interno o externo.

Recientemente el grupo de investigación *FICOMACO* se realizaron investigaciones sobre las propiedades espectrales, magnéticas y eléctricas de nanotubos en forma cónica. En el artículo “*Un nanotubo cónico de un electrón en campos eléctricos y magnéticos externos*” F. et al. [2017b] se demostró que la presencia de una curvatura variable en esta estructura produce un efecto magnetoeléctrico, i.e., el campo magnético induce un momento dipolar eléctrico o viceversa el campo eléctrico induce un momento dipolar magnético. Un estudio similar fue realizado en el trabajo “*El efecto Magneto-eléctrico en un cono cuántico tipo II inducido por una impureza donadora*” F. et al. [2016], donde se demuestra la posible existencia de un acoplamiento similar entre la polarización y la magnetización de un nanocono tipo II con la estructura “nucleo-cascarón” inducida por una impureza donadora. En el modelo se considero una impureza donadora centrada en la base de un nanocono tipo II con su electrón excesivo expulsado, y confinado en una capa delgada que recubre el nanocono.

1.6 PROPUESTA DE INVESTIGACIÓN

El estudio teórico de las propiedades espectrales de las impurezas donadoras confinadas en nanoestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad, realizado durante las últimas dos décadas, demostró una fuerte dependencia de la morfología de la nanoestructura relacionada con efectos cuánticos del tamaño. Por ejemplo, la energía de ionización de una impureza donadora en un pozo cuántico plano (nanoestructura 2D) extra delgado es casi 4 veces más grande que la de un semiconductor en bloque (nanoestructura 3D). De modo que si es menor la dimensionalidad de la estructura, mayor es la energía de ionización. Algunos cambios similares aparecen con otras propiedades espectrales en cuanto a la dimensionalidad de la estructura.

En un QW plano el electrón excesivo puede escapar de la impureza donadora en solo 2 direcciones a comparación con las tres direcciones del material semiconductor en bloque, ésta es la causa del incremento de la energía de ionización. A diferencia de un QW plano, en un pozo cuántico enrollado en forma de espiral para un electrón excesivo aparece la posibilidad adicional de escapar desde la impureza donadora saltando en la dirección transversal a las hojas adyacentes de la espiral. Por lo tanto, la espiral ya no puede considerarse como una estructura estrictamente 2D ni tampoco 3D. El cambio de la geometría debe afectar las propiedades espectrales de las impurezas donadoras confinadas en QW enrollados en forma de espiral.

Sin embargo, hasta el momento este problema no ha sido discutido en la literatura. Entonces surgen las siguientes dos preguntas:

¿Cómo afecta la curvatura de un pozo cuántico a las propiedades espectrales de las impurezas donadoras?

Por otro lado, también existe la posibilidad de aumentar la probabilidad que se presente un salto del electrón excesivo, perteneciente a la impureza donadora, desde

una hoja de la espiral a las otras hojas adyacentes aplicando un campo eléctrico en dirección transversal, de modo que plantee la segunda pregunta:

¿Cómo son afectadas las propiedades espectrales de una donadora, confinada en un pozo cuántico enrollado en forma de espiral, con la aplicación de un campo eléctrico externo en dirección transversal?

Este trabajo de investigación busca responder a estas dos preguntas a través del análisis numérico de la solución a la ecuación de Schrödinger correspondiente.

2. MODELO MATEMÁTICO

2.1 CURVATURA DE UNA LÍNEA

Una curva plana L está descrita por una de las siguientes tres ecuaciones (forma paramétrica, implícita o explícita)

$$x = x(t), \quad y = y(t); \quad (2.1.1)$$

$$f(x, y) = 0; \quad (2.1.2)$$

$$y = y(x). \quad (2.1.3)$$

El círculo de curvatura (o círculo osculador) de una curva plana L en el punto P_1 , es el límite de un círculo que pasa a través de P_1 y otros dos puntos diferentes, P_2 y P_3 adyacentes a P_1 , cuando éstos tienden el uno hacia el otro al punto P_1 desde sus lados opuestos. El centro de este círculo (centro de curvatura de L , correspondiente a la curva en el punto P_1), se encuentra sobre la normal a L en el punto P_1 . El radio del círculo de curvatura R_s (el radio de curvatura de la curva L en el punto P_1) es igual al recíproco de la curvatura K_s de la curva L en el punto P_1 , la curvatura K_s se define como la tasa de cambio del ángulo de rotación de la tangente respecto a la longitud de arco de la curva L .

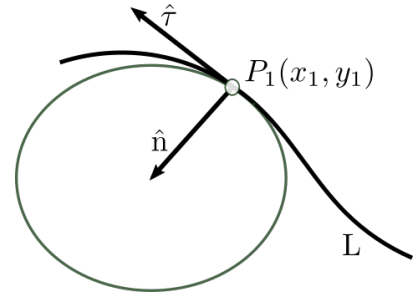


Figura 6: Círculo osculador de una curva plana L en el punto P_1 .

$$K_s = \frac{1}{R_s} = \frac{d\theta}{ds} = \frac{y''(x)}{\sqrt{(1 + y'^2)^3}} \quad (2.1.4)$$

$$K_s = \frac{\ddot{y}(t)\dot{x}(t) - \dot{y}(t)\ddot{x}(t)}{\sqrt{(\dot{x}^2(t) + \dot{y}^2(t))^3}} \quad (2.1.5)$$

Las curvas en el espacio tridimensional se definen por medio de la ecuación

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t) \Leftrightarrow \begin{cases} x = x(t), \\ y = y(t), \\ z = z(t) \end{cases} \quad t_1 \leq t \leq t_2 \quad (2.1.6)$$

Es conveniente introducir un nuevo parámetro, la longitud del arco $s(t)$, definida como:

$$s(t) = \int_L ds = \int_L \sqrt{d\mathbf{r} \cdot d\mathbf{r}} = \int_L \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2} = \int_{t_1}^{t_2} \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} dt. \quad (2.1.7)$$

La curvatura de una línea en el espacio 3D se representa a través de un triedro de tres vectores unitarios mutuamente ortogonales, el triedro en movimiento es un marco de referencia que se mueve con el observador a lo largo de una trayectoria (una curva); este método busca crear un movimiento “preferido” independiente del observador. En el área de la geometría, éste triedro fue introducido a mediados del siglo XIX por Jean Frédéric Frenet y Joseph Alfred Serret. El triedro de Frenet-Serret desempeña un papel clave en la geometría diferencial de las curvas, lo que finalmente lleva a una clasificación más o menos completa de las curvas suaves en el espacio 3D.

Las fórmulas de Frenet-Serret muestran que hay un par de funciones que dan cuenta de la torsión y la rotación de una curva en el espacio, que se obtienen al diferenciar los vectores del triedro, y con ellas se describe completamente cómo evoluciona el triedro en el tiempo al desplazarse a lo largo de una curva.

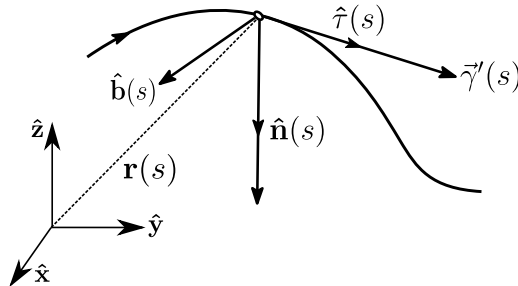


Figura 7: Marco **TNB** de Frenet-Serret

El primer vector \hat{t} , es un vector unitario que es tangente a la curva L en el punto $P_1(\mathbf{r}_1)$. Cada curva tiene una sola tangente en cada punto en el que existe la derivada $\frac{d\mathbf{r}}{dt} \neq 0$.

El segundo vector \hat{n} , es un vector unitario que tiene la dirección de la línea recta que va desde el punto $P_1(\mathbf{r}_1) = P_1(x_1, y_1, z_1)$ hasta el centro del círculo osculador, es perpendicular a la tangente y se denomina la normal principal de la curva L en el punto P_1 .

El tercer vector unitario del triedro \hat{b} , se llama vector binormal de la curva L en el punto P_1 y es una línea recta que pasa a través del punto, y forma junto con los vectores tangente y la normal principal un sistema de coordenadas cartesianas de triada derecha. Para analizar las propiedades de las curvas en el espacio 3D es adecuado considerar los tres vectores del triedro como funciones de la longitud de arco a partir del inicio. Considerando el vector de posiciones de cada punto de la curva como funciones de la longitud de arco, los vectores unitarios del triedro se encuentran como:

$$\hat{\tau} = \frac{d\mathbf{r}(s)}{ds} \quad \text{Vector Tangente Unitario} \quad (2.1.8)$$

$$\hat{\mathbf{n}} = R_s(s)\hat{\tau}'(s) = R_s \frac{d\mathbf{r}(s)}{ds} \quad \text{Vector Normal Unitario} \quad (2.1.9)$$

$$\hat{\mathbf{b}} = \hat{\tau}(s) \times \hat{\mathbf{n}}(s) \quad \text{Vector Binormal Unitario} \quad (2.1.10)$$

Aquí R_s es el radio de curvatura que varía punto a punto y se considera como una función de la longitud de la curva. El valor inverso al radio de curvatura

$$K_s(s) = \frac{1}{R_s(s)},$$

se denomina curvatura.

2.2 GEOMETRÍA DE UN QW CON CURVATURA EN COORDENADAS NATURALES

El empleo de las coordenadas naturales permite seguir la trayectoria de una partícula en cualquier superficie curva, de este modo se describe la morfología de una nanoestructura con curvatura arbitraria.

Los vectores tangencial, normal y binormal $\hat{\tau}$, $\hat{\mathbf{n}}$ y $\hat{\mathbf{b}}$ en un QW con curvatura (ver figura 8) definen las coordenadas naturales de un electrón relacionadas con el vector de posición mediante las relaciones:

$$\mathbf{s} = \mathbf{r} \cdot \hat{\tau} \quad \mathbf{h} = \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad \mathbf{z} = \mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{b}} \quad (2.2.1)$$

Las coordenada \mathbf{s} corresponde a la longitud de arco, medida desde el inicio de la espiral, la coordenada \mathbf{h} mide la posición a lo largo de la normal de la curva, su valor máximo corresponde al grosor de la película delgada y la coordenada \mathbf{z} corresponde a la altura de la película delgada. En estas coordenadas, el vector posición depende de las tres coordenadas naturales

$$\mathbf{r}(x, y, z) = \mathbf{r}(s, h, z)$$

Cuando el grosor de un QW es muy pequeño, se puede despreciar el movimiento del electrón en la dirección normal y el

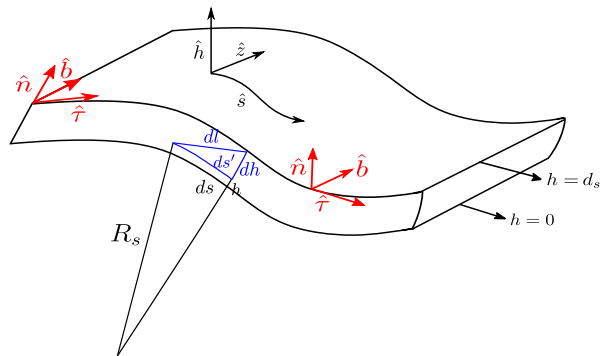


Figura 8: Representación esquemática de un pozo cuántico con curvatura.

vector de posición se presenta como una función de solo dos variables. En este caso, el pozo cuántico enrollado en una espiral puede considerarse como una cinta, la cual es plana en dirección z y curva en el plano xy ; por ende los vectores de posición del electrón y la donadora se definen en coordenadas naturales como $\mathbf{r}_e = \mathbf{r}_e(s, 0, z)$ y $\mathbf{r}_D = \mathbf{r}_D(s_D, 0, z_D)$ (ver figura 9).

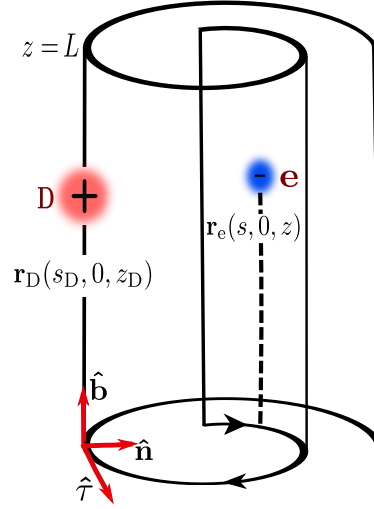


Figura 9: Modelo Geométrico de un QW en coordenadas naturales

Para expresar la ecuación de Schrödinger en coordenadas naturales se debe conocer los coeficientes métricos, los cuales se definen como

$$g_i(s, h, z) = \sqrt{\left(\frac{\partial x}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial q_i}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial q_i}\right)^2}, \quad (2.2.2)$$

donde $i = \{s, h, z\}$ y $q_i = \{q_s = s, q_h = h, q_z = z\}$ B. et al. [2013]. Para el caso sencillo de un QW enrollado en espiral con un radio de curvatura variable $R_s = R_s(s)$ (un plano enrollado alrededor de eje z), los coeficientes métricos, encontrados anteriormente en las referencias I. and V. [2000], Pershin and Piermarocchi [2005], Bruno and A. [2008], Ortix and J. [2010], son:

$$g_s = 1 + \frac{h}{R_s(s)}; \quad g_h = 1; \quad g_z = 1; \quad (2.2.3)$$

utilizando estas expresiones de los coeficientes métricos se encuentra fácilmente el gradiente, la divergencia, el rotacional y el laplaciano en las nuevas coordenadas (s, h, z) . Particularmente, la expresión para el Laplaciano en coordenadas naturales con los coeficientes métricos (2.2.3) es:

$$\nabla_{s,h,z}^2 = \left\{ \frac{1}{g_s} \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{1}{g_s} \frac{\partial}{\partial s} \right) + \frac{1}{g_s} \frac{\partial}{\partial h} \left(g_s \frac{\partial}{\partial h} \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} \quad (2.2.4)$$

$$0 < h < d_s, \quad 0 < s < s_f, \quad 0 < z < L.$$

Como en las nanoestructuras reales $h \ll R_s(s)$ la expresión (2.2.4) puede representarse aproximadamente de la siguiente forma

$$\nabla_{s,h,z}^2 = \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial h^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{g_s R_s} \frac{\partial}{\partial h} \quad (2.2.5)$$

$$\nabla_{s,h,z}^2 = \nabla_{s,z}^2 + \nabla_h^2,$$

$$\text{Donde} \quad \nabla_{s,z}^2 = \frac{\partial^2}{\partial s^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{y} \quad \nabla_h^2 = \frac{\partial^2}{\partial h^2} + \frac{1}{g_s R_s} \frac{\partial}{\partial h}.$$

En la siguiente sección se aplicará esta forma del operador laplaciano para construir el Hamiltoniano, de una impureza donadora confinada en un QW enrollado en forma de espiral, en coordenadas naturales.

2.3 HAMILTONIANO ADIMENSIONAL DE UNA IMPUREZA DONADORA EN COORDENADAS NATURALES

A continuación se considera el modelo de un pozo cuántico con confinamiento de barrera infinita de la siguiente forma:

$$\Theta = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < h < d_s, \quad 0 < s < s_f, \quad 0 < z < L, \\ \infty & \text{cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (2.3.1)$$

La ecuación de onda para una impureza donadora confinada en un QW enrollado en espiral en unidades adimensionales es similar a la ecuación (1.3.1) para una impureza donadora en bloque, pero con la adición del potencial de confinamiento en las fronteras de la función de onda,

$$-\nabla_{s,h,z}^2 \Psi(s, h, z) + \left[\alpha \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}(s, h, z) - \frac{2}{|\mathbf{r}(s, h, z) - \mathbf{r}_D(s_D, h_D, z_D)|} \right] \Psi(s, h, z) = E \Psi(s, h, z) \quad (2.3.2)$$

2.3.1 Aproximación adiabática en coordenadas naturales

Para resolver la ecuación (2.3.2) se hace uso del principio variacional de Schrödinger

$$\int \Psi^*(\widehat{H} - E)\Psi d\Omega \rightarrow \min; \quad \widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla_{s,h,z}^2 + V(s, h, z) \quad (2.3.3)$$

$$V(s, h, z) = \alpha \mathbf{F} \cdot \mathbf{r}(s, h, z) - \frac{2}{|\mathbf{r}(s, h, z) - \mathbf{r}_D(s_D, h_D, z_D)|}$$

$$\int_0^L dz \int_0^L ds \int_0^{d(s)} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} [\nabla_{s,z}^2 \Psi + \nabla_h^2 \Psi] + [V(s, h, z) - E] \Psi^2 \right\} g_s(h, s) dh \Rightarrow \min, \quad (2.3.4)$$

se tiene en cuenta que el ancho del pozo cuántico d_s es mucho más pequeño que el radio de curvatura R_s , y consecuentemente el movimiento del electrón a lo largo de la coordenada h es mucho más rápido que a lo largo de la coordenada s y z , lo cual permite aplicar la aproximación adiabática, por lo tanto la solución de la ecuación (2.3.2) puede ser escrita como

$$\Psi(s, h, z) = f_s(h)\psi(s, z), \quad (2.3.5)$$

el primer factor de la expresión anterior corresponde al movimiento rápido del electrón en dirección h , perpendicular a la superficie cilíndrica, mientras que el segundo factor describe el desplazamiento lento a lo largo de esta superficie. Siguiendo el procedimiento realizado en la sección 1.4, se puede demostrar que a partir del principio variacional de Schrödinger con la variación de f_s , $F[f_s(h)] \Rightarrow \min$

$$\frac{\delta F[f_s]}{\delta f_s} = \int_0^{d(s)} \left\{ \frac{-\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2 f_s(h)}{\partial h^2} + \frac{1}{g_s R_s} \frac{\partial f_s(h)}{\partial h} \right) + [V(s, h, z) - E_{ad}] f_s^2(h) \right\} g_s(h, s) dh = 0,$$

considerando el modelo de barrera infinita y la AME, que la función propia $f_s(h)$ del electrón satisface la siguiente ecuación diferencial:

$$-f_s''(h) - \frac{1}{g_s R_s} f_s'(h) + k^2 f_s(h) = 0 \quad k^2 = \frac{2m^* E_{ad}}{\hbar^2} \quad (2.3.6)$$

$$\boxed{f_s(h) = \sqrt{\frac{2}{d_s g_s(s, h)}} \sin\left(\frac{\pi h}{d_s}\right)} \quad \boxed{E_{ad} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\pi^2}{d_s^2} - \frac{1}{4R_s^2} \right)}. \quad (2.3.7)$$

Mientras que la función $\psi(s, z)$ satisface la siguiente ecuación diferencial y debe resolverse numéricamente

$$\widehat{H}\psi(s, z) = E\psi(s, z) \quad (2.3.8)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\partial^2}{\partial s^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(s, h, z) \quad 0 < z < L; \quad 0 < s < s_f, \quad (2.3.9)$$

siendo $V(s, h, z)$ el potencial efectivo, sin embargo, en el modelo a considerar $h \approx 0$ y $V(s, h, z) = V(s, z)$ dado por

$$V(s, z) = \frac{\pi^2}{d_s^2} - \frac{1}{4R_s^2(s)} - \frac{2}{z} + \alpha F[x(s) \cos \theta + y(s) \sin \theta] \quad (2.3.10)$$

donde z es la distancia entre la impureza donadora y el electrón excesivo

$$z = \sqrt{r_{eD}^2(s, s_D) + (z - z_D)^2} \quad (2.3.11)$$

$$r_{eD}^2(s, s_D) = [x(s) - x(s_D)]^2 + [y(s) - y(s_D)]^2$$

En la fórmula (2.3.10), θ es el ángulo entre la dirección del campo eléctrico y el eje x . De esta manera, el problema se reduce a resolver la ecuación de Schrödinger bidimensional (2.3.8) con un potencial (2.3.10) que tiene cuatro términos correspondientes al confinamiento cuántico lateral, al confinamiento “geométrico” relacionado con la curvatura de la estructura, la interacción electrostática electrón-donadora y la interacción del electrón con el campo eléctrico externo.

Según la ecuación (2.3.10) el potencial resultante depende de la longitud de arco s , no solo con la variación del radio de curvatura $R_s(s)$, sino también de manera implícita en las dependencias de $x(s)$ y $y(s)$. La ecuación paramétrica de una espiral generalmente se define usando coordenadas polares de forma explícita $r = r(\theta)$, sin embargo a partir de esta dependencia se debe encontrar todas las dependencias anteriores con la coordenada s . En el siguiente capítulo se consideran dos modelos diferentes de espirales, un modelo construido con semicircunferencias construidas con la disminución de la curvatura a saltos y el otro, una espiral de Arquímedes en la cual la curvatura disminuye suavemente.

3. ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

Este capítulo reúne los resultados y su respectivo análisis acerca de los estados energéticos de una impureza en un QW enrollado en forma de espiral alrededor de eje z ; se usan dos modelos simples que describen propiamente el crecimiento substancial de la curvatura de las nanoestructuras reales con el aumento de la longitud de arco s . El primer modelo consiste de una espiral construida a partir de semicircunferencias mientras que el segundo es una espiral de Arquímedes. Se usan las coordenadas naturales, definidas en el capítulo anterior, para reducir el problema tridimensional a uno bidimensional y con una expansión en serie de Fourier se resuelve numéricamente la ecuación de Schrödinger.

Para ambos modelos se muestra los estados energéticos más bajos y la densidad de estados para diferentes posiciones de la impureza donadora. Adicionalmente en el segundo modelo se estudia el efecto sobre el espectro energético y la densidad de estados al aplicar un campo eléctrico.

Para mayor información en los cálculos numéricos consultar el siguiente repositorio de GitHub:

https://github.com/dayacaca/ROLLED_UP_QW_spectrum

3.1 IMPUREZA DONADORA CONFINADA EN UN QW ENROLLADO EN UNA ESPIRAL CONSTRUIDA POR SEMICIRCUNFERENCIAS

3.1.1 Geometría de la espiral de semicircunferencias conjugadas

La sección transversal del QW es una espiral construida de la siguiente manera: La curvatura de la espiral disminuye en saltos, a diferencia del modelo de la espiral de Arquímedes considerado anteriormente en I. and V. [2000], Cendula et al. [2009] para un QW enrollado de un electrón. El radio de curvatura R_s tiene un valor inicial R_0 , el cual se mantiene constante entre $0 < \varphi < \pi$ para la coordenada

polar de φ , luego el centro de curvatura se desplaza hacia la derecha y el radio R_s aumenta un valor de ΔR . A medida que el ángulo aumenta, y cuando alcanza el valor $\varphi = 2\pi$ el radio de curvatura aumenta nuevamente el mismo valor ΔR y el centro de curvatura se desplaza ahora hacia la izquierda como se muestra en la figura 10. El radio de curvatura R_k y la longitud del arco s_k en el inicio de un giro dentro de un semicírculo de número $k = 0, 1, 2 \dots$ son iguales a $R_k = R_0 + k\Delta R$ y $s_k = (k + 1)\pi (R_0 + 0.5k\Delta R)$, respectivamente.

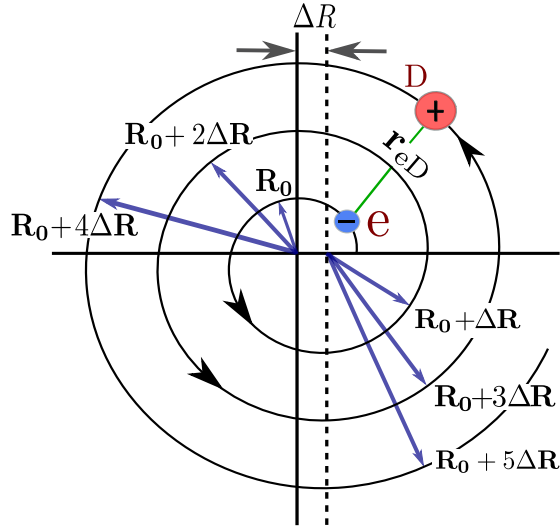


Figura 10: Sección transversal de un QW construido a partir de semicírculos.

Con la descripción anterior de las variables φ y el radio de curvatura R_s se obtienen las relaciones entre las coordenadas cartesianas y las coordenadas polares, para la posición del electrón en el semicírculo número k , y para la impureza donadora con una posición fija en el semicírculo número k_D ,

$$x(s) = \Delta_k + R_k \cos \frac{(s - s_k)}{R_k}; \quad y(s) = R_k \sin \frac{(s - s_k)}{R_k}; \quad z = z \quad (3.1.1)$$

$$x_D(s) = \Delta_{k_D} + R_{k_D} \cos \frac{(s_D - s_{k_D})}{R_{k_D}}; \quad y_D(s) = R_{k_D} \sin \frac{(s_D - s_{k_D})}{R_{k_D}}; \quad z_D = L/2. \quad (3.1.2)$$

3.1.2 Potencial efectivo de una impureza donadora confinada en un QW enrollado en forma de espiral

El potencial efectivo hallado en el sección 2.3.1 para un QW enrollado a diferencia de uno con capas planas, puede presentar múltiples mínimos a lo largo de la dirección

tangencial localizados en cada vuelta adyacente a la impureza donadora como se muestra en la figura 11. En la figura también se muestra cómo la distancia de separación entre el electrón y la impureza donadora determina el valor de los mínimos del potencial; a medida que el electrón y la impureza donadora se separan el potencial aumenta y la contribución electrostática disminuye.

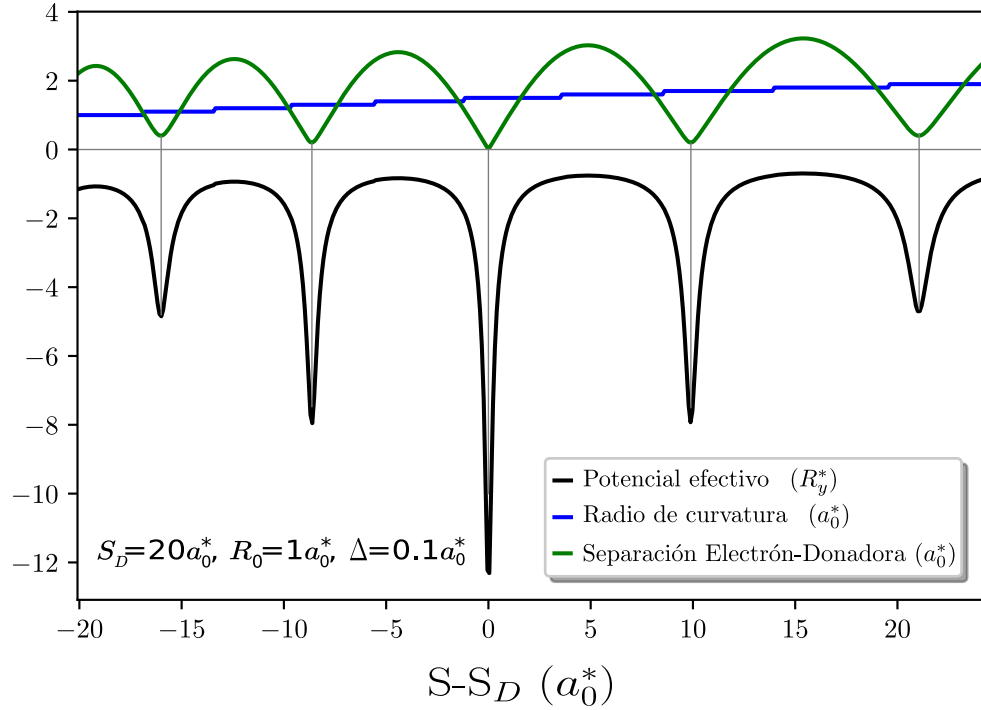


Figura 11: Gráficos de la dependencia entre la separación del electrón excesivo y la impureza, el radio de curvatura y el potencial efectivo, con la coordenada tangencial $s - s_D$.

En el caso de la espiral construida a partir de semicircunferencias el radio de curvatura R_s es constante cada π radianes, luego aumenta una cantidad ΔR en cada semicírculo; y aunque la contribución del término $-1/4R_s^2$ disminuye la energía potencial, a medida que el radio de curvatura aumenta este término se hace más pequeño y por ende el potencial efectivo aumenta.

3.1.3 Efecto de la posición de la impureza y la curvatura de la espiral

La relación S_D/S_F es un parámetro adecuado que caracteriza la posición de la impureza donadora en la espiral, mientras este parámetro es cercano a cero la impureza donadora se encuentra en el inicio de la espiral, en cambio si S_D/S_F se aproxima a uno la impureza se encuentra al final de la espiral. Cuando S_D/S_F aumenta aparecen mínimos adicionales en el potencial efectivo debido a los semicírculos de radios inferiores cercanos al inicio de la espiral y a los semicírculos superiores cercanos al final de la espiral, como se observa en la figura 12(a) y 12(c).

El potencial más profundo está asociado a la configuración del electrón y la impureza donadora en el mismo semicírculo, por lo tanto la posición de la impureza donadora determina el lugar de su formación, cuando la impureza donadora se fija en otro punto los mínimos se trasladan junto con la impureza, como es observado en la figura 12; los potenciales en la figura corresponden a la impureza donadora localizada en el inicio, en el medio y al final de la espiral, en el orden respectivo.

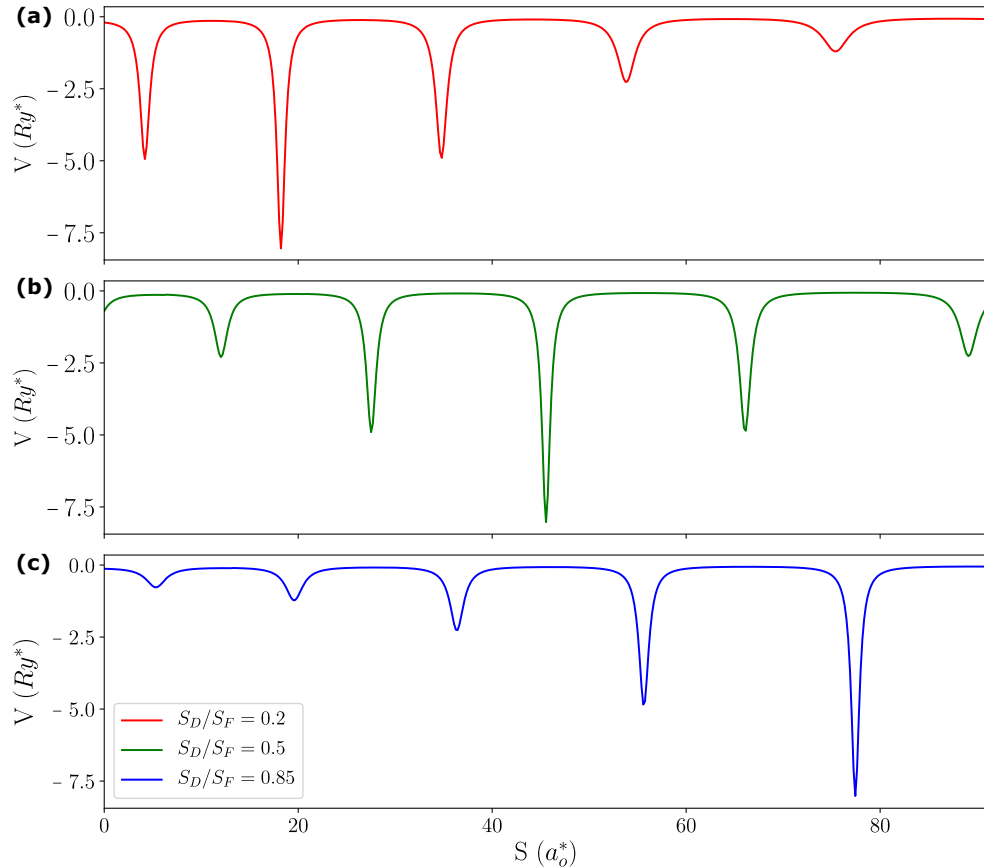


Figura 12: Potencial efectivo a lo largo de la coordenada tangencial para diferentes posiciones de la impureza. Parámetros de la espiral: $R_o = 2a_o^*$ y $\Delta R = 0.2a_o^*$

Estados energéticos

En la figura 13 se muestra el espectro energético de una impureza donadora en dos QW enrollados con un radio de curvatura inicial R_o diferente. Claramente se observa cómo el estado base depende muy poco de la posición de la impureza, sin embargo hay un ligero aumento en la energía ocasionado por el pequeño incremento del radio de curvatura a medida que la impureza se acerca al final de la espiral.

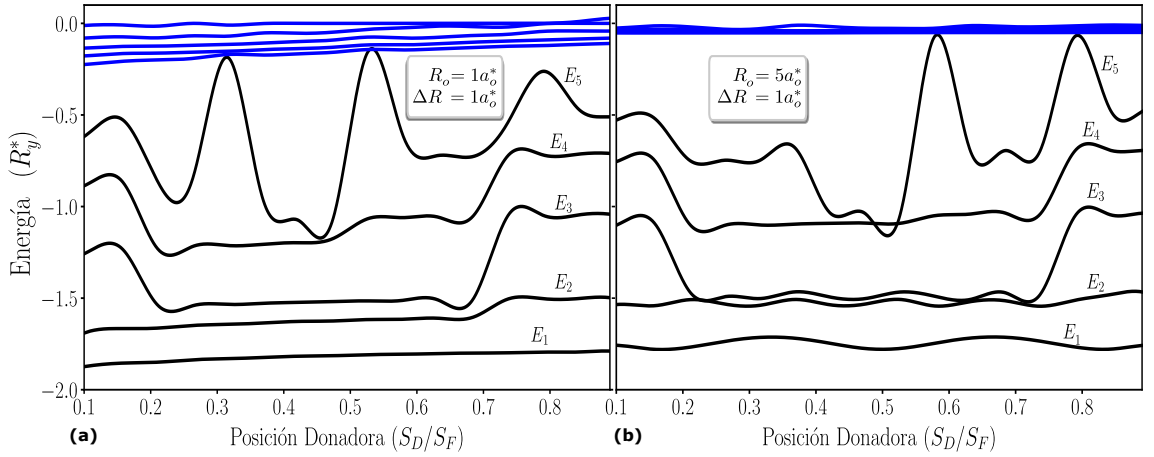


Figura 13: Estados energéticos de una impureza donadora colocada en un QW enrollado, para dos radios iniciales diferentes en función de la posición la impureza.

También se observa que los niveles energéticos parecen estar separados en dos grupos (ver figura 13): Los cinco niveles más bajos, color negro, corresponden a estados fuertemente ligados con energías de brecha apreciables, mientras que los niveles con energías cercanas a cero, color azul, corresponden a estados débilmente ligados con energías de brechas despreciables. A pesar de la diferencia en el parámetro inicial R_o , se puede observar una similitud general de la dependencia energética con solo una diferencia esencial: las energías en la figura 13(b) son más altas que las energías en la figura 13 (a), este hecho se puede explicar comparando las curvas de potencias, ya que, los QWs en la espiral con $R_o = 5a_0^*$ son notablemente más estrechos a comparación de la espiral con $R_o = 1a_0^*$. (Ver figura 14)

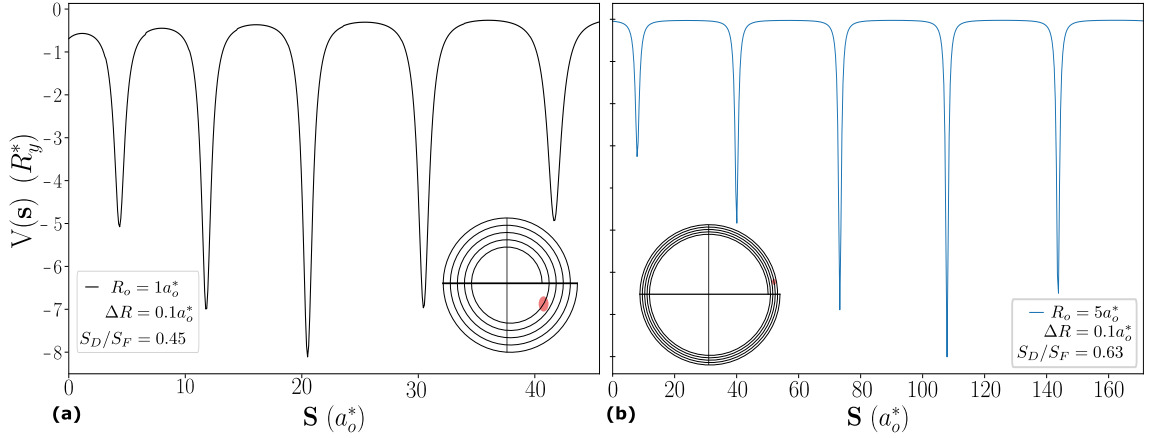


Figura 14: Potencial efectivo para dos espirales de diferentes parámetros y diferente localización de la impureza donadora.

Densidad de Estados

Las brechas entre las energías de la parte superior del espectro, correspondiente a los estados del electrón localizados en cada semicírculo lejos de la posición de la impureza donadora, son bastante pequeñas, por lo tanto, es conveniente su descripción con la visualización de la densidad de estados (DOS), $\rho(E)$. Una vez el espectro es encontrado mediante la solución del problema de eigenvalores (2.3.8), la DOS se calcula con la siguiente expresión:

$$\rho(E) = \sum_k \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(E - E_k)^2 + \Gamma^2} \quad (3.1.3)$$

donde Γ es el ancho de línea fenomenológico para el modelo de *broadening Lorentzian*.

En la figura 15 se muestran las curvas de la DOS, las cuales ilustran su evolución sucesiva para diferentes posiciones de la impureza donadora con radios de curvatura R_o e incrementos ΔR diferentes.

Se observa que la mayoría de curvas de la DOS en las figuras 15(a), 15(b) y 16(a) tienen 5 picos, correspondientes al número de estados ligados; curiosamente este número es igual al número de vueltas de la espiral, lo cual es acorde con los resultados obtenidos por Ortix and J. [2010] para un electrón. Sin embargo es notable la diferencia cuando un electrón interactúa con la impureza; en el caso en que el potencial efectivo es más estrecho (mientras R_o es mayor que la separación entre cada giro de la espiral) los niveles energéticos suben y se presentan degeneraciones en el sistema, lo cual provoca que la DOS aumente en el valor de energía de la degeneración y el número de picos disminuya. Lo anterior se observa en las figuras

15(a) (cuando la posición de la impureza es $S_D/S_F = 0.2$ y $S_D/S_F = 0.5$, y la espiral tiene un radio inicial de $R_o = 5a_o^*$) y 15(b) (cuando la impureza se encuentra en $S_D/S_F = 0.5$ y la espiral tiene un incremento de $\Delta R = 0.2a_o^*$).

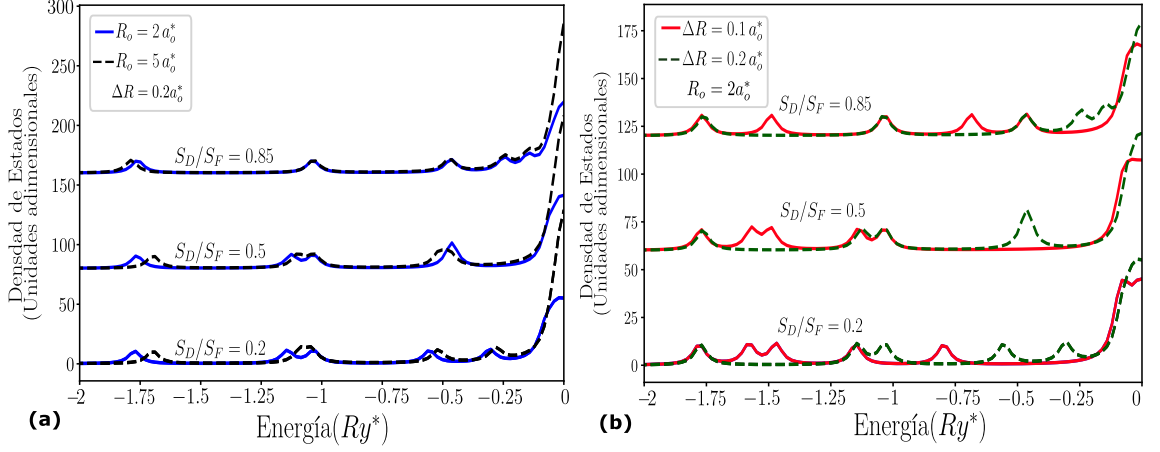


Figura 15: Densidad de estados electrónicos para una impureza donadora en diferentes posiciones dentro de un QW enrollado en espiral.

Adicionalmente en la figura 16 se compara la DOS para 3 posiciones de la impureza donadora a lo largo de la espiral con su respectivo espectro energético. Los picos en las curvas de la DOS son equivalentes al valor de cada nivel energético del espectro, como el estado base depende muy poco de la posición de la impureza el primer pico de la DOS para las diferentes posiciones S_D/S_F cambia muy poco. Caso contrario ocurre en los estados excitados más altos, donde los picos presentan un desplazamiento hacia la derecha hasta llegar al espectro continuo donde se alcanza una mayor densidad electrónica.

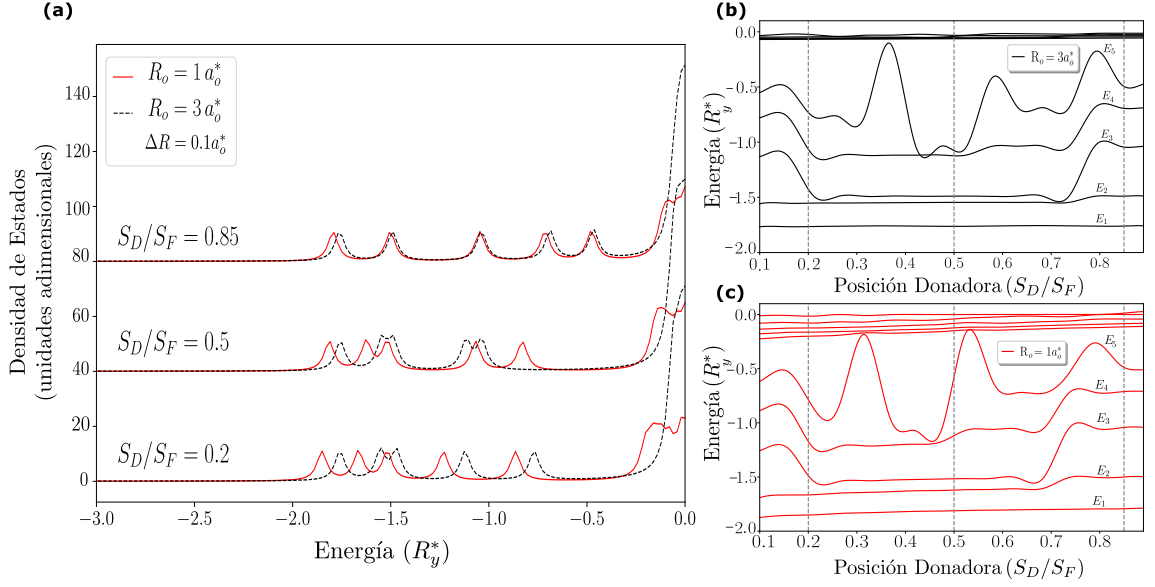


Figura 16: (a) Densidad electrónica de estados para tres posiciones de la impureza donadora, Espectro energético en función de la posición de la impureza a lo largo de espiral para: (b) $R_o = 3a_o^*$ y (c) $R_o = 1a_o^*$

3.2 IMPUREZA DONADORA CONFINADA EN UN QW ENROLLADO EN ESPIRAL DE ARQUÍMEDES

3.2.1 Geometría de la Espiral de Arquímedes

La dependencia de las coordenadas polares para una espiral de Arquímedes en el plano $x - y$ está dada por la fórmula

$$r(\varphi) = a + \left(\frac{b}{2\pi}\right)\varphi, \quad 0 < \varphi < \varphi_F = 2\pi n_F; \quad n_F = 1, 2, 3, \dots \quad (3.2.1)$$

Aquí n_F es el número total de giros de la espiral desde el punto inicial hasta el punto final del ángulo polar φ_F . Las dependencias de las coordenadas cartesianas con las coordenadas polares en este caso son:

$$\begin{aligned} x(\varphi) &= (a + b\varphi/2\pi) \cos \varphi \\ y(\varphi) &= (a + b\varphi/2\pi) \sin \varphi \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

La representación esquemática de un corte horizontal de un QW enrollado alrededor del eje z en una espiral definida por la ecuación (3.2.1), se muestra en la siguiente figura

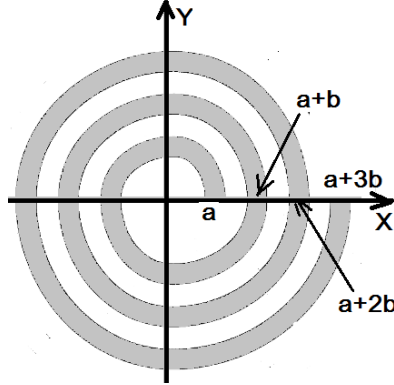


Figura 17: Representación esquemática del corte horizontal de un QW enrollado en espiral de Arquímedes alrededor de eje Z

Sin embargo, para hacer uso de las coordenadas naturales se debe reemplazar el ángulo polar φ por la longitud de arco s , por medio de la relación:

$$s(\varphi) = \int_0^{\varphi} R_s(\varphi) d\varphi, \quad (3.2.3)$$

el radio de curvatura de la espiral en función del ángulo polar se puede encontrar de la siguiente manera:

$$R_s(\varphi) = \frac{ds(\varphi)}{d\varphi} = \sqrt{\left(a + \frac{b}{2\pi}\varphi\right)^2 + \left(\frac{b}{2\pi}\right)^2}. \quad (3.2.4)$$

Con el objetivo de utilizar como variable independiente la longitud de arco s en lugar del ángulo polar φ , se encuentran las expresiones que relacionan las coordenadas cartesianas en (3.2.2) y el radio de curvatura en (3.2.4) directamente con la longitud de arco s . Para obtener estas dependencias de manera explícita se calculan 20 longitudes de arcos para 20 ángulos diferentes entre 0 y $2\pi n_F$

$$s_i = s(\varphi_i) = \int_0^{\varphi_i} \sqrt{\left(a + \frac{b}{2\pi}\varphi\right)^2 + \left(\frac{b}{2\pi}\right)^2} d\varphi; \quad (3.2.5)$$

$$\varphi_i = h i, \quad h = \frac{2\pi n_F}{20}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, 20.$$

Una vez encontrada los diferentes valores de $\varphi_i = \varphi(s_i)$, donde $i = 1, 2, \dots, 20$. se puede definir una función inversa $\varphi = \tilde{\varphi}(s)$ como un polinomio interpolante usando splines cúbicos. Además se definen otras dependencias importantes, las cuales son necesarias para hallar la expresión del Hamiltoniano de una impureza confinada en un QW enrollado en una espiral de Arquímedes,

$$\tilde{R}(s) = \sqrt{\left(a + \frac{b}{2\pi}\tilde{\varphi}(s)\right)^2 + \left(\frac{b}{2\pi}\right)^2} \quad (3.2.6a)$$

$$\tilde{r}(s) = a + \frac{b}{2\pi}\tilde{\varphi}(s) \quad (3.2.6b)$$

$$\tilde{x}(s) = \left[a + \frac{b}{2\pi}\tilde{\varphi}(s)\right] \cos \tilde{\varphi}(s) \quad (3.2.6c)$$

$$\tilde{y}(s) = \left[a + \frac{b}{2\pi}\tilde{\varphi}(s)\right] \sin \tilde{\varphi}(s). \quad (3.2.6d)$$

Los resultados de la interpolación del ángulo polar φ en función de la longitud de arco s , se muestran en la figura 18 para el caso de una espiral de Arquímedes con los parámetros $a = b = 2a_0^*$ y con el número total de giros igual a $n_f = 5$, se calculo se realiza para 20 valores de $\tilde{\varphi}(s)$; esta interpolación se utiliza en todos los cálculos. En la misma figura se muestra la variación del radio de curvatura $R_s(s)$ a lo largo de la espiral y se calcula usando la fórmula (3.2.6a).

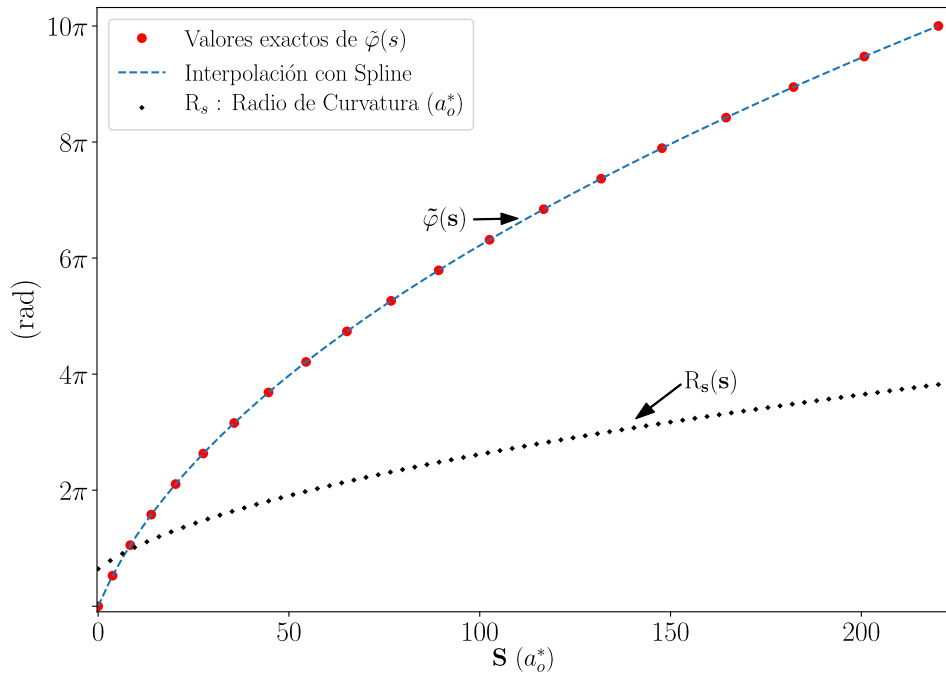


Figura 18: Variables geométricas $\tilde{\varphi}$ y R_s como funciones de la longitud de arco s .

En la figura 19 se presenta un gráfico similar al anterior pero esta vez para las coordenadas cartesianas, obtenidas a partir de las fórmulas (3.2.6c) y (3.2.6d). Se observa el carácter oscilatorio de las coordenadas cartesianas debido a su dependencia con la amplitud $a + b/2\pi\tilde{\varphi}(s)$, las oscilaciones crecen sucesivamente a lo largo de

la espiral; la figura 19 bosqueja la dependencia de \mathbf{x} , \mathbf{y} con \mathbf{s} , la espiral inicia en $x = 2$ y en $y = 0$ lo cual es acorde con el parámetro inicial $a = 2a_o^*$.

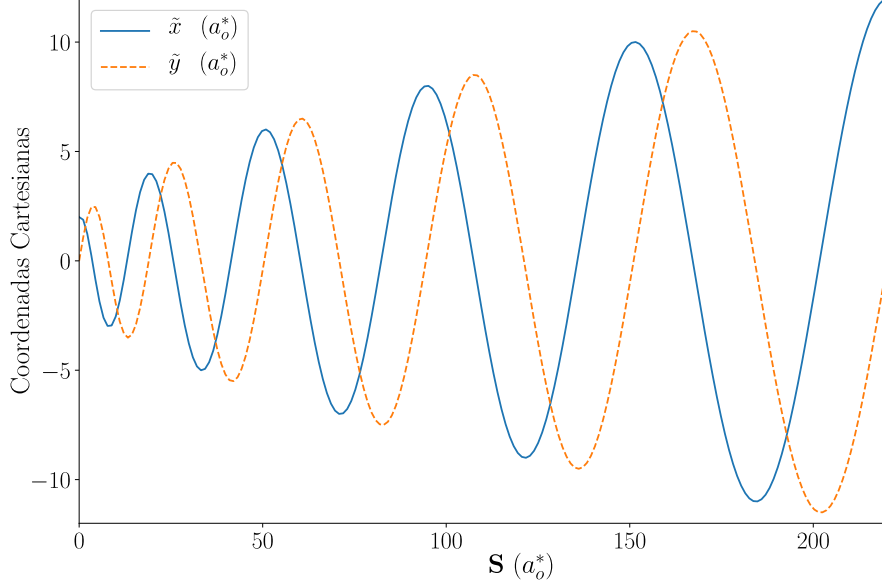


Figura 19: Coordenadas cartesianas en función de la longitud de arco. $a = b = 2a_o^*$

3.2.2 Potencial efectivo de una impureza donadora confinada en un QW enrollado en una espiral de Arquímedes

Se considera el caso donde la impureza donadora se ubica en la posición $Z_D = 0$ que corresponde a la mitad de la altura del nanotubo, la coordenada z varía dentro del intervalo $(-L/2, L/2)$ y $L \rightarrow \infty$. Las relaciones (2.3.9) y (3.2.6) permiten escribir la ecuación de Schrödinger para una impureza donadora como:

$$-\frac{\partial^2 \psi(s, z)}{\partial s^2} - \frac{\partial^2 \psi(s, z)}{\partial z^2} + V(s, z)\psi(s, z) = E\psi(s, z); \quad (3.2.7)$$

$$-L/2 < z < L/2, \quad 0 < s < s_F$$

aquí el potencial efectivo bidimensional $V(s, z)$ es

$$V(s, z) = \frac{\pi^2}{d_s^2} - \frac{1}{4R_s^2(s)} - \frac{2}{z_{eD}} + \alpha F[\tilde{x}(s) \cos \tilde{\varphi} + \tilde{y}(s) \sin \tilde{\varphi}] \quad (3.2.8)$$

donde z_{eD} es la distancia entre la donadora y el electrón excesivo

$$z_{eD} = \sqrt{[\tilde{x}(s) - \tilde{x}(s_D)]^2 + [\tilde{y}(s) - \tilde{y}(s_D)]^2 + z^2} \quad (3.2.9)$$

A continuación en la figura 20, se muestran dos ejemplos de la energía potencial en el plano $z = 0$, uno es el caso sin campo eléctrico y el otro cuando F corresponde a 2 kV/cm.

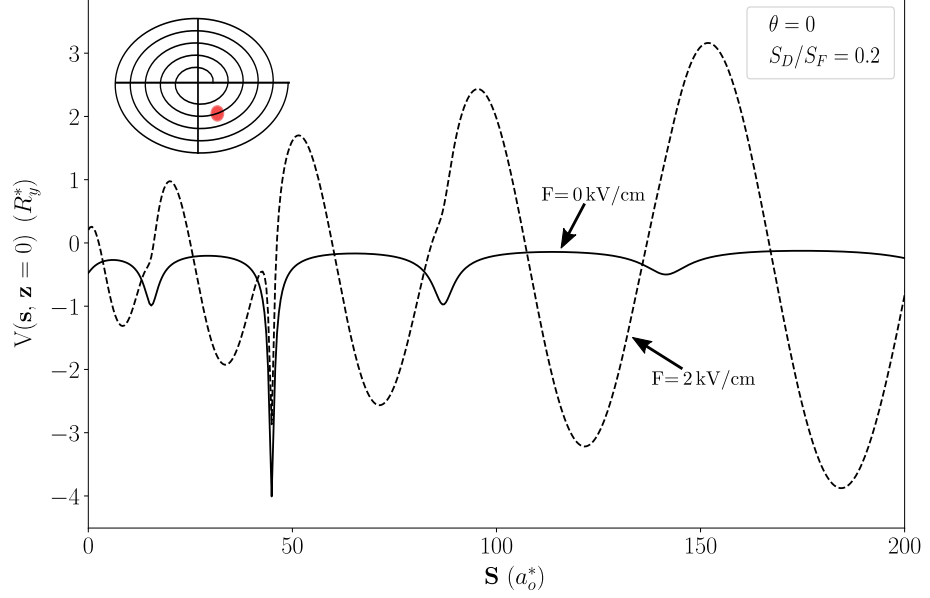


Figura 20: Potencial efectivo de una donadora ubicada al inicio de la espiral con parámetros $a = b = 2a_o^*$ y $n_F = 5$ para los valores de campo eléctrico $F = 0$ kV/cm y $F = 2$ kV/cm

Se puede observar en la figura 20, que las curvas de potencial tienen un mínimo bastante particular, ubicado aproximadamente en $s \approx 45a_o^*$, éste mínimo es mucho más profundo y estrecho comparado con los otros, y corresponde a los puntos más cercanos a la impureza que están dentro de la misma vuelta donde se localiza la donadora. Cuando el campo eléctrico es cero hay tres mínimos adicionales, todos corresponden a los puntos más cercanos a la posición de la impureza (S_D), pero esta vez los puntos pertenecen a las vueltas adyacentes a la vuelta donde se encuentra la donadora en la espiral. Está claro que en este caso la energía del estado base, correspondiente a la localización del electrón en el mínimo más profundo, debe estar más separada de los estados excitados localizados en los otros mínimos poco profundos.

Por otro lado, la curva de potencial se altera considerablemente cuando se aplica un campo eléctrico ($F = 2$ kV/cm) en dirección horizontal puesto que aparecen mínimos adicionales que son más profundos y más anchos; esta nueva configuración permite al electrón en el estado base estar localizado en uno de los nuevos mínimos con una localización diferente al caso anterior. De esta manera, la aplicación de un campo externo debe afectar significativamente las propiedades espectrales de una donadora

en una espiral en dos aspectos: en primer lugar, el campo eléctrico podría eliminar la amplia brecha entre el estado base y los estados excitados, típica para potenciales electrostáticos, haciendo la distribución de la densidad de estados más homogénea; en segundo lugar, se puede esperar que la aplicación de un campo eléctrico produzca una polarización excesiva de la donadora ocasionando un salto del electrón a otra de las alas de la espiral. Estos dos efectos se analizarán en las siguientes secciones.

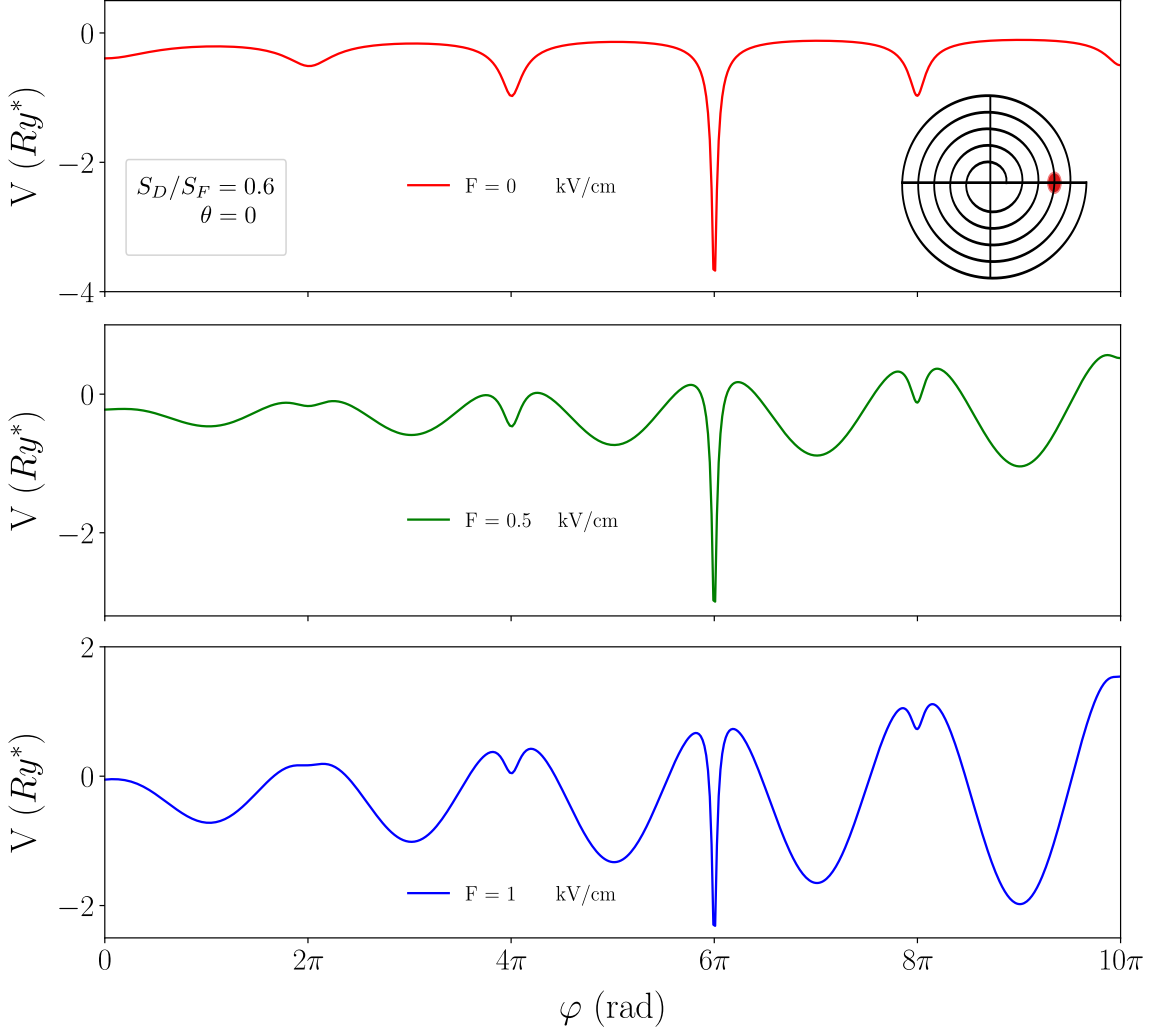


Figura 21: Potencial efectivo de una donadora cercana al final de la espiral ($S_D/S_F = 0.6$) con parámetros $a = b = 2a_o^*$ y $n_F = 5$ para tres valores del campo eléctrico.

Un cambio similar sufre el potencial efectivo cuando la donadora se localiza cerca del final de la espiral, donde el radio de curvatura es grande. En la figura 21 se muestra el cambio de la energía potencial en el plano $z = 0$ para una donadora situada en $S_D/S_F = 0.6$ de la longitud total de la espiral, cuando el campo eléctrico se incrementa sucesivamente desde 0 kV/cm hasta 1 kV/cm.

3.2.3 Espectro energético de una impureza donadora confinada en un QW enrollado en una espiral de Arquímedes

Los resultados anteriores muestran que el potencial del electrón excesivo, procedente de una donadora, depende fuertemente de tres factores: de la geometría de la espiral (de manera similar a los QW enrollados en una espiral construida por semicircunferencias, ya que la energía potencial depende de los parámetros iniciales y estos determinan la predominancia de la curvatura sobre el potencial), de la posición de la impureza donadora y de la intensidad del campo eléctrico aplicado. La variación de estos tres factores debe afectar esencialmente las propiedades espectrales de la impureza.

Para encontrar el espectro energético se debe resolver la ecuación de onda bidimensional (3.2.7) con el potencial dado por la expresión (3.2.8). La ecuación diferencial(EDP) se resuelve numéricamente utilizando el método espectral, i.e., se escoge una función de prueba para escribir la EDP como una suma, finalmente se obtienen los coeficientes de esta suma de tal forma que satisfagan la solución de la ecuación, los coeficientes se encuentran diagonalizando la ecuación matricial (.0.10) o (.0.20). La descripción del método de expansión en doble serie de Fourier se expone en el apéndice I.

Resultados de los cálculos numéricos.

En ausencia de un campo eléctrico externo, la mayor contribución en la energía potencial se debe a la atracción entre el electrón y la impureza donadora. La menor separación entre ellos corresponde a la energía negativa más baja. Por esta razón, el mínimo principal corresponde a la posición del electrón en la vecindad de la posición de la donadora, en la misma vuelta de la espiral donde ésta se encuentra. En las figuras 20 y 21 se observan los mínimos adicionales correspondientes a las posiciones del electrón más cercanas a la donadora, pero esta vez a las vueltas adyacentes de la espiral. Estos mínimos se hacen cada vez menos profundos (ver figuras 20 y 21) cuando la separación entre las vueltas adyacentes de la espiral es mayor.

El parámetro que da cuenta de la separación entre las vueltas de la espiral de Arquímedes, definida con la ecuación (3.2.1), es el parámetro b ; entre mayor sea b , más rápido aumenta la separación entre las vueltas adyacentes de la espiral, de modo que los pozos de potencial situados en las vueltas vecinas a la vuelta donde se ubica la impureza, se hacen menos profundos. En la figura 22 se muestra al lado izquierdo dos curvas de potencial con dos parámetros distintos de b , $b = 2a_o^*$ y $b = 0.5a_o^*$; éstos gráficos ilustran claramente como la disminución de la separación entre las vueltas de la espiral produce un incremento de la profundidad de los mínimos, a los que se llamarán mínimos “*satelitales*”. Este cambio en las curvas de potencial se refleja

también en la alteración del espectro energético, presentado al lado derecho de la figura 22 que muestra los niveles energéticos de la impureza donadora en función de la posición de la impureza, a lo largo de de la espiral.

En el primer caso, cuando $b = 2a_o^*$ el mínimo de potencial principal es mucho más grande que los mínimos “satelitales”, y por eso la brecha entre las energías del estado base y los estados excitados es muy grande comparada con el caso $b = 0.5(a_o^*)$. La energía del estado base depende de la posición de la impureza muy débilmente, mientras que las energías de los estados excitados sufren cambios más notables solo cuando la posición de la donadora se acerca a uno de los extremos de la espiral. El espectro cambia notablemente cuando el parámetro b de la espiral se disminuye y se hace igual a $b = 0.5a_o^*$; las brechas entre los niveles energéticos se estrechan y las dependencias de todas energías (excepto la de los dos niveles más bajos) con la posición de la impureza, son ahora perceptibles.

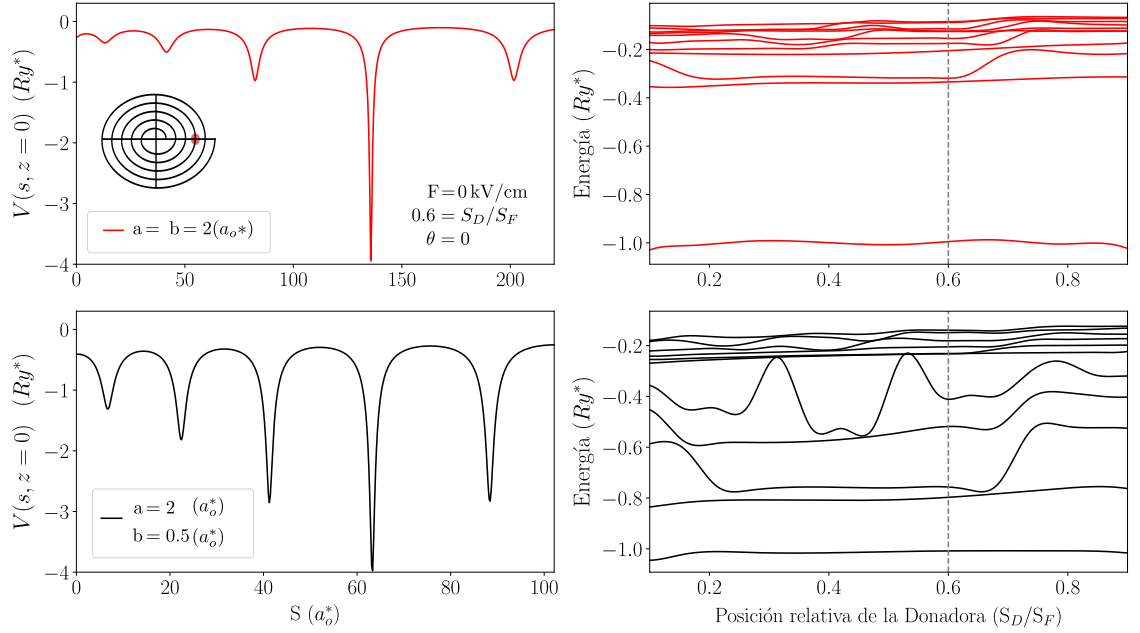


Figura 22: Lado izquierdo: Potencial efectivo con parámetros geométricos distintos y $S_D/S_F = 0.6$ para ambos parámetros. Lado derecho: Espectro energético en función de la posición de donadora.

El espectro energético de la donadora y su dependencia de la posición de la impureza, cambian radicalmente al aplicar un campo eléctrico externo F . Como se puede observar en la figura 20, la aplicación de un campo eléctrico cambia esencialmente la curva de potencial a lo largo de la espiral, induciendo unos mínimos adicionales (satelitales), cuyas profundidades y anchos se incrementan sustancialmente a medida que la contribución del campo eléctrico crece. Este cambio del potencial produce una transformación en la dependencia de los niveles energéticos

con la posición de la donadora mostrados en figura 22 para el caso $F = 0$. El espectro energético en función de la posición de la impureza S_D/S_F para dos campos eléctricos aplicados a lo largo de eje x se presentan en figura 23

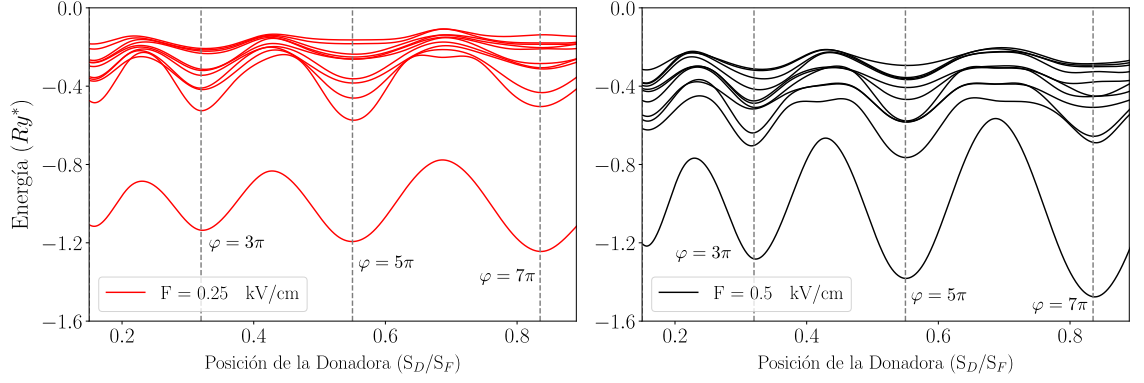


Figura 23: Espectro energético en función de la posición de la donadora, para dos campos eléctricos a lo largo de eje x ($\theta = 0$).+ Parámetros de la espiral $a = b = 2a_o^*$.

Cuando el campo eléctrico está dirigido a lo largo del eje x , los aumentos de la energía de potencial como las disminuciones más significativas en presencia de un campo eléctrico externo, corresponden a las posiciones del electrón ubicados sobre el eje x . En la espiral de Arquímedes, las máximas disminuciones en las energías de potencial corresponden a las posiciones del electrón con ángulos polares de $\varphi_k = (2k + 1)\pi$, mientras que los máximos aumentos se producen para las posiciones del electrón con ángulos polares de $\varphi_k = 2\pi k$, para ambos casos $k = 0, 1, 2 \dots$

Por esta razón, las energías de todos los niveles energéticos de una donadora confinada en una espiral de Arquímedes suben al máximo cuando su ubicación corresponde a ángulos polares de $\varphi_k = 2\pi k$, y bajan a los mínimos cuando su ubicación corresponde a los ángulos polares de $\varphi_k = (2k + 1)\pi$, donde $k = 0, 1, 2 \dots$

En la figura 23 se muestran distintos espectros energéticos en función de la posición de la donadora en una espiral con los parámetros de $a = b = 2a_o^*$ para dos campos eléctricos aplicados a lo largo de eje x ($\theta = 0$). Se observan las oscilaciones periódicas de los niveles energéticos tanto del estado base como de los estados excitados, los mínimos y máximos de las energías de la donadora están en completa concordancia con los mínimos y máximos de las curvas de potencial.

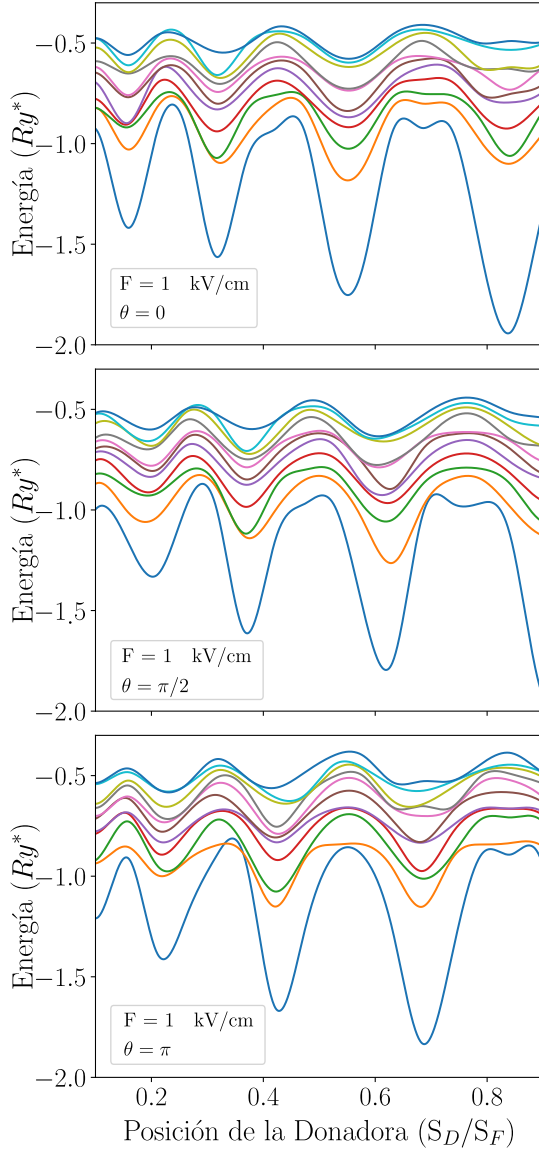


Figura 24: Niveles energéticos para tres diferentes direcciones del campo eléctrico.

Adicionalmente, en la figura 24 se presentan los resultados al efecto de cambiar la dirección del campo eléctrico, sobre las dependencias de las energías de los diferentes niveles energéticos en función de la posición de la donadora. Se puede ver un desplazamiento sustancial de los mínimos y máximos de las energías con el incremento del ángulo entre la dirección de campo eléctrico desde 0 hasta π , cuando el ángulo alcanza el valor de π las posiciones de los mínimos y los máximos se intercambian.

Densidad de Estados

Como evidencian los gráficos anteriores, las brechas entre los niveles energéticos de los estados más altos del espectro electrónico, correspondientes a las configuraciones en las cuales el electrón se encuentra con mayor probabilidad en una de las alas lejanas a la donadora, son muy pequeñas. De tal manera, que la descripción de esta parte del espectro energético a través de la densidad de estados (DOS) es más apropiada. Una vez los niveles energéticos de la donadora son encontrados mediante la solución de la ecuación de Schrödinger, la DOS puede ser encontrada usando nuevamente la expresión

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \sum_k \frac{\Gamma}{(E - E_k)^2 + \Gamma^2}, \quad (3.2.10)$$

aquí Γ es el ancho de banda natural de las líneas espectrales individuales, considerado en el cálculo numérico como un parámetro fenomenológico asumiendo que estas líneas tienen una forma Lorentziana.

En la figura 25, se muestran las curvas de la DOS para diferentes valores del campo eléctrico, en un QW enrollado en forma de espiral de Arquímedes, para dos configuraciones diferentes, y con la posición fija de $S_D/S_F = 0.2$. En la espiral con

parámetros $a = b = 1(a_o^*)$, la separación entre las vueltas adyacentes es dos veces más pequeña que en la espiral con parámetros $a = b = 2(a_o^*)$, lo cual se refleja notablemente en la diferencia de los gráficos de la DOS en la figura 25.

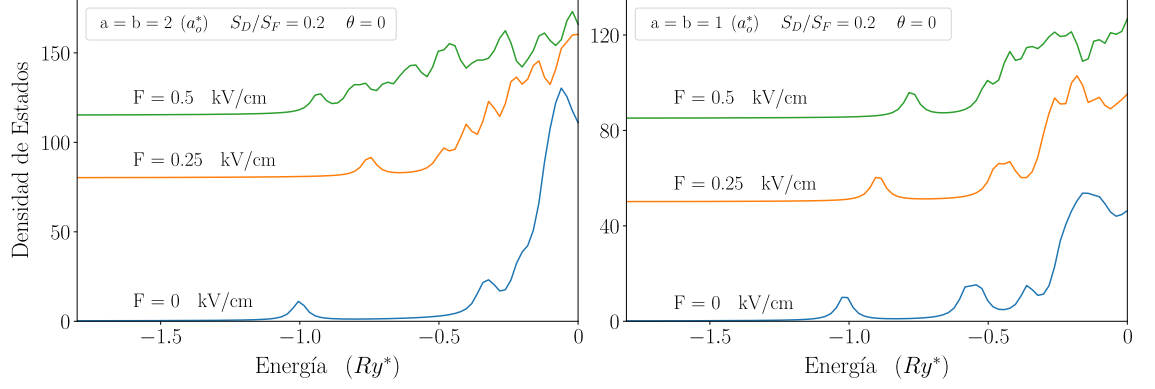


Figura 25: Densidad de estados de donadoras en QWs para dos espirales con parámetros $a = b = 2(a_o^*)$ y $a = b = 1(a_o^*)$ y tres valores diferentes del campo eléctrico aplicados a lo largo de eje x ($\theta = 0$)

Entre las gráficas de la densidad de estados se evidencian cambios significativos con un incremento del campo eléctrico, al igual que, con la variación de los parámetros geométricos. Cuando las vueltas adyacentes en la espiral son distantes (ver figura 25: lado izquierdo), los cambios de la DOS producidos por el campo eléctrico son primordiales, no obstante, cuando las vueltas de la espiral están más juntas (ver figura 25: lado derecho) los cambios en la DOS, por la variación del campo eléctrico, no son tan notables. Para ambas estructuras en ausencia de un campo eléctrico ($F = 0$ kV/cm), la DOS tiene solo un pico correspondiente al estado base, claramente bien separado de los estados excitados que se forman en la DOS de una banda continua. Cuando el campo eléctrico aumenta, la brecha entre éste pico individual y la banda de los estados excitados disminuye sucesivamente hasta que en $F = 1$ kV/cm, la brecha prácticamente desaparece.

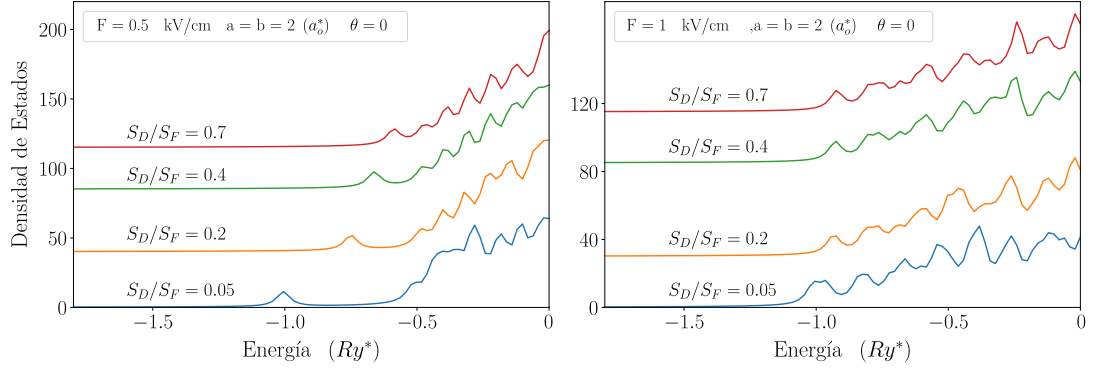


Figura 26: Densidad de estados de donadoras en QWs, en una espiral de parámetros $a = b = 2(a_o^*)$ y con diferentes valores de la posición de la donadora (S_D/S_F).

En la figura 26, se muestran las curvas de la DOS para diferentes posiciones de la donadora, en presencia de un campo eléctrico con dos intensidades diferentes. Para ambos valores del campo eléctrico, $F = 0.5 \text{ kV/cm}$ y $F = 1 \text{ kV/cm}$, ocurre un desplazamiento sucesivo hacia el lado derecho del umbral de la DOS a medida que, la posición de donadora se aleja del punto inicial de la espiral.

Como diferencia al caso $F = 0.5 \text{ kV/cm}$, la brecha entre el pico correspondiente al estado base y la banda de los estados excitados en las curvas de la DOS para $F = 1 \text{ kV/cm}$, se mantiene casi igual para todas posiciones de la impureza. Estos resultados demuestran que la DOS, es muy sensible tanto a la variación del campo eléctrico externo, como al cambio de la posición de la impureza.

3.2.4 Polarizabilidad de una donadora confinada en QW enrollado en una espiral

Anteriormente se ha ilustrado cómo las brechas de energía entre el estado base y los estados excitados de una donadora confinada en un QW enrollado en una espiral, pueden ser controladas mediante la aplicación de un campo eléctrico externo. En ausencia de campo eléctrico, el electrón en el estado base se encuentra con mayor probabilidad, en la misma vuelta donde está localizada la donadora; caso contrario ocurre en los estados excitados donde el electrón se encuentra principalmente, en una de las vueltas adyacentes de la posición de la espiral. Al incrementar la intensidad del campo eléctrico externo, la brecha energética entre el estado base y los estados excitados, como se ha visto anteriormente, disminuye y favorece cada vez más la mezcla de los estados.

Mientras se incrementa el campo eléctrico, las energías correspondientes al estado base y el estado excitado se hacen iguales, y las configuración del estado base y su momento dipolar cambian bruscamente.

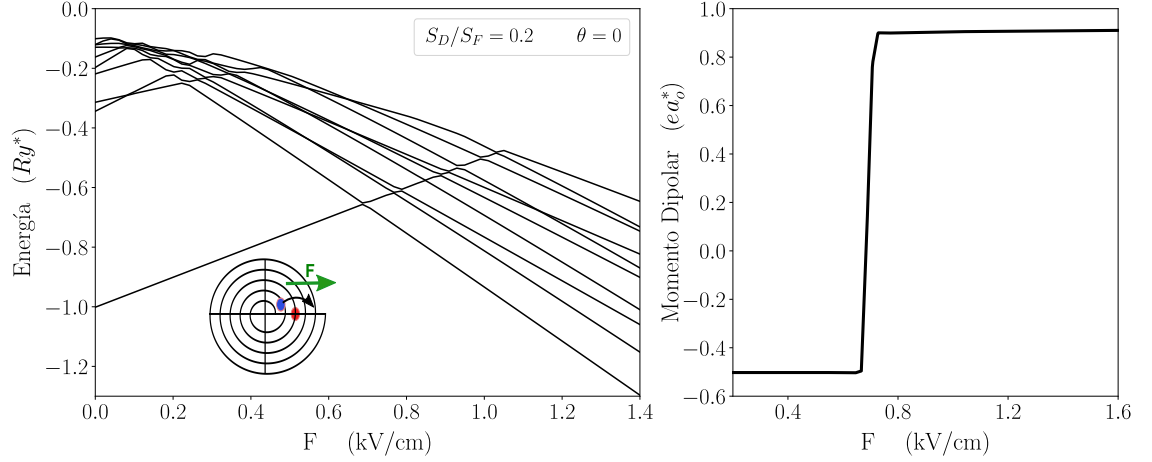


Figura 27: Energía y momento dipolar para el estado fundamental en función del campo eléctrico aplicado a lo largo del eje x .

En la figura 27, se muestran las energías de los primeros diez estados y el momento dipolar de la donadora en el estado fundamental, como funciones del campo eléctrico aplicado a lo largo de eje x . Se observa en la figura que las energías de todos los niveles varían linealmente, algunas con pendientes positivas y otras con pendientes negativas, por esta razón éstas dependencias pueden verse afectadas por múltiples intersecciones.

Particularmente, dos dependencias correspondientes al estado base y al primer estado excitado, se cruzan en el punto crítico $F_c \approx 0.7 kV/cm$. Para entender la naturaleza de esta intersección y el reordenamiento de los niveles energéticos (como consecuencia de la intersección), hay que tener en cuenta la diferencia entre las configuraciones electrónicas del estado base y el primer estado excitado. En un QW enrollado en espiral, el mínimo principal del potencial está situado en la vecindad de la posición de la impureza, éste hecho define la región de localización del electrón en el estado base; no obstante, existen otros mínimos menos profundos en las vueltas de espiral adyacentes a la localización de la donadora.

El electrón en los estados excitados se encuentra con mayor probabilidad cerca de uno de estos mínimos “satelitales” ya que la energía en estos estados es superior a la energía del estado base. Cuando se introduce el campo eléctrico F , las energías de potencial en estos mínimos disminuyen en un valor de $\Delta V = -2F\Delta x$, donde Δx es la distancia entre dos mínimos. Cuando el campo eléctrico incrementado supera el valor crítico F_c , los mínimos adicionales se hacen más profundo que el mínimo principal y los niveles energéticos se invierten.

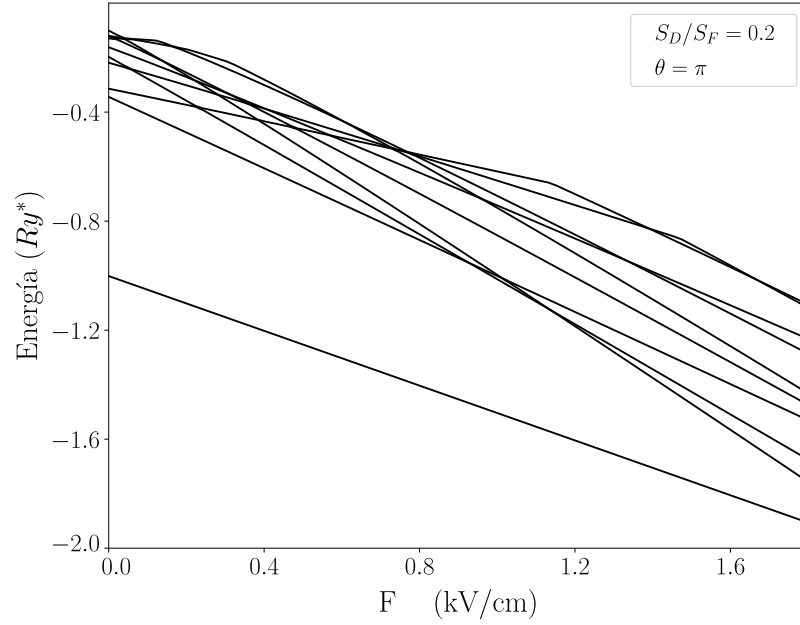


Figura 28: Densidad de estados de donadoras en QWs en una espiral, con parámetros $a = b = 2(a_o^*)$ y para diferentes valores de la posición de la donadora (S_D)

En la esquina inferior izquierda de la figura 27(espiral), se ilustra esquemáticamente el cambio que sufre la configuración del estado base cuando el campo eléctrico supera el valor crítico. Un electrón bajo la influencia de un campo eléctrico cuyo valor es más grande que F_c salta hacia otra vuelta de la espiral, produciendo un cambio de signo del momento dipolar. En la figura 28 se presenta el gráfico del momento dipolar del estado base de una donadora, como función del campo eléctrico externo, y es calculada como la primera derivada respecto a F , $-\frac{\partial E}{\partial F}$, en unidades adimensionales. Se puede ver que en el punto $F_c \approx 0.7$ el momento dipolar sufre una caída drástica y cambia su signo.

4. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se propone un método simple y eficiente que permite analizar el efecto del dopaje con impurezas donadoras sobre las propiedades espectrales de pozos cuánticos de GaAs enrollados en forma de espiral para dos geometrías distintas. También se estudió teóricamente los efectos causados por la variación de la curvatura y la posición de la impureza donadora, sobre el espectro energético y la densidad de estados electrónicos en presencia de un campo eléctrico externo. Como resultado se encontró que la curvatura de los pozos cuánticos enrollados afecta esencialmente el espectro energético de las impurezas donadoras; los cálculos demuestran una alta sensibilidad en la densidad de estados electrónicos a cambios estructurales y a la intensidad del campo eléctrico.

Asimismo se logró determinar que en estas estructuras el momento dipolar de la impureza donadora cae abruptamente y cambia su signo cuando el campo eléctrico supera un valor crítico. Este efecto está asociado a la posibilidad que el electrón excesivo salte entre las diferentes vueltas adyacentes de la espiral, generando un cambio en la estructura del sistema. A partir de este resultado se puede inferir que los nanotubos enrollados puedan utilizarse para fabricar materiales ferroeléctricos ya que con la aplicación de un campo eléctrico se induce una polarización eléctrica.

Por otro lado, la literatura de trabajos experimentales donde se analice el espectro energético de nanoestructuras semiconductores enrollados en espiral (rollep-up nanoestructures), dopados con impurezas donadoras es escasa, por lo tanto no fue posible comparar los resultados aquí obtenidos. Probablemente este hecho se asocie a que la tecnología actual aún no cuenta con técnicas de fabricación de películas delgadas que alcancen escalas del orden del radio de Bohr efectivo para el GaAs, o materiales alrededor de este valor $a_0^* \approx 10$ nm. Sin embargo como extensión a este trabajo sería interesante hacer estudios teóricos con materiales que cuenten con un radio de Bohr efectivo mayor; además considerar en el modelo aquí estudiado un grosor apreciable y un modelo de barreras finitas donde se pueden presentar efectos de tunelamiento por parte del electrón en las diferentes hojas de la espiral y se libere el movimiento en la dirección transversal de la película.

Divulgación de Resultados

Cabe destacar que los resultados de esta investigación fueron presentados como ponencias en dos congresos internacionales.

- Castro-Cárdenas, D.Y., Mikhailov, I.D. (Octubre, 2018). Shallow donor in spirally rolled-up quantum well. 6th National Conference of Physical Engineering – 1st International conference on Applied Physics, Engineering & Innovation. Congreso llevado a cabo en la ciudad de Bucaramanga, Colombia.
- García-Russi L. F., Castro-Cárdenas D. Y. and Mikhailov I. D. (Junio, 2019). Energies of donors in rolled-up quantum well in an electric field. 3rd International Conference on Applied Surface Science (ICASS 2019). Congreso llevado a cabo en la ciudad de Pisa, Italia.

Además un artículo fue publicado (ver referencia Castro-Cárdenas and I.D. [2019]) y otro que extiende los resultados aquí presentados se encuentra en proceso de edición y publicación.

BIBLIOGRAFÍA

- Arfken G. B., Weber H. J., and Harris F. E. Chapter 4 - tensors and differential forms. In *Mathematical Methods for Physicists (Seventh Edition)*, pages 205 – 249. Academic Press, seventh edition edition, 2013.
- Bruno and Latgé A. Quantum rings of arbitrary shape and non-uniform width in a threading magnetic field. *Phys. Rev. B*, 77:205303, May 2008.
- Cui C., Xue F., Wei H. J., and Li L.J. Two-dimensional materials with piezoelectric and ferroelectric functionalities. *npj 2D Materials and Applications*, 2:2–14, 2018.
- Cardona and Yu P.Y. *Electronic Properties of Defects. In: Fundamentals of Semiconductors. Graduate Texts in Physics*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.
- Castro-Cárdenas and Mikhailov I.D. Shallow donor in spirally rolled-up quantum well. *Journal of Physics: Conference Series*, 1247:012004, jun 2019.
- Cendula, Kiravittaya S, Mei Y. F., Deneke Ch., and Schmidt O. G. Bending and wrinkling as competing relaxation pathways for strained free-hanging films. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 79(8):1–4, 2009.
- Deneke Ch., Sigle W., Ulrike E., VanAken P. A., Schütz G., and Schmidt O.G. Interfaces in semiconductor/metal radial superlattices. *Applied Physics Letters*, 90(26):263107, 2007.
- Deneke Ch, Schumann J., Engelhard R., Thomas J., Müller, et al. Structural and magnetic properties of an InGaAs/Fe₃Si superlattice in cylindrical geometry. *Nanotechnology*, 20(4):045703, 2009. ISSN 0957-4484.
- Chen, Zhou Z, Deng Bingchen, Wu Z., Xia F., Cao Yi, Zhang Le, Wei Huang, Ning Wang, and Lin Wang. Electrically tunable physical properties of two-dimensional materials. *Nano Today*, 27:99 – 119, 2019. ISSN 1748-0132.
- González J D, Escorcía R, and Sierra-Ortega J. Donor impurity in nanotube with two GaAs/GaAlAs quantum wells: Magnetic field effects. 2009.
- González J. D., Gonzalez J.E., and Barba-Ortega J. Ligth-hole exciton in cylindrical microtube with two quantum wells. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 466, 2013.

- da Costa R. C. T. Quantum mechanics of a constrained particle. *Phys. Rev. A*, 23: 1982–1987, Apr 1981.
- Detlef H. *Quantum Materials – NanoScience and Technology*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 edition, 2010.
- Ferry D.K. *Semiconductors: Bonds and bands (IOP Expanding Physics)*. IOP Publishing Ltd, 2013.
- Garcia L. F., Mikhailov I. D., and Sierra-Ortega J. Magnetoelectric Effect in Type-II Quantum Cone Induced by Donor Impurity. *Journal of Nanomaterials*, 2016.
- Garcia L. F., Mikhailov I. D., and Paredes H. Effect of conduction band nonparabolicity on Aharonov-Bohm oscillations in n-type InAs/GaAs quantum ring. *Journal of Physics: Conference Series*, 935(1):0–6, 2017a.
- Garcia L. F., Gutiérrez W., and Mikhailov I. D. One-Electron Conical Nanotube in External Electric and Magnetic Fields. *Journal of Nanomaterials*, 2017b.
- Valavanis A. Harrison P. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. John Wiley & Sons, 4 edition, 2016.
- Vedernikov A. I. and Chaplik A. V. Two-dimensional electrons in spirally rolled-up quantum wells. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 90(2):397–399, 2000. ISSN 1063-7761.
- Deng J, Lu Xueyi, Liu L., Zhang L., and Schmidt O. G. Introducing Rolled-Up Nanotechnology for Advanced Energy Storage Devices. *Advanced Energy Materials*, 6(23), 2016.
- Geim A. K. and Grigorieva I. V. Van der Waals heterostructures. *Nature*, 499(7459): 419–425, 2013. ISSN 00280836.
- Jong H. K., Jae Hwan Jeong, Namwon Kim, Rakesh Joshi, and Gwan-Hyoung Lee. Mechanical properties of two-dimensional materials and their applications. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 52(8):083001, dec 2018.
- Kubota K., Vaccaro P. O., Ohtani N., Hirose Y., Hosoda M, and Aida T. Photoluminescence of gaas = algaas micro-tubes containing uniaxially strained quantum wells. 13:313–316, 2002.
- Friedland K.J., R. Hey, H. Kostial, A. Riedel, and K. H. Ploog. Measurements of ballistic transport at nonuniform magnetic fields in cross junctions of a curved two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 75:045347, 2007.

- Krause, Mocuta C., T. H. Metzger, Deneke Ch., and Schmidt O. G. Local structure of a rolled-up single crystal: An x-ray microdiffraction study of individual semiconductor nanotubes. *Phys. Rev. Lett.*, 96:165502, 2006.
- Zhigang L., Junfeng G., Zhang G., Cheng Y., and Zhang Y.W. From Two-dimensional Nano-sheets to Roll-up Structures: Expanding the family of Nanoscroll. *Nanotechnology*, 28, 2017.
- Grundmann M. *The Physics of Semiconductors: An Introduction Including Nanophysics and Applications*. Graduate Texts in Physics. Springer, 3rd ed. edition, 2016.
- Yonas T. M. and Ji Won S. Adhesion properties of 2d materials. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 52(36):364002, 2019.
- Mounet N. and others. Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds.
- Ortiz and Van Den Brink J. Effect of curvature on the electronic structure and bound-state formation in rolled-up nanotubes. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 81(16):2–6, 2010. ISSN 10980121. doi: 10.1103/PhysRevB.81.165419.
- Yuriy V. Pershin and Carlo Piermarocchi. Photovoltaic effect in bent quantum wires in the ballistic transport regime. *Phys. Rev. B*, 72:195340, Nov 2005.
- Gupta S., Shirodkar S. N., Kutana A., and Yakobson B. I. In pursuit of 2d materials for maximum optical response. *ACS Nano*, 12(11):10880–10889, 2018.
- Nakul S., Hua Q., Blick R. H., Klein L. J., Deneke C., and Schmidt O.G. Magnetotransport through two dimensional electron gas in a tubular geometry. *Applied Physics Letters*, 90(4):042101, 2007.
- Kipp T., Welsch H., Strelow Ch., Heyn Ch., and D. Heitmann. Optical modes in semiconductor microtube ring resonators. *Phys. Rev. Lett.*, 96:077403, 2006.
- Ullmann and Grasser T. Transformation: nanotechnology—challenges in transistor design and future technologies. *Elektrotechnik und Informationstechnik*, 134(7): 349–354, 2017.
- Vorobév, Friedland K.J., Kostial H., Hey R., Jahn U., Wiebicke E., Yukecheva Ju. S., and Prinz V. Ya. Giant asymmetry of the longitudinal magnetoresistance in high-mobility two-dimensional electron gas on a cylindrical surface. *Phys. Rev. B*, 75:205309, 2007.

- Wikipedia contributors. History of materials science — Wikipedia, the free encyclopedia, 2019. URL https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=History_of_materials_science&oldid=891195043. [Online; accesso 16-Agosto-2019].
- Dan Xia, Qingzhong Xue, Jie Xie, Huijuan Chen, Cheng Lv, Flemming Besenbacher, and Mingdong Dong. Fabrication of carbon nanoscrolls from monolayer graphene. *Small*, 6(18):2010–2019, 2010.
- Xiang, Inoue T., Zheng Y., Kumamoto A., Qian, et al. One-dimensional van der waals heterostructures. 2018.
- Xu, Xiang Wu, Gaoshan Huang, and Yongfeng Mei. Rolled-up nanotechnology: Materials issue and geometry capability. *Advanced Materials Technologies*, 4(1), 2019.
- Prinz V. Ya, Seleznev V. A., Gutakovsky A. K., Chehovskiy A. V., Preobrazhenskii V. V., Putyato M. A., and T. A. Gavrilova. Free-standing and overgrown InGaAs/GaAs nanotubes, nanohelices and their arrays. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 2000. ISSN 13869477.
- Guan Z., Chao-Sheng, Hu, Shuanglin, Shuang Ni, Jia Li, and Duan W. Tunable structural, electronic, and optical properties of layered two-dimensional c2n and mos2 van der waals heterostructure as photovoltaic material. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(6):3654–3660, 2017.
- Lai Z., Chen Y., Tan C., Zhang X., and Zhang H. Self-Assembly of Two-Dimensional Nanosheets into One-Dimensional Nanostructures. *Chem*, 1(1):59–77, 2016. ISSN 24519294. doi: 10.1016/j.chempr.2016.06.011.
- Zetian, Dastjerdi M. H.T., and Salehdzadeh O. Rolled-up semiconductor tube lasers and lasers based on two-dimensional atomic crystals. In *2015 IEEE Summer Topicals Meeting Series, SUM 2015*, 2015. ISBN 9781479974689.

ANEXOS

MÉTODO DE FOURIER PARA RESOLVER LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER 1D

La ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial de la siguiente forma

$$-\Phi''(x) + V(x)\Phi(x) = E\Phi(x); \quad 0 < x < L; \quad (.0.1)$$

Condiciones de frontera $\Phi(0) = \Phi(L) = 0$

Para usar el método de series de Fourier en el intervalo $(-L, L)$, las funciones $\Phi(x)$ y $V(x)$ se extienden en todo el dominio y deben satisfacer las siguientes condiciones:

$$V(-x) = V(x); \quad \phi(-x) = \phi(x). \quad (.0.2)$$

De acuerdo con estas condiciones se busca la solución de la ecuación .0.1 usando una expansión en series de Fourier las funciones $\Phi(x)$ y $V(x)\Phi$.

$$\Phi(x) = \sum_{m=1}^N c_m \sin \frac{\pi m x}{L}; \quad V(x) = \sum_{m=0}^N V_m \cos \frac{\pi m x}{L}; \quad (.0.3)$$

$$c_m = \frac{1}{L} \int_{-L}^L \Phi(x) \sin \frac{\pi m x}{L} dx; \quad (.0.4a)$$

$$V_m = \frac{1}{L} \int_{-L}^L V(x) \cos \frac{\pi m x}{L} dx; \quad (.0.4b)$$

$$V_0 = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L V(x) dx \quad (.0.4c)$$

Sustituyendo .0.3 y .0.4 en .0.1

$$\sum_{m=1}^N c_m \frac{\pi^2 m^2}{L^2} \sin \frac{\pi m x}{L} + \sum_{m'=0}^N V_{m'} \cos \frac{\pi m' x}{L} \times \sum_{m=1}^N c_m \sin \frac{\pi m x}{L} = E \sum_{m=1}^N c_m \sin \frac{\pi m x}{L} \quad (.0.5)$$

Multiplicando ambos lados de la igualdad por $\sin \frac{\pi m'' x}{L}$ e integrando sobre x de $-L$ hasta L uno puede obtener

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^N c_m \left(\frac{\pi m}{L} \right)^2 \underbrace{\int_{-L}^L \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi m'' x}{L} dx}_{I_1} + \sum_{\substack{m=1 \\ m'=0}}^N V_{m'} c_m \underbrace{\int_{-L}^L \cos \frac{\pi m' x}{L} \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi m'' x}{L} dx}_{I_2} \\ = E \sum_{m=1}^N c_m \underbrace{\int_{-L}^L \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi m'' x}{L} dx}_{I_1}, \end{aligned} \quad (.06)$$

donde $m'' = 1, 2, \dots, N$

Se usa las siguientes formulas la integración para solucionar I_1, I_2, I_3

$$\int_{-L}^L \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi m'' x}{L} dx = L \delta_{m,m''}, \quad (.07)$$

$$\int_{-L}^L \cos \frac{\pi m x}{L} \cos \frac{\pi m'' x}{L} dx = L (1 + \delta_{m,0}) \delta_{m,m''} \quad (.08)$$

y por lo tanto,

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-L}^L \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi m'' x}{L} dx = L \delta_{m,m''} \\ I_2 &= \int_{-L}^L \cos \frac{\pi m' x}{L} \sin \frac{\pi m x}{L} \sin \frac{\pi m'' x}{L} dx \\ &= \frac{1}{2} \int_{-L}^L \cos \frac{\pi m' x}{L} \left[\cos \frac{\pi (m - m'') x}{L} - \cos \frac{\pi (m + m'') x}{L} \right] dx = \frac{1}{2} L (1 - \delta_{m',0}) \delta_{m',m+m''} \end{aligned} \quad (.09)$$

finalmente la ecuación .01

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^N c_m \left(\left(\frac{\pi m}{L} \right)^2 - E \right) \delta_{m,m''} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m=1 \\ m'=0}}^N V_{m'} c_m [(1 + \delta_{m',0}) \delta_{m',m-m''} - \delta_{m',m+m''}] = 0 \\ \sum_{m=1}^N c_m \left(\left(\frac{\pi m}{L} \right)^2 + V_0 - E \right) \delta_{m'',m} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m=1 \\ m'=1}}^N (V_{m-m''} - V_{m''+m}) c_m = 0 \end{aligned} \quad (.010)$$

MÉTODO DE FOURIER PARA RESOLVER LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER 2D

La ecuación de Schrödinger 2D, tal para el caso del movimiento del electrón transversal tiene la siguiente forma

$$-\frac{\partial^2 \Phi(s, z)}{\partial s^2} - \frac{\partial^2 \Phi(s, z)}{\partial z^2} + V(s, z) = \left(E - \frac{\pi^2}{d_s^2} \right) \Phi(s, z); \quad 0 < z < L; \quad 0 < s < s_f \quad (.0.11)$$

Donde $V(s, z)$ es el potencial de confinamiento dado por

$$V(s, z) = -\frac{1}{4R_s^2(s)} - \frac{2}{\sqrt{R_{eD}^2(s, s_D) + (z - z_D)^2}} \quad (.0.12)$$

Análogo a la sección anterior, se deben satisfacer las siguientes condiciones de frontera

$$-\Phi(0, z) = \Phi(s_f, z) = \Phi(s, -L) = \Phi(s, L) = 0 \quad (.0.13)$$

De acuerdo con estas condiciones se busca la solución de la ecuación (.0.11) usando una expansión en series de Fourier para cada variable independiente

$$\Phi(s, z) = \sum_{m=1}^{N_m} \sum_{n=1}^{N_n} c_{n,m} \sin \frac{\pi n s}{s_f} \sin \frac{\pi m z}{L} \quad (.0.14)$$

Sustituyendo la ecuación (.0.14) en (.0.11)

$$\sum_{n,m=1}^{N_m N_n} \sin \frac{\pi n s}{s_f} \sin \frac{\pi m z}{L} \left(\left(\frac{\pi^2 n^2}{s_f^2} + \frac{\pi^2 m^2}{L^2} - \tilde{E} \right) + V(s, z) \right) C_{n,m} = 0; \quad \tilde{E} = E - \frac{\pi^2}{d^2} \quad (.0.15)$$

Para encontrar la ecuación secular que permite obtener los eigenvalores de la energía se realiza un ejercicio análogo a la sección anterior, primero se multiplica ambos lados de la igualdad por $\sin\left(\frac{\pi n'}{s_f} s\right) \sin\left(\frac{\pi m'}{L} z\right)$, luego se integra respecto a s y z y se hace una transformación algebraica de sin y así se obtiene la siguiente expresión

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4} \sum_{\substack{n=1 \\ m=1}}^{N_n, N_m} \left(\frac{\pi^2 n^2}{s_f^2} + \frac{\pi^2 m^2}{L^2} - \tilde{E} \right) I_1 \times I_1' \cdot C_{n,m} \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\substack{n=1 \\ m=1}}^{N_n, N_m} \int_0^{s_f} \left(\cos \frac{\pi (n' - n) s}{s_f} - \cos \frac{\pi (n' + n) s}{s_f} \right) ds \\ & \times \int_0^L \left[\cos \frac{\pi (m' - m) z}{L} - \cos \frac{\pi (m' + m) z}{L} \right] V(s, z) dz \cdot C_{n,m} = 0, \quad (.0.16) \end{aligned}$$

donde

$$I_1 = \int_0^L \left(\cos \frac{\pi(m' - m)x}{L} - \cos \frac{\pi(m' + m)z}{L} \right) V(s, z) dz , \quad (.0.17a)$$

$$I'_1 = \int_0^{s_f} \left(\cos \frac{\pi(n' - n)s}{s_f} - \cos \frac{\pi(n' + n)s}{s_f} \right) ds . \quad (.0.17b)$$

Las integrales I_1 y I'_1 se resuelven fácilmente en <https://math.stackexchange.com/q/1571453> y en forma compacta se pueden escribir como

$$I_1 = L \cdot \delta_{m',m} \quad (3.5.17a)$$

$$I'_1 = s_f \cdot \delta_{n',n} \quad (3.5.17b)$$

Para el segundo termino, se define la matriz de elementos del potencial

$$V_{\tilde{n},\tilde{m}} = \frac{1}{s_f \cdot L} \int_0^{s_f} \cos \frac{\pi\tilde{n}s}{s_f} ds \int_0^L \cos \frac{\pi\tilde{m}x}{L} V(s, z) dz , \quad (.0.18)$$

donde

$$V(s, z) = -\frac{1}{4R_s^2(s)} - \frac{2}{\sqrt{R_{eD}^2(s, s_D) + (z - z_D)^2}} \quad (.0.19)$$

Sustituyendo (.0.17) y (.0.18) en (.0.16), se obtiene finalmente la siguiente ecuación secular:

$$\sum_{\substack{n=1 \\ m=1}}^{N_m, N_m} \left[\left(\frac{\pi^2 n^2}{s_f^2} + \frac{\pi^2 m^2}{L^2} - \tilde{E} \right) \delta_{n,n'} \delta_{m,m'} + V_{n'-n, m'-m} + V_{n'+n, m'+m} - V_{n'-n, m'+m} - V_{n'+n, m'-m} \right] C_{m',n'} = 0 \quad (.0.20)$$