

Localización Electrónica en Nanohilos Hexagonales con Estructura Núcleo-Corteza

Angie Nicole Hernández Durán

Trabajo de Grado para optar al título de Física

Director

Willian Gutiérrez Niño

Doctor en Ciencias Naturales-Física

Codirector

David Alejandro Miranda Mercado

Doctor en Química Aplicada

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

Bucaramanga

2019

Tabla de Contenido

Introducción	15
1. Detalles teóricos y Antecedentes	19
1.1. Nanoestructuras Semiconductoras	19
1.1.1. Hilos cuánticos (NWs)	20
1.1.2. Anillos Cuánticos (QRs)	22
1.1.2.1. Oscilaciones Aharonov-Bohm	24
1.1.2.2. Localización electrónica en anillos cuánticos debido a defectos estructurales	25
1.1.3. Nanohilos núcleo/corteza(CSNWs)	26
2. Modelo Matemático y Simulación	28
2.1. Geometría del sistema	28
2.2. Ecuación de Schrödinger de un electrón confinado en una NW bajo efectos de campo magnético y eléctrico	29
2.3. Sobre COMSOL Multiphysics®	30
2.3.1. Método de Elementos Finitos (FEM)	33
3. Resultados y Análisis	34
3.1. Efecto del grosor w de la corteza	35

LOCALIZACIÓN ELECTRÓNICA EN NANOHILOS	5
3.2. Efecto del campo magnético	42
3.3. Efecto del campo eléctrico	52
3.4. Efecto de los campos magnético y eléctrico combinados	56
4. Conclusiones	60
Referencias Bibliográficas	60

Lista de Figuras

- Figura 1.1. (izquierda) Esquema del crecimiento mediante el mecanismo vapor-líquido-sólido de un NW con una gota de oro como catalizador, tomado de Yang et al. (2002). (derecha) Imagen obtenida con microscopio de escáner electrónico de InAs NWs, tomado de Tchernycheva et al. (2007) 21
- Figura 1.2. (izquierda y centro) Posible escenario en la formación de QRs autoensamblados, tomado de Lorke et al. (2001). (derecha) Imágenes tomadas con microscopio de fuerza atómica de QRs concéntricos, tomado de Mano et al. (2005). 23
- Figura 1.3. (a,b) Imagen mediante SEM de CSNW, barras de escala de (a) $1[\mu\text{m}]$, (b) $100[\text{nm}]$, tomada de Sköld et al. (2005). (c) Imagen mediante SEM de la sección transversal de un CSNW multicapa, barra de escala de $50[\text{nm}]$, tomado de Yuan et al. (2017) 26
- Figura 2.1. Esquema del CSNW de interés con l la longitud del NW, a el radio del hexágono interno y w el grosor de la corteza. 28
- Figura 2.2. Esquema de elementos finitos cuadrangulares bidimensionales de primer orden (izquierda) y de segundo orden (derecha) con sus respectivos nodos, tomado y modificado de Nikishkov (2004) 33
- Figura 3.1. Esquema del potencial estructural en la sección transversal del CSNW. 35

- Figura 3.2. Densidad de probabilidad electrónica para diferentes grosores w de la corteza de *InAs*, (a) 15, (b) 6, (c) 2.5 y (d) 2 [nm]. 37
- Figura 3.3. Variación de la energía del estado base en función del grosor w de la corteza. 38
- Figura 3.4. Niveles energéticos de un electrón confinado en un CSNW hexagonal en función del campo magnético para diferentes grosores w de la corteza de *InAs*: (a) 20, (b) 15, (c) 10 y (d) 8 [nm]. 45
- Figura 3.5. Energías de un electrón confinado en un CSNW hexagonal en función del campo magnético para valores del grosor de la corteza w de *InAs* cercanos y menores al valor límite: (a) 2.5 y (b) 2 [nm]. 46
- Figura 3.6. Momento magnético dipolar M respecto a la intensidad del campo magnético para 4 grosores diferentes de la corteza: (a) 15, (b) 8, (c) 2.5 y (d) 2 [nm]. 50
- Figura 3.7. Momento dipolar magnético de un electrón confinado en QR circulares con diferentes radios internos: 1, 2, 5 y 10 [nm] (en orden ascendente). Tomado y modificado de Climente and Planelles (2008). 51
- Figura 3.8. Esquema lateral del efecto del campo eléctrico aplicado en dirección X sobre el potencial efectivo para CSNWs con (a) $w = 15$ y (b) $w = 2$ [nm], en este último caso se ignora el pequeño grosor de la corteza. Tomado y modificado de Harrison and Valavanis (2016). 52

Figura 3.9. Funciones de onda para el electrón confinado en estructuras con grosor de la corteza de (a,c) 15 y (b,d) 2 [nm] bajo el efecto de un campo eléctrico de intensidad 1 [kV/cm] aplicado en 2 direcciones: (a,b) paralelo al eje horizontal y (c,d) a 30° respecto a este. 53

Figura 3.10. Dependencia de los niveles energéticos del campo eléctrico para CSWN con 2 diferentes grosores de la corteza, (a) 15 y (b) 2 [nm]. 54

Figura 3.11. Dependencia de la energía contra el campo magnético a para dos valores fijos del campo eléctrico, (a,c,e) $F = 0,1$ [kV/cm] y (b,d,f) $F = 1$ [kV/cm] para grosores de la corteza de (a,b) 20, (c,d) 8 y (e,f) 2,5 [nm]. 59

Lista de Tablas

Tabla 1.	Densidades de probabilidad electrónicas para diferentes grosores de la corteza w y diferentes niveles energéticos.	39
Tabla 2.	Funciones de onda del estado base en ausencia y presencia de campo magnético para cuatro diferentes valores del parámetro w .	43
Tabla 3.	Densidades de probabilidad electrónica de diferentes estados a intensidad de campo eléctrico 0.1 [kV/cm] y bajo la influencia de un campo magnético de 3 [T].	56
Tabla 4.	Densidades de probabilidad electrónica de diferentes estados a a intensidad de campo eléctrico 1 [kV/cm] y bajo la influencia de un campo magnético de 3[T].	57

LISTA DE ABREVIATURAS

AB	-	Aharonov-Bohm
CSNW	-	Nanohilo con estructura núcleo-capa
FEM	-	Método de Elementos finitos
GaAs	-	Arseniuro de Galio
InAs	-	Arseniuro de Indio
MBE	-	Crecimiento epitaxial por haces moleculares
MOVPE	-	Deposición de vapor mediante procesos químicos orgánico-metálicos
NW	-	Hilo cuántico
PDE	-	Ecuación diferencial parcial
QD	-	Punto cuántico
QR	-	Anillo cuántico

Resumen

Título: Localización Electrónica en Nanohilos Hexagonales con Estructura Núcleo-Corteza *

Autor: Angie Nicole Hernández Durán **

Palabras Clave: Nanohilo con estructura núcleo-corteza, InAs, GaAs, densidad de probabilidad electrónica, método de elementos finitos, oscilaciones Aharonov-Bohm.

Descripción: Se estudió el espectro energético de un electrón confinado en la sección transversal de un nanotubo con estructura núcleo-corteza de GaAs-InAs y forma hexagonal, bajo efectos de un campo magnético aplicado en dirección de crecimiento del nanotubo y eléctrico, en diferentes direcciones sobre el plano transversal del nanotubo. El sistema fue modelado mediante la ecuación de Schrödinger estacionaria en coordenadas cartesianas considerando la aproximación de masa efectiva y aplicando condiciones de Dirichlet en las fronteras exteriores. La ecuación fue solucionada utilizando el método de elementos finitos.

Se consideran tres diferentes configuraciones de acuerdo al grosor w de la corteza de InAs, basados en el denominado *grosor límite*, para el cual la localización electrónica cambia de encontrarse principalmente en el material central de la estructura a estar en la corteza. Se consideró la probabilidad electrónica para valores de la corteza significativamente mayores, cercanos e inferiores al *grosor límite*; además se analizó la dependencia del espectro energético de los campos magnético y eléctrico aplicados individual y simultáneamente, y la magnetización.

Los resultados muestran la dependencia de la localización electrónica con el grosor w y el cambio de dirección en las esquinas de la estructura. Presentan además cómo este último aspecto afecta fuertemente el espectro energético

* Trabajo de grado

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física.
Director: Willian Gutiérrez Niño, Doctor en Ciencias Naturales.
Codirector: David Alejandro Miranda Mercado, Doctor en Química Aplicada

obtenido en presencia de campo magnético; así mismo se evidencia cómo el espectro energético, bajo la aplicación de campo eléctrico, se ve muy levemente afectado por la dirección de aplicación de este a pesar de la presencia de esquinas en la estructura. Los resultados en la magnetización muestran nuevamente dependencia de w , con un comportamiento muy particular cuando este tiene un valor de 2.5[nm].

Abstract

Title: Electronic Localization in Hexagonal Core-Shell Nanowires *

Author: Angie Nicole Hernández Durán **

Keywords: Core-Shell nanowire, InAs, GaAs, electronic density, finite element method, Aharonov-Bohm oscillations.

Description: Energy spectra of an electron inside an *InAs-GaAs* core-shell nanowire under electric field applied along the axis of the nanowire and magnetic field applied along the transversal plane of the structure has been studied. The system was modeled in cartesian coordinates through the Schrödinger equation, under the effective mass approximation and applying Dirichlet boundary conditions in the external boundaries of the structure. The equation was solved using the finite element method.

Three different configurations were considered according to the thickness w of the shell, based on the *threshold thickness*, for which the electronic localization switches from being mainly on the shell to being on the core. The electronic probability was considered for values significantly above, just above and below this *threshold thickness*; besides, the energy levels dependency on the electric and magnetic fields applied individually and simultaneously, and the magnetization, were considered.

The results show the electronic localization dependence of the thickness w and the curvature of the structure corners. They also show how this last factor strongly affects the energy spectra obtained in presence of magnetic field; likewise they exhibit how the energy spectra in presence of an electric field is barely affected by the orientation of the field,

* Bachelor Thesis

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física.
Director: Willian Gutiérrez Niño, Doctor en Ciencias Naturales.
Codirector: David Alejandro Miranda Mercado, Doctor en Química Aplicada

in spite of the presence of this corners. The results for the magnetization display once again a high dependence of w , with a particular behaviour for $w = 2.5[\text{nm}]$.

Introducción

En la reunión anual de la *American Physical Society*, celebrada en el *Californian Institute of Technology*, el 29 de diciembre de 1959, el físico estadounidense Richard Feynman ofreció una charla titulada *There's Plenty of Room at the Bottom*, con la cual buscaba exacerbar la curiosidad de los científicos de la época por este nuevo campo de la ciencia en el que, a la fecha, poco se había desarrollado, pero que poseía un enorme número de aplicaciones prácticas. A pesar de no llamar en su momento la atención de la comunidad científica en general, y por ende no ser el catalizador del auge del estudio en este campo, esta charla fue citada de manera recurrente varias décadas más adelante por aquellos entusiastas de la tecnología a escala nanométrica para apoyar la importancia que esta ya comenzaba a tomar en el mundo moderno.

Feynman argumentaba que el progreso de las computadoras y de todo dispositivo electrónico se vería beneficiado con los descubrimientos que se consiguiesen de la exploración de esta novedosa rama de la física. La historia se encargó de darle la razón, pues la tecnología con la que contamos hoy en día no sería posible sin las ventajas brindadas por las nanoestructuras, que permiten la creación de dispositivos cada vez más livianos, económicos y versátiles.

El diseño de estructuras conductoras y semiconductoras de tamaños nanométricos, considerando diferentes grados de confinamiento y diferentes morfologías, ha dado paso a la creación de los denominados sistemas de baja dimensionalidad, entre los cuales se encuentran los hilos cuánticos (QWs), puntos cuánticos (QDs), anillos cuánticos (QRs) y, más recientemente, sistemas núcleo-corteza de hilos cuánticos (*core-shell nanowires* o CSNWs).

Las diferentes morfologías otorgan a cada nanoestructura propiedades que la caracterizan y la hacen óptima para determinados fines. Los QDs, por ejemplo, tienen la particularidad de emitir luz de diferentes longitudes de onda al ser excitados de acuerdo a sus tamaños; además de esto, la separación de los niveles energéticos debido al confinamiento permite el control de la fluorescencia de los QDs y su alto coeficiente de atenuación los hace ideales para dispositivos fotovoltaicos, como celdas solares, ya que mejoran la eficiencia de los paneles fotovoltaicos, reduciendo los costos. Por su parte, los NWs son comúnmente usados para el transporte de excitaciones ópticas y electrónicas, debido a que con su fabricación se busca encontrar una mejoría en el coeficiente de absorción de su sección transversal; de igual manera se ha observado, para ciertos materiales, el acceso a fases cristalinas que no se puede obtener con el mismo material en grandes dimensiones, lo cual tiene repercusiones en la emisión óptica de la estructura. En un aspecto estructural a gran escala, los NWs han permitido resolver, en muchos casos, el problema del rompimiento y desgaste superficial de películas de materiales semiconductores con poca flexibilidad, ya que un arreglo de NWs del mismo material sobre una superficie no sufrirá las mismas tensiones que producen fracturas del material frente a deformaciones macroscópicas de su sustrato.

La estructura de interés en este trabajo de grado es un CSNW de sección transversal hexagonal; respecto a estas estructuras hay una extensa cantidad de artículos experimentales en los cuales se reportan las mediciones de sus diferentes propiedades. Mediante la implementación de estas nanoestructuras se ha observado mejoría en características como la eficiencia de absorción fotónica [Wallentin et al. (2013); Currie et al. (2013)], emisión espontánea [Yuan et al. (2017); Sköld et al. (2005)], emisión superficial de excitones [Richters et al. (2008)], capacitancia y con-

ductividad eléctrica [Cui et al. (2008)], mejora en el acoplamiento spin-orbita [Furthmeier et al. (2016)], y disminución en otras como la conductividad térmica [Hu et al. (2010)].

La publicación de los primeros artículos presentando la fabricación y propiedades de CSNWs se remonta al año 1997, pero no fue sino hasta el año 2002 que se evidenció el afán por caracterizar el proceso de crecimiento para la obtención de diferentes geometrías con diferentes materiales, ya que las propiedades que manifiestan estos, y por ende el comportamiento de sistemas de pocas partículas en su interior, dependen altamente de su morfología.

A la fecha, los estudios teóricos del comportamiento de sistemas de pocas partículas en CSNWs se ha centrado en aquellos de geometría transversal debido a que la simetría azimutal permite separar analíticamente la variable angular, lo cual facilita el estudio de la estructura, y también al hecho de que los primeros CSNWs fabricados, presentaban sección transversal circular. Entre los trabajos realizados se puede encontrar el comportamiento de una donadora hidrogenoide bajo efectos de campos eléctrico y magnéticos [Marin et al. (2018)] y campos inducidos por láseres de alta frecuencia [Niculescu and Radu (2010)]. Respecto a los CSNWs de sección transversal hexágono se encuentran estudios teóricos del sobre las propiedades de conductancia [Torres et al. (2018)] y las oscilaciones Aharonov-Bohm para excitones [Corfdir et al. (2019)].

Al ser los CSNWs nanoestructuras compuestas por un NW con una o varias cortezas, su geometría transversal recuerda a aquella de los QRs concéntricos rodeando un QD. El análisis de esta sección transversal es prioritario para el análisis de la estructura de CSNW, por esto es importante conocer el comportamiento de sistemas de pocas partículas en QRs. Por los mismos motivos que aquellos mencionados para los CSNWs, el estudio de sistemas de pocas partículas y efectos

morfológicos como las oscilaciones AB en QRs es más amplio para aquellos de simetría circular, donde se puede tomar como ejemplo artículos describiendo el comportamiento de sistemas con donadoras [García et al. (2017)] y unielectrónicos [Kleemans et al. (2007)], y también para QRs elongados [García et al. (2018)], donde se evidencian los efectos debido al cambio de radio de curvatura mencionados en 1.1.2.2. Respecto a la simetría hexagonal se encuentran escasos artículos donde se estudian las oscilaciones AB y la magnetización de estas estructuras [Ballester et al. (2014)]. Cabe destacar otro artículo realizado por A. Ballester y asociados [Ballester et al. (2012)] en el cual se realizó un estudio teórico y numérico de los estados para uno y varios electrones en un QR hexagonal, encontrando patrones correspondientes a la molécula de benceno y se propone la posibilidad de la fabricación artificial de estas moléculas tomando rebanadas de un CSNW como el seleccionado para este trabajo de grado.

Debido al amplio campo de aplicación y a que son nanoestructuras relativamente recientes, en este trabajo de grado se hace un enfoque en los CSNW de sección transversal hexagonal. Con ayuda del software COMSOL Multiphysics ® se resuelve la ecuación de Schrödinger para un electrón confinado en una nanoestructura bajo la influencia de campos eléctrico y magnéticos y se analiza la densidad electrónica del sistema, las oscilaciones de Aharonov-Bohm en la energía y magnetización, se observa el efecto Stark y el confinamiento producido por la fuerza eléctrica de Lorentz.

1. Detalles teóricos y Antecedentes

1.1. Nanoestructuras Semiconductoras

Desde hace aproximadamente medio siglo las estructuras conductoras y semiconductoras de tamaño nanométrico han llamado fuertemente la atención de la comunidad científica debido a su enorme potencial en el avance tecnológico, potencial que se basa en la diversidad de nuevos fenómenos que se presentan a esta pequeña escala. Cuando se estudian portadores de carga en semiconductores de dimensiones nanométricas, la restricción del momentum resulta en fenómenos cuánticos que afectan las propiedades del sistema en diferentes maneras de acuerdo al tipo de confinamiento.

Los agudos cambios que se presentan en las propiedades al pasar de una estructura en bloque a una de escala nanométrica se deben a varios factores. Como ejemplo ilustrativo se puede considerar la superficie del material: al reducir la dimensionalidad, la superficie sufre un aumento de la proporción de átomos respecto a la cantidad total de estos, entre mayor sea la proporción de átomos superficial, mayor es la intensidad de los efectos relacionados a la superficie. Además, las condiciones de los átomos en la superficie cambian debido a que las uniones químicas con los átomos vecinos se rompen debido a esfuerzos que aparecen durante el ensamblaje de la estructura. El resultado de esta reconstrucción es un cambio en la constante de red, afectando todas las respuestas del material que dependan de esta característica. Como se dijo, este es sólo un ejemplo para observar en un aspecto cómo cambian las propiedades del material, y por ende su interacción con partículas cargadas, pero los cambios se producen claramente en más de un aspecto y dimensión de acuerdo al tipo de confinamiento que se imponga a la estructura.

Cuando un electrón interactúa con un material, su propagación dentro de este se estudia como una onda. En un material en bloque, la onda para el electrón de conducción puede propagarse en cualquier dirección y no encuentra restricciones a los valores que pueden tomar los parámetros que la describen, lo cual no sucede en estructuras cuya dimensionalidad se ha reducido, en uno o más grados, a dimensiones comparables a la longitud de onda de deBroglie [Mitin et al. (2010)]. La propagación del electrón no puede darse de igual manera en direcciones en que las dimensiones son nanométricas y queda condicionado por esto como si de una onda estacionaria se tratase, con lo que la onda que lo representa sólo podrá tomar cierta cantidad de valores enteros de longitud de onda que encajen en esta dirección, quantizando así el espectro energético, o mejor dicho, haciendo de la cuantización de este algo medible, si se compara con el espectro energético obtenido para la interacción con el bloque. Como resultado de esto se encuentran diferentes efectos para las diferentes nanoestructuras, como ejemplo más general se tiene que en todos los casos el confinamiento produce que la separación entre los niveles energéticos que componen el espectro se incremente y, por lo tanto, sus propiedades opto-electrónicas se vean alteradas. Este hecho hace que el confinamiento estructural constituya quizá el parámetro más importante al momento de diseñar nuevos materiales.

1.1.1. Hilos cuánticos (NWs). Con este nombre se designan las nanoestructuras semiconductoras en las cuales el movimiento de los portadores de carga se ha reducido a un único grado de libertad, dando como resultado una estructura cuasi-unidimensional con forma de hilo o cable, de algunas micras de largo y varias decenas de nanómetros de diámetro. Estas son las estructuras de menor dimensión que pueden ser usadas en el transporte de cargas y excitaciones ópticas,

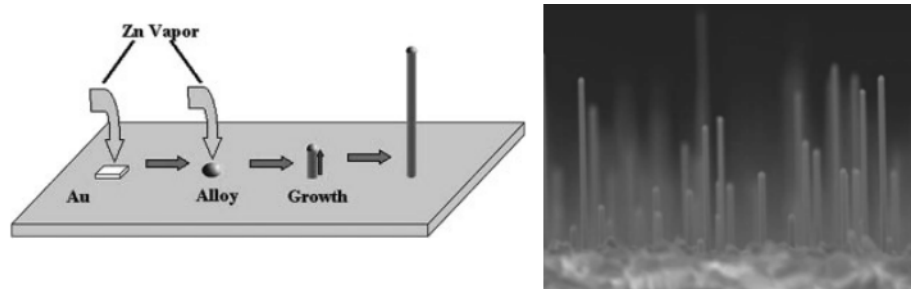


Figura 1.1. (izquierda) Esquema del crecimiento mediante el mecanismo vapor-líquido-sólido de un NW con una gota de oro como catalizador, tomado de Yang et al. (2002). (derecha) Imagen obtenida con microscopio de escáner electrónico de InAs NWs, tomado de Tchernycheva et al. (2007)

por lo que son indispensables en diversidad de dispositivos electrónicos y ópticos, como transistores de efecto de campo [Duan et al. (2002)], láseres [Gradečak et al. (2005)], entre otros. De igual manera, la implementación de estos ha resultado en mejoras de las propiedades optoelectrónicas en estructuras con aplicaciones en los campos de nanofotónica, nanoelectrónica y microanálisis [Yang et al. (2002)].

La síntesis de NWs se realiza principalmente mediante dos técnicas, la primera es el Crecimiento Epitaxial por Haces Moleculares (MBE), una técnica de fabricación ampliamente utilizada en la fabricación de nanoestructuras en general. Esta consiste en la deposición de capas monoatómicas sobre un sustrato a alta temperatura. La característica más llamativa de este método de fabricación es la baja velocidad de deposición (usualmente menos de 3 micras por hora), permitiendo de esta manera un mayor control sobre la estructura. El “disparo” de los haces moleculares es computarizado, lo cual permite gran precisión en la geometría de la estructura. El procedimiento debe ser llevado a cabo en cámaras de gran vacío o de ultra gran vacío (10^{8-12} Torr) para que las distancias de recorrido medio de las partículas no sean un problema, además de que las velocidades

des de deposición sean las deseadas y la pureza de la estructura sea aceptable. Las condiciones de presión y temperatura ideales para el crecimiento de estas estructuras dependen del semiconductor escogido. Se ha encontrado que para el caso del GaAs, la temperatura ideal es de 590 °C, a una presión de 10^{-6} Torr, por 45 minutos, y resulta en NWs de 1.2 μm de alto y 60-70 nm de diámetro [Rieger et al. (2012)]; Para el crecimiento de NWs de InAs se utilizan temperaturas entre 380 y 430 °C, con un tiempo máximo de 8.5 minutos [Tchernycheva et al. (2007)].

La segunda técnica de fabricación ampliamente utilizada es la Deposición de Vapor mediante Procesos Químicos Orgánico-Metálicos (MOVPE). Este método consiste en la deposición de vapor para inducir el crecimiento epitaxial de compuestos semiconductores derivados de una reacción en la superficie de compuestos orgánicos y metalorgánicos e hidruros de metal específicos. Se suele usar gotas de oro como catalizador, o se realizan NWs autocatalizados. Las cortezas se forman mediante pirólisis, esto es, descomposición química de materia no-metálica causada por calentamiento en ausencia de oxígeno o cualquier halógeno. Se diferencia del MBE porque el crecimiento se debe a una reacción química y no a deposición física, además de no requerir condiciones de gran vacío, ya que puede ejecutarse a presiones moderadas (2 a 100 KPa).

1.1.2. Anillos Cuánticos (QRs). Estos sistemas cuánticos doblemente conexos presentan variadas morfologías, son estructuras quasi-cerodimensionales derivadas de QDs, que presentan una depresión en su centro. Esta particular configuración permite que se presenten varios de los fenómenos más interesantes observados entre los sistemas de baja dimensionalidad, como la observación de corrientes persistentes bajo la influencia de campos magnéticos [Cheung et al. (1988)] y en el estudio de efectos topológicos cuánticos, como el efecto Aharonov-Bohm

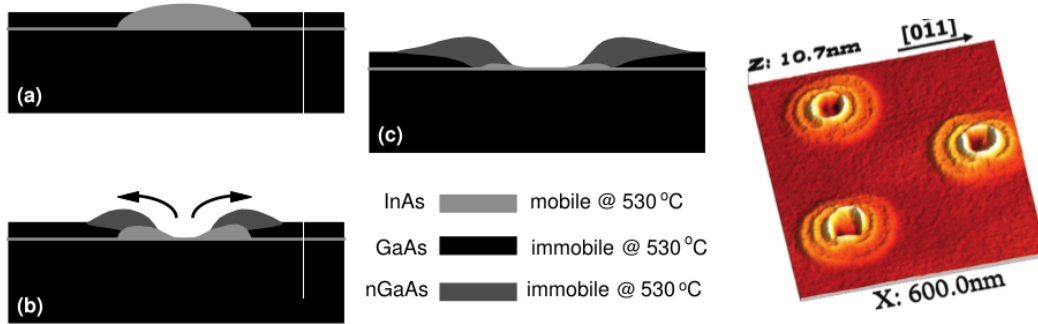


Figura 1.2. (izquierda y centro) Posible escenario en la formación de QRs autoensamblados, tomado de Lorke et al. (2001). (derecha) Imágenes tomadas con microscopio de fuerza atómica de QRs concéntricos, tomado de Mano et al. (2005).

[Aharonov and Bohm (1959)].

Los primeros tipos realizados fueron QDs autoensamblados mediante la técnica de crecimiento Stranski-Krastanov, en un sustrato de GaAs y en presencia de InAs. Esta técnica, a pesar de ser la más antigua, presenta óptimos resultados y aún es utilizada. Su metodología, como se especifica en [Lorke et al. (2001)] para el crecimiento de QRs de InGaAs, comienza con una deposición, en un sustrato de GaAs, de una corteza de GaAs lo suficientemente gruesa como para tener una superficie suave y uniforme. La temperatura del sustrato se disminuye a 530 °C. Se depositan 1.7 capas monoatómicas de InAs, ya que esto es apenas un poco más de lo necesario para que se observe la transición de crecimiento bidimensional a tridimensional, y resulta en un muy diluido arreglo de QDs de 6nm de altura y 20nm de diámetro. Los puntos son cubiertos por una gruesa corteza de GaAs. El paso clave para instigar la formación de anillos a partir de los puntos consiste en interrumpir brevemente la deposición de la corteza de GaAs en un grosor de 1-4 nm. Esta interrupción da al material tiempo de sufrir una reacomodación debido a tensiones y esfuerzos inhomogéneos superficiales y tiene un efecto muy drástico en la morfología de las islas que resulta

en QRs, además de indicar que el crecimiento de InAs sobre GaAs no es un proceso equilibrado.

Con una metodología similar se han realizado estructuras de 2 [Mano et al. (2005)] y hasta 5 [Somaschini et al. (2009)] anillos concéntricos autoensamblados de gran uniformidad y gran simetría rotacional, como se observa en la figura 1.2.

1.1.2.1. Oscilaciones Aharonov-Bohm. Como ya se ha mencionado, la topología doblemente conexa de los anillos cuánticos es fundamental para la observación de efectos muy interesantes y únicos entre los sistemas de baja dimensionalidad, y uno de los más interesantes es el efecto Aharonov-Bohm. En su artículo publicado en 1959 [Aharonov and Bohm (1959)], Aharonov y Bohm muestran teóricamente el efecto de los potenciales electromagnéticos en la teoría cuántica. Si se considera una onda mecánico-cuántica que se divide en dos ondas parciales para posteriormente recombinarse, la partícula cuántica correspondiente a dicha onda gana una fase correspondiente a la diferencia de fase entre las dos ondas parciales si es que el camino determinado encierra un flujo magnético, incluso si la trayectoria de la partícula no atraviesa una región donde haya campo magnético. La fase total es llamada *fase geométrica* y lleva a que se produzca interferencia cuántica una vez las ondas se recombinan [Fomin (2013)].

Esta interferencia cuántica es el efecto Aharonov-Bohm y una de sus consecuencias son las Oscilaciones de Aharonov-Bohm, las cuales consisten en las oscilaciones de los niveles energéticos del sistema con a la variación del campo magnético debido a la interferencia cuántica generada por ondas parciales circulando el QR en direcciones opuestas. Estas oscilaciones fueron observadas experimentalmente por primera vez en 1985 [Webb et al. (1985)] en QRs de oro con las características de fase predichas por Aharonov y Bohm, desde entonces se han publicado numero-

sos artículos en QRs con diferentes morfologías [Gélvez et al. (2016)] y de diferentes materiales, como metálicos [Cheung et al. (1988)] y semiconductores, tanto teóricos [García et al. (2017); García et al. (2018)] como experimentales [Keyser et al. (2002)].

1.1.2.2. Localización electrónica en anillos cuánticos debido a defectos estructurales. Los QRs fabricado mediante técnicas de deposición de vapor distan mucho de presentar morfologías perfectamente simétricas. Como se observa en la figura 1.2, los QDs suelen presentar inhomogeneidad en su grosor, altura y curvatura. Estudios teóricos sobre los efectos de las inconsistencias en el grosor y altura del anillo [Rodríguez Prada (2013); Bruno-Alfonso and Latgé (2008); Gutiérrez et al. (2013)] muestran que en todos los casos se presenta una desaparición de las oscilaciones AB en los niveles energéticos más bajos del sistema, esto debido a que cada uno de estos defectos genera regiones de menor potencial efectivo, lo que aumenta la probabilidad de localización electrónica en estas regiones produciendo que los ensambles con energías más bajas tiendan a restringirse a estos pozos de potencial y no presenten los efectos característicos de los QRs.

La inhomogeneidad en la curvatura a lo largo del QR ha sido estudiada por varios autores, entre los que cabe destacar el detallado estudio de Eugene Switkes y asociados [Switkes et al. (1977)], donde analizan los efectos de la curvatura en la energía cinética de los estados ligados de diferentes sistemas nanoestructurados. Las conclusiones de interés para este caso consisten en que, para un QR delgado, la curvatura inhomogénea distorsiona la eigenfunción sin nodos del estado base encontrada para un camino rectilíneo o para un QR perfectamente circular, produciendo máximos en las regiones de alta curvatura y estabilizando la probabilidad electrónica en estas zonas,

debido a que el comportamiento de la partícula en su trayectoria se puede describir como aquel sometido a un potencial efectivo de la manera:

$$V_{eff} = -\frac{\hbar^2}{8m} \frac{1}{\rho^2}, \quad (1)$$

donde ρ es el radio de curvatura, por lo que se puede apreciar que para radios de curvatura de gran valor, el potencial efectivo se acerca a cero, mientras que para pequeños radios de curvatura se generan pozos de potencial donde la probabilidad electrónica será mayor, produciendo los efectos de localización ya mencionados.

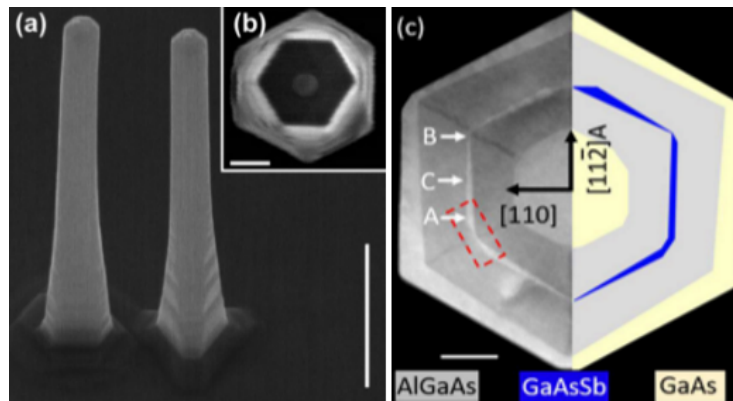


Figura 1.3. (a,b) Imagen mediante SEM de CSNW, barras de escala de (a) $1[\mu\text{m}]$, (b) $100[\text{nm}]$, tomada de Sköld et al. (2005). (c) Imagen mediante SEM de la sección transversal de un CSNW multicapa, barra de escala de $50[\text{nm}]$, tomado de Yuan et al. (2017)

1.1.3. Nanohilos núcleo/corteza(CSNWs). Recientemente, este tipo de nanoestructuras, consistentes en un hilo cuántico (*core*) recubierto por una o varias cortezas (*shells*) coaxiales de diferentes materiales semiconductores, ha logrado gran notoriedad debido a su potencial y ventajas significativas respecto a otras nanoestructuras para la fabricación de dispositivos

nanofotónicos y nanoelectrónicos, como ya se comentó en la sección de Introducción ??.

La fabricación de estas nanoestructuras comienza con el NW llamado núcleo, el cual servirá de soporte a las cortezas. El crecimiento de GaAs NWs mediante MBE y MOVPE da como resultado, en la mayoría de los casos, NWs de sección transversal hexagonal [Tchernycheva et al. (2007); Rieger et al. (2012)], esta geometría transversal es obtenida en la realización de estos NWs debido a la estructura cristalina Zinc-Blende (ZB) [Yin et al. (2005)]. Una vez obtenida la nanoestructura de soporte, los parámetros de crecimiento deben ser ajustados para el crecimiento de las cortezas. Utilizando InAs se ha observado que el crecimiento lateral de estas no es homogéneo, como ya se mencionó en 1.1.2, ya que realmente comienza con la formación de islas distribuidas en la superficie que crecen hasta determinada altura y se ensanchan, uniéndose eventualmente y formando en adelante una corteza homogénea, del mismo modo que sucede en el crecimiento de pozos y QDs de InAs en sustratos de GaAs [Lorke et al. (2001)].

La estructura cristalina del GaAs es ZB, la cual es una celda cúbica centrada en las caras y presenta coordinación tetrahedral, es decir, la cantidad de átomos unidos a cada átomo central de la red es 4 y estos forman un tetrahedro. En una estructura ZB, la organización de los átomos es muy similar a la estructura cúbica de diamante. Materiales con esta estructura han sido creados desde hace más de 30 años mediante técnicas con deposición de vapor [Koguchi et al. (1992)]. Una de las características más importantes de esta estructura es su arreglo estructural que contiene secuencias hexagonales separadas por defectos estructurales, lo cual explica que en los primeros años del estudio de NWs de GaAs se obtuviesen heteroestructuras longitudinales en lugar de presentar una única estructura cristalina a lo largo de toda su longitud. El mejoramiento de las técnicas de

crecimiento de nanoestructuras ha permitido que al día de hoy se conozcan las condiciones de crecimiento necesarias para la fabricación de NWs de GaAs con diferente proporción de fases cristalinas.

2. Modelo Matemático y Simulación

2.1. Geometría del sistema

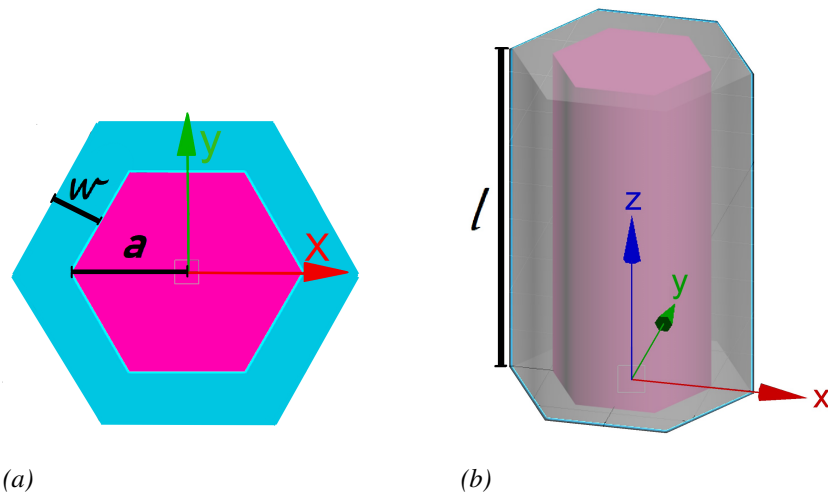


Figura 2.1. Esquema del CSNW de interés con l la longitud del NW, a el radio del hexágono interno y w el grosor de la corteza.

El modelo estudiado es el de un CSNW de sección transversal hexagonal regular, con núcleo de GaAs y corteza de InAs en presencia de un campo magnético en dirección longitudinal del NW, $\vec{B} = B_0 \hat{k}$, y un campo eléctrico en dirección transversal a este, $\vec{E} = E_0(\cos \phi \hat{i} + \sin \phi \hat{j})$.

La longitud l del NW (figura 2.1b) puede tomar un valor en el rango de 1,2 a 7 μm , y el radio a (figura 2.1a) del núcleo de la estructura es de solo unas decenas de nanómetros, 50 en este caso, según los reportes experimentales existentes, razón por la cual en este trabajo se ha considera un hilo de longitud infinita sin que esto represente una pérdida significativa del grado de confinamiento

estructural; el grosor de la corteza w toma diferentes valores en el rango comprendido entre 1 y 20[nm].

La aplicación del campo magnético en dirección longitudinal es fundamental para la apreciación de las oscilaciones AB, mientras la dirección asignada al campo eléctrico también fue escogida de manera estratégica para romper la simetría que presenta la estructura en su sección transversal.. Las variaciones en el ancho de la corteza w permiten observar el efecto de esta característica estructural sobre el espectro energético del sistema.

Los materiales utilizados en el modelamiento de este CSNW son, como se muestra en la figura 1.3, GaAs para el núcleo, e InAs para la corteza. Como fue mencionado en la sección 1.1.3, debido a su estructura cristalina, los NWs de GaAs tienen sección transversal hexagonal y el crecimiento de la corteza conserva esta geometría debido a su crecimiento sobre el material. Los valores de la masa efectiva del electrón en el núcleo y la corteza son, respectivamente, 0.065 y 0.026 m_e [Vurgaftman et al. (2001)], mientras los potenciales de confinamiento se miden con respecto a la brecha energética del InAs, lo cual resulta en un potencial de confinamiento de cero para este material, y 0.697 [eV] para el GaAs. Debido a que los CSNWs realizado mediante MBE se encuentran rodeados de aire, el potencial de confinamiento es considerado infinito fuera de la estructura.

2.2. Ecuación de Schrödinger de un electrón confinado en una NW bajo efectos de campo magnético y eléctrico

El comportamiento del electrón en la nanoestructura está descrito por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, teniendo en cuenta la aproximación de masa efectiva y la presencia de

campos eléctricos y magnéticos:

$$\left[\frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\vec{\nabla} + e\vec{A} \right)^2 + e\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \right] \Psi_n(\vec{r}) = E_n \Psi(\vec{r}), \quad (2)$$

con el potencial eléctrico $\varphi(\vec{r})$ y el potencial vectorial magnético \vec{A} .

Para el caso pertinente, esta ecuación se trabaja en coordenadas cartesianas y teniendo en cuenta el vector potencial magnético $\vec{A} = \vec{B} \times \vec{r}/2$, el potencial eléctrico $\varphi = \vec{F} \cdot \vec{r} = F_0(x \cos \phi + y \sin \phi)$ y las direcciones de aplicación de los campos eléctrico y magnético, se tiene que la ecuación 2 puede ser expresada como:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + i\hbar\omega_c(x\partial_y - y\partial_x) + \frac{(eB_0)^2}{8m^*} (y\hat{i} - x\hat{j})^2 + e\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \right] \Psi_n(\vec{r}) = E_n \Psi_n(\vec{r}), \quad (3)$$

donde ω_c es la frecuencia ciclotrónica : $\frac{eB_0}{2m^*}$, y $V(\vec{r})$ el potencial de confinamiento estructural.

Considerando la ausencia de confinamiento en dirección \hat{k} , la solución longitudinal corresponde a una onda libre, con lo que la ecuación de interés es la ecuación de Schrödinger en dirección transversal:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla_{xy}^2 + i\hbar\omega_c(x\partial_y - y\partial_x) + \frac{(eB_0)^2}{8m^*} (y^2 + x^2) + e\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \right] \psi_{xy,n} = E_n \psi_{xy,n} \quad (4)$$

2.3. Sobre COMSOL Multiphysics®

COMSOL Multiphysics es, como se declara en su sitio web oficial, un software de simulación para el modelamiento de diseños, artefactos y procesos en todo campo de investigación ingenieril, de manufacturación y científica. Esta plataforma engloba todos los pasos del modelamiento: desde la

geometría del sistema hasta las propiedades específicas de cada problema físico. La característica *Multiphysics* indica la posibilidad del modelamiento de fenómenos físicos simultáneos mediante “interfaces físicas” especializadas, agrupadas de manera intuitiva de acuerdo a sus características, las cuales pueden ser utilizadas sincrónicamente para obtener resultados más cercanos a los verdaderos fenómenos físicos estudiados que aquellos que se obtendrían analizando cada uno de estos aspectos por separado [com (a)].

La representación de gran variedad de fenómenos físicos se encuentra en forma de ecuaciones diferenciales parciales, y el estudiado en este caso no es la excepción, por lo que se utilizó la característica de modelado en base a ecuaciones (*equation-based modeling*) específicamente la interfase para la forma de coeficientes de ecuaciones diferenciales parciales (*Coefficient Form PDE*) para un estudio de Eigenvalores independiente del tiempo. Esta interfase permite trabajar con la forma de la ecuación diferencial parcial con coeficientes:

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f, \quad (5)$$

el estudio de Eigenvalores asume que las variables dependientes varían temporalmente de manera:

$$u(t) = u_0 e^{-\lambda t}, \quad (6)$$

con u_0 como amplitud compleja, λ como los eigenvalores y $\nabla = \left[\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right]$. Sustituyendo esto en la ecuación 5 se obtiene la forma de la ecuación diferencial con coeficientes:

$$\lambda^2 e_a u - \lambda d_a u + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f. \quad (7)$$

La ecuación de interés, 3, puede ser acomodada a esta forma de coeficientes definiéndolos de manera:

$$\left\{ \begin{array}{l} e_a = 0 \\ d_a = 1 \\ c = \frac{\hbar^2}{2m^*e} \\ \alpha = [0, 0] \\ \gamma = [0, 0] \\ \beta = \frac{i\hbar B_0}{2m^*} [-y, x] \\ a = \frac{eB_0^2}{8m^*} (x^2 + y^2) + E_0(x \cos \theta + y \sin \theta) + V \\ f = 0, \end{array} \right.$$

cabe aclarar que la reescritura de estos respecto a la ecuación 7 se realiza con el fin de expresar la energía en electronvoltios y que la adimensionalización de todos los parámetros es realizada internamente por el software.

Una vez establecida la geometría del sistema, que se construye interactivamente en la interfaz gráfica de COMSOL Multiphysics®), y determinados los coeficientes, se debe, como en todo problema de Dirichlet, especificar las condiciones de frontera de primer tipo recurriendo nuevamente a la interfaz gráfica para determinar los dominios donde se desean implementar. Las condiciones de frontera de Dirichlet, en términos de teoría de elementos finitos, son llamadas *essential boundary conditions* [COMSOL (a)].

COMSOL Multiphysics® recurre al FEM para aproximar la solución de este tipo de problemas.

2.3.1. Método de Elementos Finitos (FEM). Éste es un método computacional para la discretización y solución de sistemas descritos por PDEs, especialmente aquellos con geometrías complejas.

El procedimiento comienza con la aproximación de la geometría mediante elementos de figura sencilla, para problemas bidimensionales se utilizan elementos cuadrangulares o triangulares de primero o segundo orden. Como se puede apreciar en la figura 2.1 los elementos de primer orden no presentan curvatura, a diferencia de los de segundo orden, que suelen estar en los bordes de la geometría [Nikishkov (2004)].

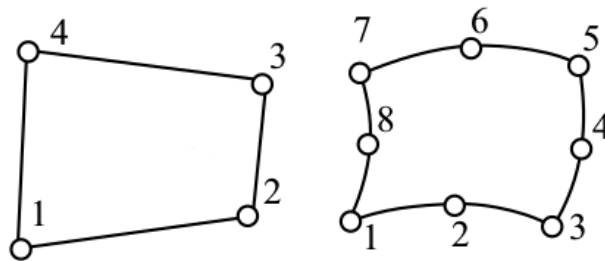


Figura 2.2. Esquema de elementos finitos cuadrangulares bidimensionales de primer orden (izquierda) y de segundo orden (derecha) con sus respectivos nodos, tomado y modificado de Nikishkov (2004)

A continuación deben escogerse las funciones de interpolación, también llamadas funciones de forma, que mejor se ajusten al problema, usualmente se seleccionan funciones polinómicas para éste fin, como los polinomios de Legendre, entre otros. Ya que el cálculo se realiza para los nodos de los elementos finitos, estas funciones son necesarias para realizar la aproximación de la solución en todo el dominio.

Seguidamente se debe aproximar el problema inicial con uno que tenga un número finito de parámetros mediante combinaciones lineales de funciones base. De la siguiente manera, siendo u la variable dependiente del problema de interés:

$$u \approx u_h, \quad u_h = \sum_i u_i \psi_i, \quad (8)$$

Con ψ_i y u_i como las funciones base y los coeficientes de estas respectivamente [com (b)]. Esta aproximación se realiza para los nodos de cada elemento. De acuerdo al problema de interés, cada función base asume una forma de entre el pequeño grupo de funciones de forma. Las aproximaciones realizadas para cada nodo forman una matriz característica para cada elemento finito, teniendo en cuenta que los elementos adyacentes comparten nodos, estos son fundamentales para el proceso de combinación y reducción de las matrices de todo el sistema, considerando la imposición de condiciones de frontera [COMSOL (b)].

La resolución de el sistema de ecuaciones globales se realiza mediante métodos directos o iterativos y el resultado es la aproximación a la solución deseada.

3. Resultados y Análisis

En esta sección se exhiben los frutos del estudio detallado del comportamiento de un electrón en la nanoestructura de interés, específicamente en la sección transversal del CSNW, bajo diferentes condiciones de confinamiento estructural y por campos externos. Se muestran los resultados de la densidad de probabilidad electrónica y el espectro energético por la aplicación de campos eléctrico y magnéticos individuales y simultáneos así como la magnetización del sistema, además de la influencia que tiene sobre todos estos aspectos el espesor de la corteza.

3.1. Efecto del grosor w de la corteza

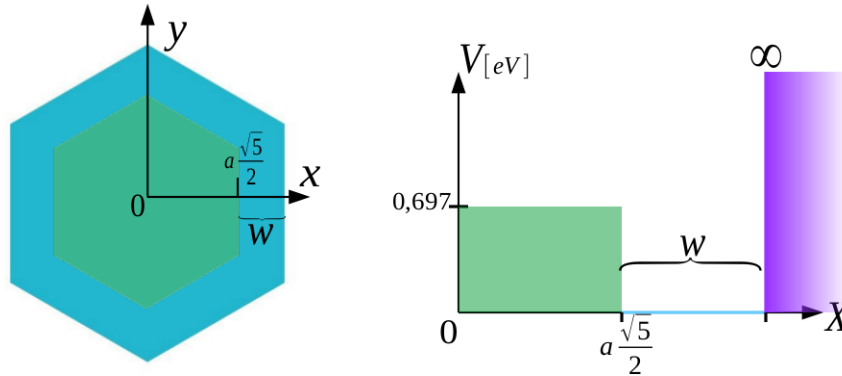


Figura 3.1. Esquema del potencial estructural en la sección transversal del CSNW.

En primer lugar se estudió el efecto que tiene el grosor de la corteza del CSNW, que también puede ser llamado el grosor del anillo, en la localización electrónica, pues al tener en la sección central un material con potencial de confinamiento finito, hay probabilidad, bajo ciertas condiciones, de que la partícula cargada se encuentre en esta región, probabilidad que tiene relación directa con la energía del estado base, la cual a su vez depende del grosor w ya que el valor de la energía del estado base en un NW es inversamente proporcional al ancho de este. Si el parámetro w es lo suficientemente pequeño de modo que la elevación de la energía base sobrepase la barrera de confinamiento estructural del núcleo, la probabilidad de encontrar la partícula cargada en este aumenta considerablemente y el electrón se comporta como si estuviese en un QD. Si, por el contrario, este grosor es lo suficientemente grande, los niveles energéticos inferiores no superan la barrera de confinamiento, localizándose el electrón principalmente en la corteza. El valor de w que separa estos dos comportamientos fue denominado w_{limit} y se encontró en 2,4 [nm]. Lo anterior

mencionado es más entendible observando el gráfico 3.1, donde se tiene un esquema del potencial estructural para un corte a lo largo del eje X , el radio a del núcleo es fijo, por lo que es el grosor w de la corteza quien determina la separación de los niveles energéticos.

En el gráfico 3.2a se aprecia la probabilidad electrónica para $w = 15$ [nm], un ancho considerablemente mayor al valor límite. En este caso se aprecia la mayor probabilidad de encontrar el electrón en las esquinas de la corteza hexagonal. Esto se debe a que la longitud radial en las esquinas es mayor que en las regiones rectas, por lo que el confinamiento electrónico es menor y también son regiones puntiagudas para las cuales se puede considerar que la frontera exterior presenta una curvatura infinita, lo cual se traduce en la presencia de pozos de potencial tal como se estableció en la ecuación 1.

Para grosores de la corteza de menor magnitud, pero sin cruzar el valor límite, se observan dos casos muy diferentes: en la figura 3.2b para $w = 6$ [nm] se aprecia que la probabilidad electrónica, a pesar de continuar presentando máximos en los vértices de la estructura, está más extendida a lo largo de los lados rectos que en el caso anterior. Este efecto se observa debido a que la reducción de confinamiento, y su consecuente elevación de la energía, permite que el estado base tenga energía suficiente para superar el potencial efectivo de las esquinas y que la probabilidad electrónica del estado base esté distribuida de manera más uniforme a lo largo de todo el anillo.

Cuando w es muy cercano a w_{limit} , pero aún mayor (2.5 [nm]) se advierte un gran cambio de comportamiento. El gráfico 3.2c muestra que para esta configuración, debido al fuerte confinamiento radial, el máximo de la probabilidad electrónica se mueve hacia el centro de los lados de la corteza, y por tunelamiento cuántico penetra hacia la región del núcleo.

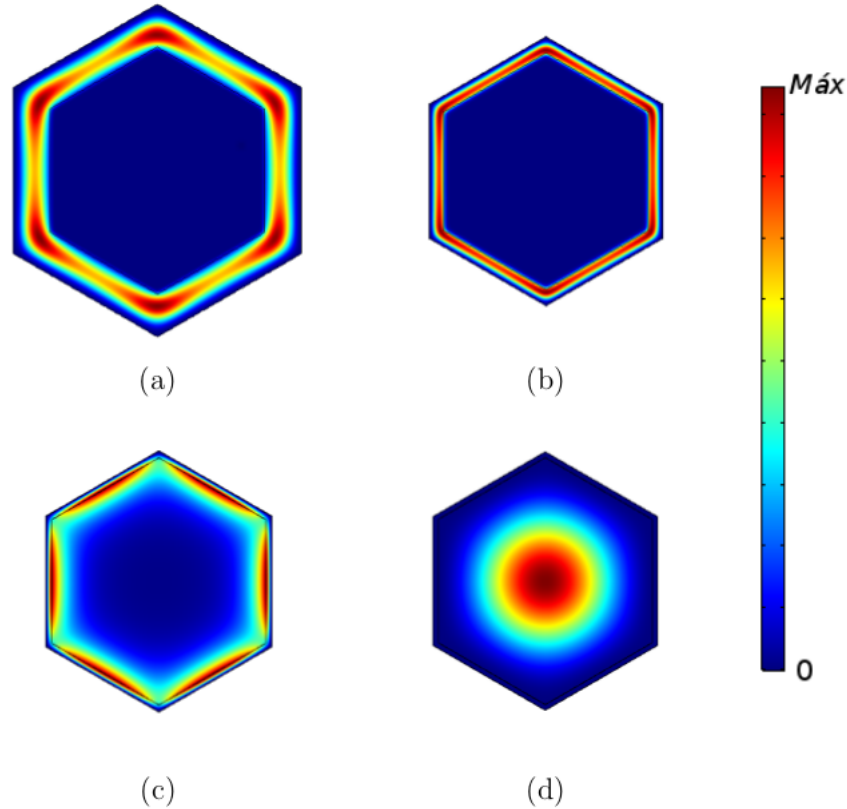


Figura 3.2. Densidad de probabilidad electrónica para diferentes grosores w de la corteza de *InAs*, (a) 15, (b) 6, (c) 2.5 y (d) 2 [nm].

El gráfico 3.2d ilustra la sección transversal del CSNW con $w = 2$ [nm]. En este caso se observa como el confinamiento radial llega a ser tan fuerte que la función de onda electrónica se desborda y el máximo de la densidad de probabilidad electrónica se traslada al centro del núcleo, disminuyendo muy cercana a cero la probabilidad de encontrar el electrón en la corteza.

En el gráfico 3.3 se aprecia el comportamiento de la energía del estado base en función del grosor w .

Para grandes magnitudes de w la energía del estado base es pequeña, y va aumentando con la reducción de w , ya que la estrechez del confinamiento se traduce, debido al principio de

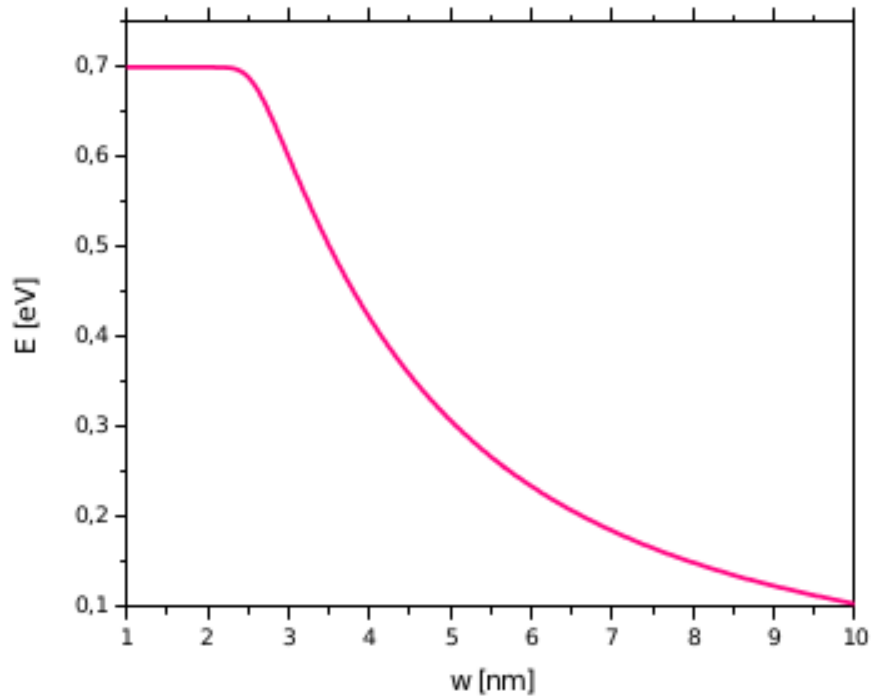


Figura 3.3. Variación de la energía del estado base en función del grosor w de la corteza.

incertidumbre, en mayores energías para el estado base. Sin embargo este comportamiento tiene un límite al rededor de $w = 2.4$ [nm], valor que ha sido denominado w_{limit} , ya que en este caso la energía del estado base es de tal magnitud que puede superar la barrera de confinamiento del material en el centro del CSNW, permitiendo la localización electrónica en esta región central; a partir de este valor de w , la disminución de la corteza no afecta notablemente la energía, el pequeño efecto que tiene se refleja en las décimas de milielectronvoltios.

En la tabla 1 se aprecian las densidades de probabilidad electrónica para sistemas con diferentes grosores del parámetro w , uno mucho mayor a w_{limit} , otro cercano y finalmente uno menor. Cada caso manifiesta los comportamientos característicos ya mencionados.

Derivado de la idea del modelo atómico de Bohr el cual afirma que la energía del electrón

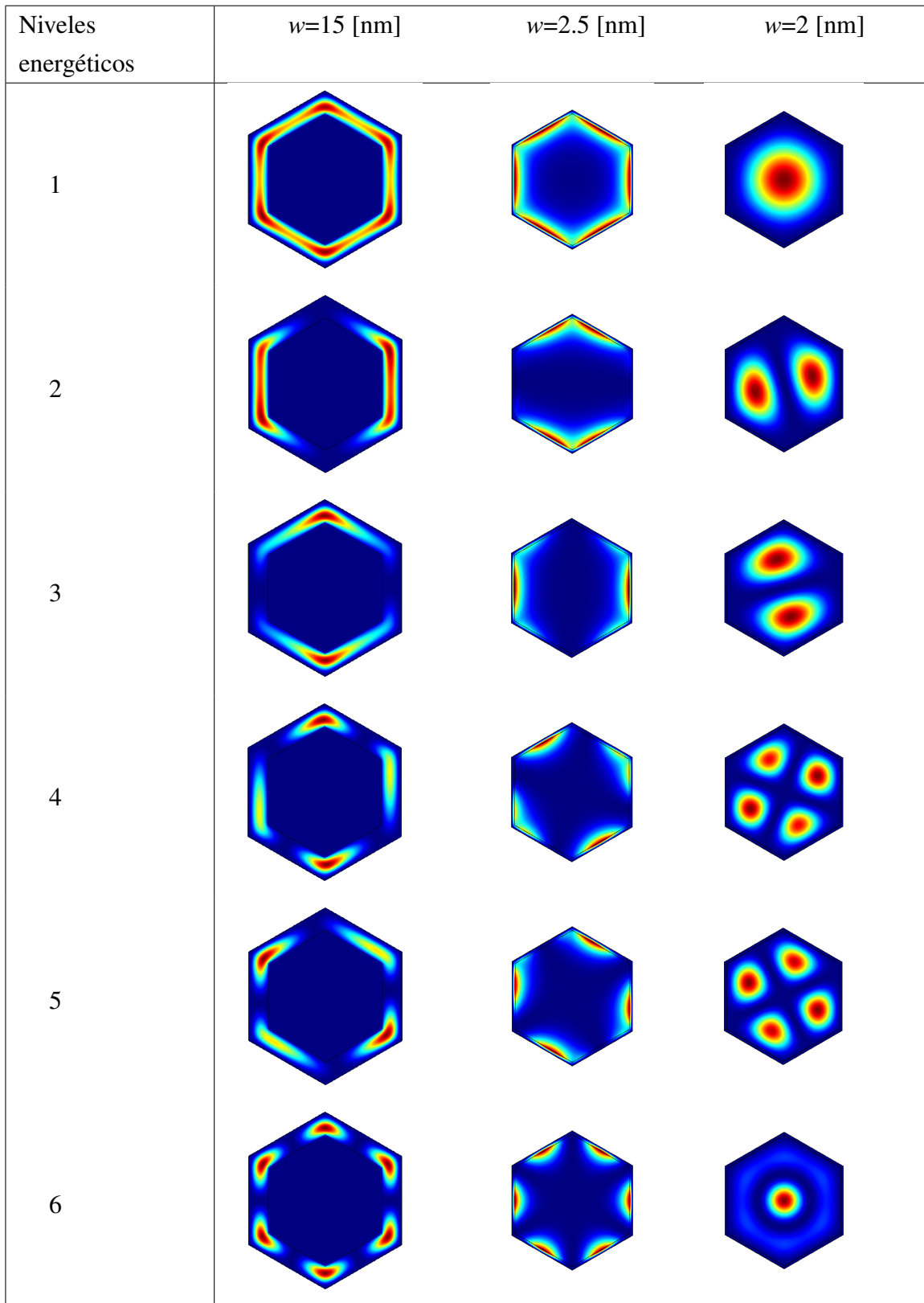


Tabla 1

Densidades de probabilidad electrónicas para diferentes grosores de la corteza w y diferentes niveles energéticos.

al rededor del núcleo está cuantizada, se obtiene naturalmente la noción de que la cuantización energética observada en ciertas nanoestructuras podría comportarse de manera similar a aquella de un átomo o molécula. Los arreglos específicos de QDs son las nanoestructuras más utilizada con este fin, ya que actúan como núcleos que localizan los electrones en regiones lo suficientemente pequeñas, de manera análoga a la idea más general que se tiene de un átomo o molécula. La relación directa que tienen la densidad de probabilidad electrónica con los orbitales atómicos y orbitales moleculares da una idea más ilustrativa de ésta analogía.

Comenzando por la esquina superior derecha de la tabla 1, cuando, por la magnitud de las energías y también debido a las condiciones de frontera, el electrón se comporta como si estuviese en un QD, se puede apreciar que el estado 1 corresponde a la forma de un orbital atómico 1s, donde la mayor probabilidad electrónica se encuentra en el centro de la estructura. Los estados siguientes, 2 y 3, corresponden a un nivel degenerado del sistema y tienen la forma característica de orbitales p_x y p_y . El orbital p es triplemente degenerado sin embargo no hay presencia de un orbital p_z debido a que en la dirección \hat{k} de la estructura no hay un fuerte confinamiento comparable al de la sección transversal. Los niveles 4 y 5 son representativos de orbitales tipo d_{xy} y $d_{x^2-y^2}$, excluyendo por razones ya mencionadas aquellos orbitales que involucran la dirección \hat{k} . Finalmente en el nivel 6 se observa un estado 2s, con un nodo radial y una región anular concéntrica de menor amplitud que la central.

Para las dos columnas restantes de la tabla 1 no es posible realizar la misma analogía ya que estas configuraciones no corresponderían a las de un átomo artificial; para el caso en el cual $w = 15$ [nm], de acuerdo a la sección 1.1.2.2 se puede considerar que el potencial efectivo en las

esquinas actúa como 6 núcleos atractivos para el electrón, la simetría hexagonal de la estructura resulta en estados con degeneración recurrente 1-2-2-1, lo cual es característico de una molécula de benceno (C_6H_6). Cabe señalar que ésta molécula, el compuesto aromático principal y respecto al cual se determina la aromaticidad de los demás compuestos orgánicos, presenta una estructura hexagonal regular análoga a la estructura de interés en este trabajo, por lo que el encuentro de estas semejanzas no es fortuito. Respecto a los orbitales moleculares, estos son más complejos que los orbitales atómicos y se clasifican en dos grandes grupos: enlazantes y antienlazantes; en el caso del benceno y debido a la hibridación sp^2 de los orbitales de sus átomos de carbono, se generan 6 orbitales moleculares π , de los cuales se ocupan los 3 orbitales enlazantes ya que son los de menor energía, esta es la característica que le otorga su gran estabilidad molecular. Comparando la forma de estos orbitales con el primer grupo de 6 estados energéticos obtenidos para $w = 15$ [nm], se revela que el primer estado corresponde a un orbital enlazante tipo π_1 ; los siguientes dos estados tienen la misma energía y ambos presentan una línea nodal, los estados π_2 y π_3 del benceno se caracterizan por tener una línea nodal que cruza, en el primer caso, el centro de dos lados rectos de la estructura, y para el segundo caso atraviesa dos esquinas, lo cual corresponde a los estados 3 y 2 respectivamente; la densidad de probabilidad electrónica en los estados 4 y 5 presentan 2 líneas nodales en posiciones muy aproximadas a los orbitales antienlazantes π_4^* y π_5^5 del benceno; finalmente la distribución del estado 6, con 3 ejes nodales que atraviesan los lados rectos de la estructura, es característica del orbital antienlazante π_6^* del benceno. Todo lo anterior pone de manifiesto como la simetría hexagonal de la estructura modula la distribución de probabilidad de los diferentes estados. Cabe agregar que estos resultados se corresponden con aquellos presentados

en el artículo Ballester et al. (2012).

Una revisión de las degeneraciones de los niveles energéticos para el caso de $w = 2.5$ [nm] revela que estos no están ordenados de la misma manera que en el caso anterior ya que las degeneraciones obtenidas no presentan el mismo patrón más allá de los primeros 6 niveles. Realizado la misma analogía con los orbitales atómicos de la molécula de benceno, y estableciendo las esquinas de la estructura como los núcleos de una molécula artificial, se puede afirmar que 5 de ellos son similares a aquellos de la molécula de benceno; en el primer estado hay una nube de probabilidad que se extiende de manera casi circular conectando toda la estructura, con lo que este sería el orbital enlazante de menor energía π_1 del benceno. Desde el estado 2 hasta el 4 se observan claramente los ejes nodales y la correspondencia en la ubicación de estos con los orbitales moleculares desde π_2 hasta π_4^* respectivamente, de manera más clara y precisa que en el caso para el cual $w = 15$ [nm]. El último estado de este grupo, sin embargo, no corresponde a un orbital característico de la molécula de benceno, en este caso la localización electrónica está centrada en las secciones rectas de la estructura, por lo cual podría decirse que se trata de un orbital con comportamiento enlazante.

3.2. Efecto del campo magnético

Debido a la morfología de anillo de la sección transversal del CSNW, es interesante estudiar el efecto del campo magnético aplicado en dirección longitudinal a este ya que, como se mencionó en la sección 1.1.2.1, con estas condiciones es posible observar las consecuencias del efecto AB en las oscilaciones de los niveles energéticos y en la magnetización.

En la tabla 2 se ilustran las funciones de onda de QRs hexagonales con diferente grosor del parámetro w para campo magnético nulo en la primera fila, e igual a 5[T] en la segunda, con

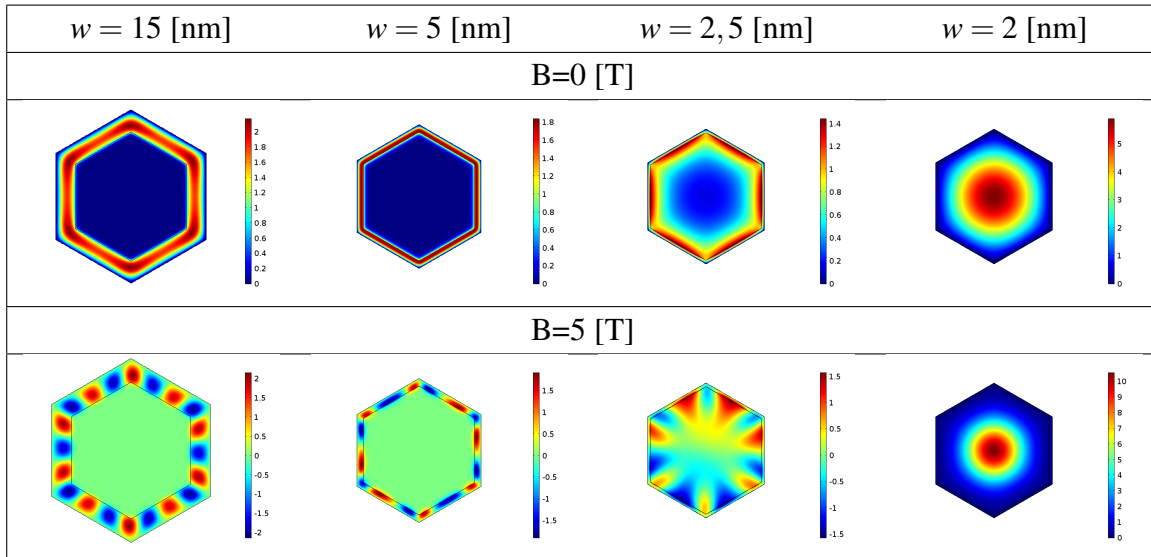


Tabla 2

Funciones de onda del estado base en ausencia y presencia de campo magnético para cuatro diferentes valores del parámetro w .

el objetivo de observar el efecto de este sobre el estado base en cada una de estas situaciones. Se decidió el uso de las funciones de onda en lugar de las densidades de probabilidad electrónicas por motivos de facilidad en la visualización. Comparando las dos filas de este cuadro se puede evidenciar cómo la presencia de campo magnético afecta la localización electrónica, previamente determinada en gran parte por el potencial efectivo en las esquinas del la corteza. En los casos correspondientes a $w = 15$ y 5 [nm] se observa la aparición de nodos y máximos en la corteza, en lugares donde antes no los había, debido a la Fuerza magnética de Lorentz que induce a la partícula cargada a rotar a lo largo del anillo, el efecto atractivo de las esquinas no es muy marcado en este caso.

La situación en un poco diferente cuando $w = 2,5$ [nm]. Como se mostró en la figura 3.2(c), para este caso la localización electrónica está altamente afectada por las condiciones de frontera,

que alejan al electrón del potencial efectivo de las esquinas de la corteza. Con la aplicación de un campo magnético $B = 5$ [T] se observa nuevamente un cambio de comportamiento en las regiones cercanas al borde de la estructura, con mayor probabilidad de tunelamiento debido al efecto de confinamiento central que produce el término diamagnético, lo cual no era muy apreciable en los dos anteriores casos. Finalmente para la última columna de la tabla se observa únicamente, y de manera aún más clara, cómo la magnitud del campo magnético induce un confinamiento central del electrón que aumenta junto con la magnitud B .

Los esquemas de las figuras 3.4 y 3.5 muestran los espectros energéticos contra el campo magnético para diferentes valores del parámetro w .

Lo primero que se puede apreciar en ambos conjuntos de gráficos (3.4 y 3.5) es que la presencia de campo magnético produce un desacoplamiento de los estados cuánticos degenerados obtenidos en ausencia de este. Cuando la magnitud del campo magnético es cero, el signo del momentum angular del electrón, que está directamente relacionado con el número cuántico magnético m , no tiene efecto en las energías del sistema, de aquí que se encuentren estos estados energéticos degenerados. Al introducir un campo magnético el signo del momentum angular, y por lo tanto el del número cuántico magnético m , sí tiene consecuencias en la energía, ya que no es lo mismo, desde el punto de vista energético, tener una rotación en contra a la fuerza magnética de Lorentz que tener una a favor de esta, lo que tiene como resultado el rompimiento de la degeneración.

El siguiente aspecto notable es el hecho de que los niveles energéticos para valores de la corteza mayores al valor límite (figura 3.4) presentan un comportamiento oscilatorio. Además de lo mencionado en la sección 1.1.2.1 es posible darle sentido a este comportamiento mediante

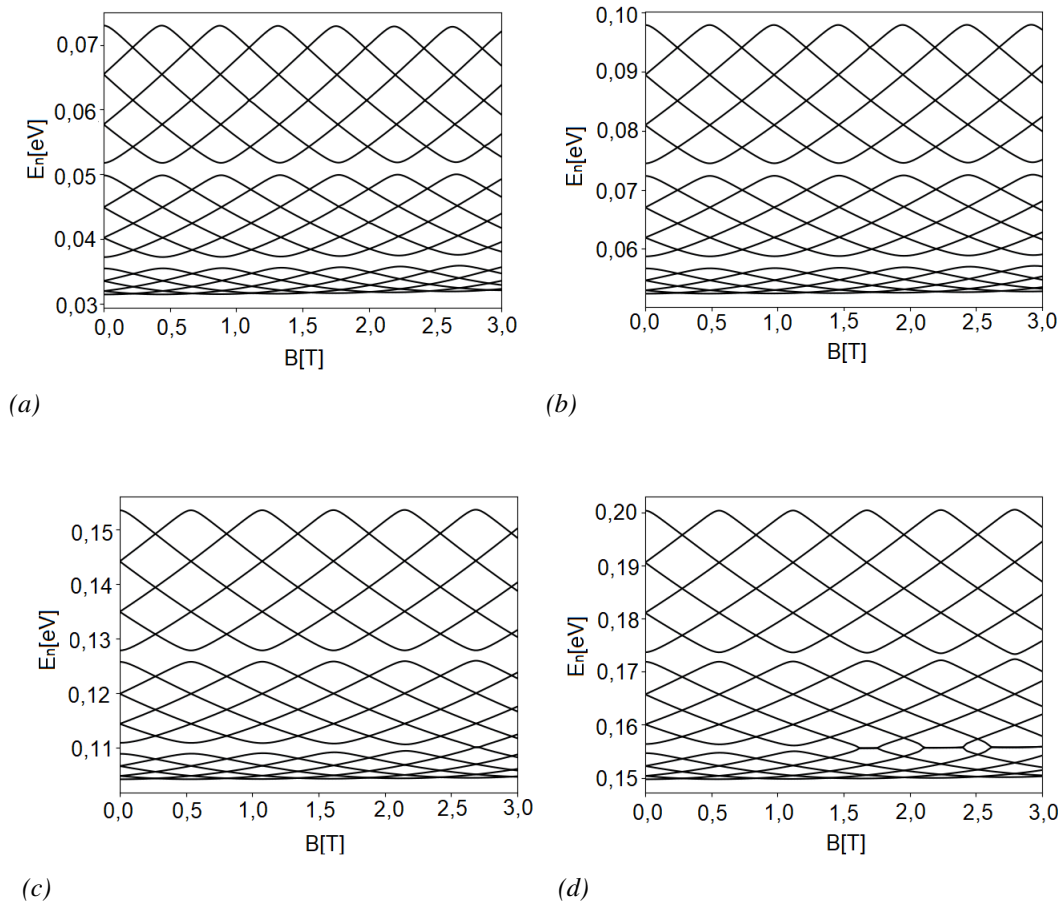


Figura 3.4. Niveles energéticos de un electrón confinado en un CSNW hexagonal en función del campo magnético para diferentes grosores w de la corteza de InAs: (a) 20, (b) 15, (c) 10 y (d) 8 [nm].

la observación de la ecuación de Schrödinger utilizada (4). Se aprecia que con la existencia de $B \neq 0$ los términos diamagnético y paramagnético entran en juego para las soluciones del problema; el término diamagnético tiene dependencia parabólica con el valor B , mientras que el término paramagnético tiene una dependencia lineal. La interacción de estos dos términos, sumado a la característica de la simetría doblemente conexas, la cual favorece un efecto de interferencia entre las funciones de onda con momento angular positivo y negativo, esta interferencia puede ser des-

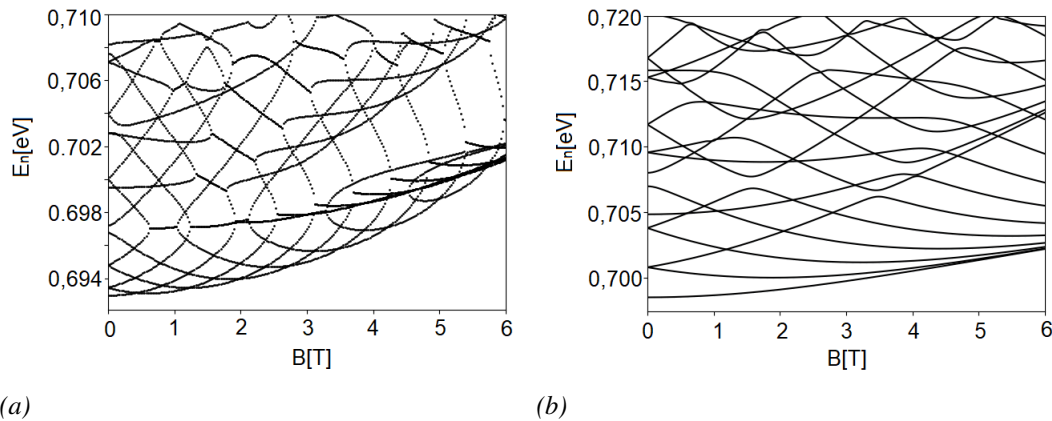


Figura 3.5. Energías de un electrón confinado en un CSNW hexagonal en función del campo magnético para valores del grosor de la corteza w de InAs cercanos y menores al valor límite: (a) 2.5 y (b) 2 [nm].

tructiva o constructiva, dependiendo del valor del campo magnético, y su consecuencia se observa en las oscilaciones de los niveles energéticos.

Sin embargo este análisis aislado no corresponde totalmente a lo observado en este grupo de gráficos, ya que se advierte que, además de oscilar, los niveles forman grupos, o subbandas, de 6 niveles energéticos oscilantes, esto está totalmente relacionado con la morfología hexagonal del CSNW; recordando las ideas de la sección 1.1.2.2, debido a la curvatura no homogénea del sistema, se puede considerar la analogía del anillo hexagonal con una molécula artificial de 6 núcleos atractivos equidistantes que conforman una cadena cerrada, o con un nanocrystal con condiciones de frontera periódicas y simetría C_6 . Para tal configuración el espectro energético del electrón difiere notablemente del de un anillo circular, ya que en este caso aparecen anticruces entre orbitales con igual simetría, y por lo tanto el espectro se configura por capas compuestas por 6 orbitales cada una, las cuales están separadas por brechas.

Si se observa en detalle los valores de la energía en cada uno de los gráficos en esta misma figura se aprecian nuevamente las consecuencias del principio de incertidumbre de Heisenberg, ya que es evidente el incremento de la separación de los niveles energéticos con el decrecimiento del parámetro w . Otro efecto que tiene éste parámetro se observa en el periodo de oscilación de los espectros energéticos. Para un QR circular, el periodo de oscilación se calcula mediante la fórmula $T = \Delta B = \frac{h}{e\pi R^2}$, donde R es el radio medio de la estructura, sin embargo en esta estructura se puede identificar otra medida además del radio del polígono: la apotema, por lo que el cálculo debió ser realizado con una longitud media que tomase en cuenta estas dos. Calculando la media geométrica entre la apotema y el radio del hexágono, y mediante la expresión para el periodo de un anillo circular, se obtuvieron valores del periodo de oscilación que coinciden bastante bien con las curvas de la figura 3.4. Respecto a este periodo T , hay que destacar que aumenta con la disminución del grosor w , lo cual está de acuerdo con la expresión para esta magnitud, ya que el parámetro w afecta directamente la media geométrica del radio.

Otro aspecto interesante que salta a la vista se encuentra en los gráficos 3.4c y 3.4d. En CSNWs con cortezas de espesores 10 y 8 nm se observa que, para valores de B mayores a 2.5 y 1.5 [T] respectivamente, tiene lugar la desaparición de la brecha energética entre las dos subbandas más bajas, esto es, la mezcla entre los niveles de la primera y la segunda subbanda. Este comportamiento está relacionado con el confinamiento magnético radial que impone el término diamagnético, el cual para valores superiores a los mencionados anteriormente, comienza a dominar sobre el confinamiento estructural hexagonal y lleva a la homogeneización de la densidad de probabilidad electrónica en la corteza similar a aquella observada en QR circulares, en los cuales

la densidad de probabilidad electrónica es radialmente simétrica, lo cual resulta en la reestructuración del espectro similar a la de un QR circular. Por otro lado, este particular comportamiento coincide con resultados obtenidos por A. Fuhrer [Fuhrer et al. (2001)], donde se observó que las perturbaciones sobre la simetría circular de QR pueden conducir a la mezcla de estados con momentos angulares positivos y negativos, lo cual lleva, en algunos casos, a tener niveles invariantes ante el campo magnético. Tales estados cruzan los niveles fuertemente oscilantes.

En el siguiente grupo de gráficas (3.5) se tiene nuevamente la energía contra el campo magnético, esta vez para un valor de w ligeramente superior al valor límite y un valor inferior a este, se pueden apreciar dos comportamientos muy diferentes en este conjunto de gráficos.

La figura 3.5b muestra un espectro característico de un QD. La forma de los niveles energéticos en QDs depende de la geometría en la que el electrón está confinado, la cual es perceptible en el comportamiento de los más bajos niveles energéticos a bajas intensidades del campo magnético, ya que si se observa con detenimiento esta zona, se puede apreciar una tendencia a agruparse nuevamente de a 6 niveles; sin embargo es común el hecho de que los niveles más bajos no presenten cruces repentinos, pero a medida que la energía aumenta, el número de cruces se incrementa debido a que la energía electrónica es de tal magnitud que el portador de carga no se ve afectado por las particularidades estructurales. Para valores mucho más intensos de campo magnético se observa cómo la energía tiende a agruparse en niveles de Landau, ya que el confinamiento del término diamagnético eleva la energía del electrón, por lo que el confinamiento estructural se hace menos importante.

El espectro obtenido en la figura 3.5a no es equiparable a aquel de QDs o QRs usualmen-

te analizados, su región inferior recuerda vagamente al espectro energético de un QR circular; sin embargo, para niveles energéticos mayores, el espectro energético rápidamente pierde consistencia con aquel de un QR circular y nuevamente se presentan estados que apenas oscilan con el campo magnético, tal como en los casos 3.4c y 3.4d, sumando el hecho de que en esta situación también hay una tendencia, aunque muy débil, de agruparse en paquetes de a 6 para bajas energías. Recordando que para $w = 2.5$ [nm] se obtuvo una densidad de probabilidad electrónica del estado base muy diferente a los demás casos (figura 3.2c); al ser este un caso intermedio donde, dependiendo de la intensidad del campo magnético y de el nivel de energía, se tiene un híbrido entre los espectros de QR y QD, no se espera el espectro de uno u otro, sino un espectro único acorde con las condiciones particulares del caso.

El sistema electrón-nanoestructura seleccionada es propicio para la aparición de corrientes persistentes debido a la morfología doblemente conexa que permite ver el electrón como una carga en circulación por el QR; del modelo del dipolo magnético de Ampère, donde se tiene una pequeña espira de corriente generadora de un campo magnético, se puede considerar que el sistema de interés en este trabajo también corresponde a un dipolo magnético según este modelo, por este motivo se decidió calcular el momento magnético dipolar (M) del sistema electrón-CSNW, ya que esta es la cantidad que caracteriza los dipolos magnéticos, además de que el hallazgo de alguna anomalía en el comportamiento de esta cantidad podría ser de interés aplicativo. En el gráfico 3.6 se aprecia la dependencia del momento dipolar magnético en función del campo magnético a $T=0$ K para diferentes valores del parámetro w , obtenidas mediante la relación $M = -\partial E_0 / \partial B$. Las oscilaciones que se observan en los casos 3.6a y 3.6b son consecuencia directa de las oscilaciones AB, ya que

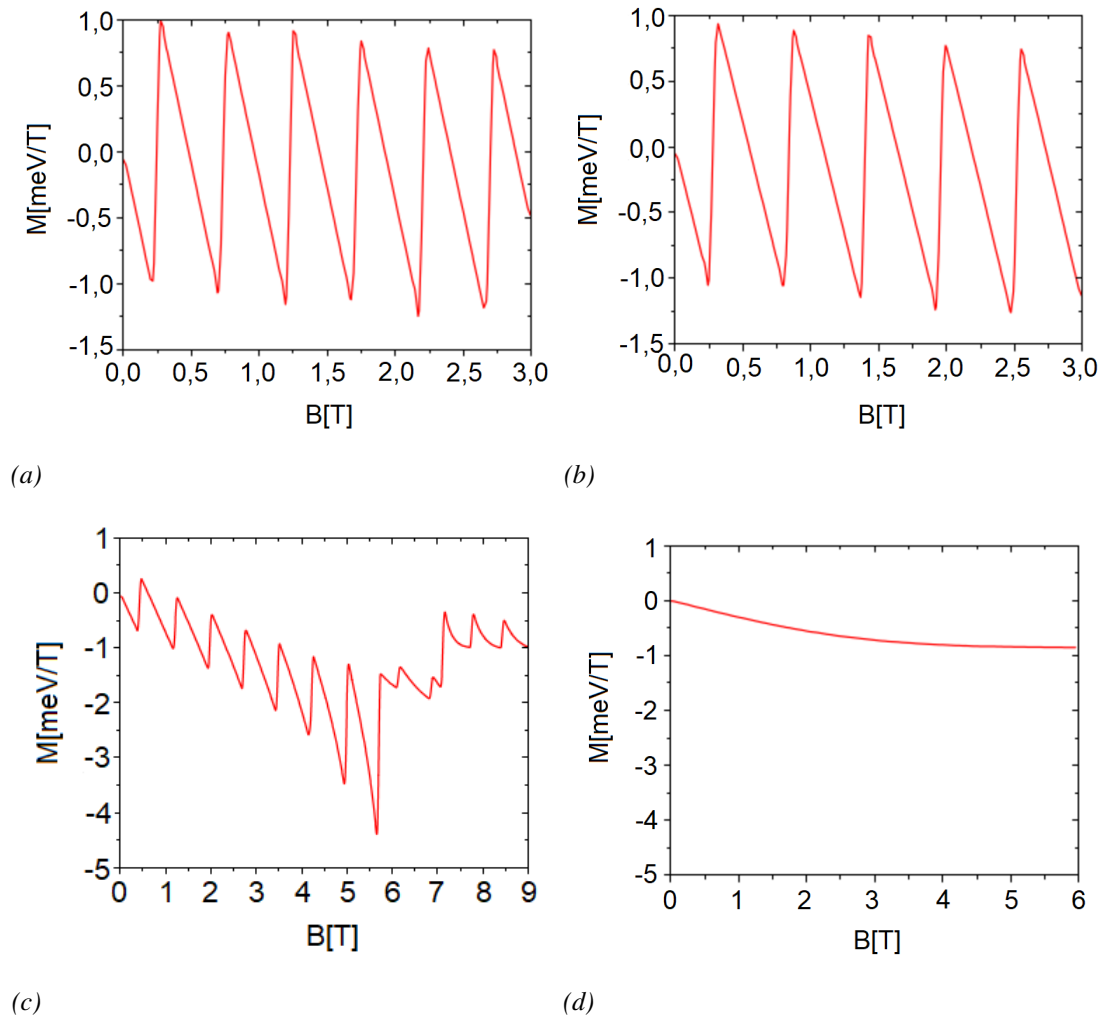


Figura 3.6. Momento magnético dipolar M respecto a la intensidad del campo magnético para 4 grosores diferentes de la corteza: (a) 15, (b) 8, (c) 2.5 y (d) 2 [nm].

al presentarse oscilaciones energéticas debido al campo magnético, todas las propiedades magnéticas de la estructura también serán afectadas por esto. Observando estos dos primeros gráficos se comprueba que la frecuencia de las oscilaciones, tal como en las oscilaciones AB, aumenta con el grosor w de la corteza. Sin embargo aparte de esto, la diferencia en las magnitudes del momento magnético dipolar no son significativas entre estas dos situaciones.

El gráfico 3.6c es quizá el más interesante de todos, debido a que se calcula para un valor de w muy cercano a w_{limit} , esta región de unos pocos nanómetros (podría delimitarse de 2.4 a 2.8 [nm]) mayor a w_{limit} puede ser referida como una *región de transición*. Debido a que en el estado base del espectro energético no se presentan las anomalías que son evidentes para niveles energéticos superiores, se encuentra que el momento dipolar magnético en este caso continúa exhibiendo un comportamiento oscilatorio, con la novedad de que la amplitud de las oscilaciones se va incrementando con el aumento de la intensidad del campo magnético, se alcanza a apreciar como, para campos mayores a 5.5 [T], la amplitud de las oscilaciones disminuye abruptamente y después de 7.5 [T] las oscilaciones presentan un comportamiento muy similar a aquel observado en QRs circulares, comportamiento que se puede apreciar en el gráfico 3.7. Este comportamiento para grandes campos magnéticos se presenta debido a que el comportamiento rotatorio del electrón inducido por el campo magnético, para estas grandes magnitudes, prevalece sobre el confinamiento estructural y su geometría.

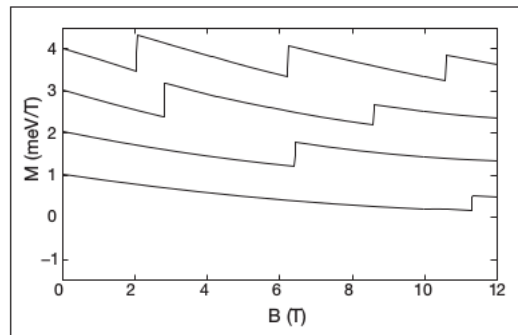


Figura 3.7. Momento dipolar magnético de un electrón confinado en QR circulares con diferentes radios internos: 1, 2, 5 y 10 [nm] (en orden ascendente). Tomado y modificado de Climente and Planelles (2008).

Por último, la figura 3.6d muestra una vinculación del momento dipolar magnético a la

magnitud del campo magnético característica de un QD, como era de esperarse. Para este caso, debido a que el estado energético base del sistema no presenta cruces, i.e. siempre corresponde al número cuántico magnético 0, no se tienen oscilaciones en la magnetización y se obtiene un gráfico suave.

3.3. Efecto del campo eléctrico

El primer aspecto a considerar tras la introducción del campo eléctrico es cómo éste afecta el potencial efectivo de todo el sistema. El efecto de este en una dirección determinada se ve reflejado, para portadores de carga negativa, en la *inclinación* de la forma del potencial estructural con una pendiente de magnitud eF respecto a la dirección de aplicación del campo, como puede verse en el esquema 3.8. Esto tiene como consecuencia que algunas regiones, y particularmente las esquinas en dichas regiones, presenten menor potencial efectivo que otras, con lo que el electrón, en su naturaleza de tender a la menor energía, prevalecerá estas esquinas.

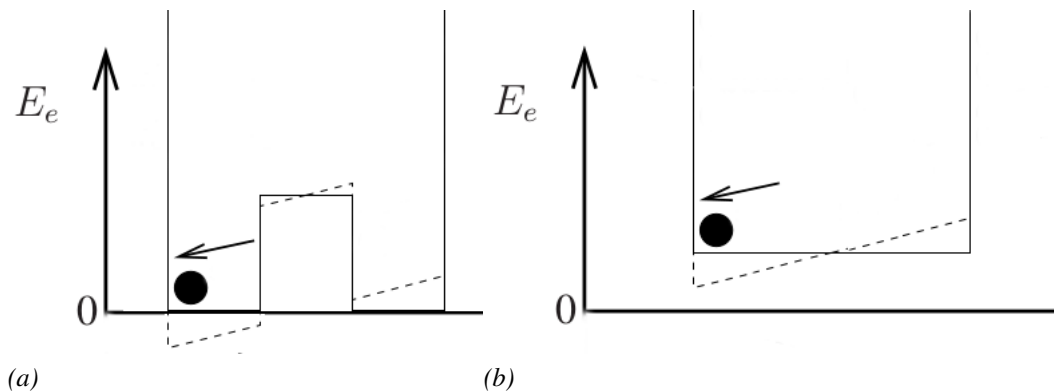


Figura 3.8. Esquema lateral del efecto del campo eléctrico aplicado en dirección X sobre el potencial efectivo para CSNWs con (a) $w = 15$ y (b) $w = 2$ [nm], en este último caso se ignora el pequeño grosor de la corteza. Tomado y modificado de Harrison and Valavanis (2016).

Este efecto sobre el potencial efectivo de la estructura se evidencia en los gráficos de la

figura 3.9. La dirección del campo eléctrico es positiva respecto al eje x de un plano cartesiano comúnmente orientado, con lo que el electrón siente una fuerza en sentido contrario de esta dirección, lo que resulta en su fuerte localización en la región izquierda de la estructura en todos los casos debido a la magnitud del campo aplicado para un ángulo 0° respecto al eje horizontal y en la esquina inferior izquierda de la estructura cuando el campo está orientado a un ángulo de 30° respecto al eje horizontal.

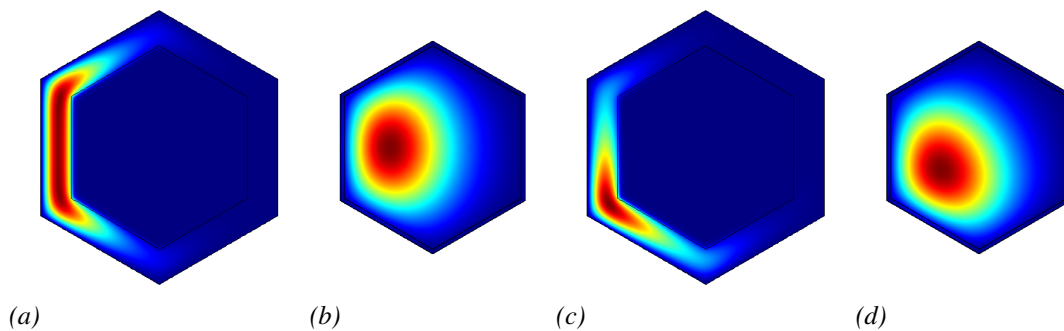


Figura 3.9. Funciones de onda para el electrón confinado en estructuras con grosor de la corteza de (a,c) 15 y (b,d) 2 [nm] bajo el efecto de un campo eléctrico de intensidad 1 [kV/cm] aplicado en 2 direcciones: (a,b) paralelo al eje horizontal y (c,d) a 30° respecto a este.

Una consecuencia que no es apreciable en los gráficos, pero que es resultado de observar en detalle los valores numéricos para los niveles energéticos más bajos arrojados por el software, es decir, aquellos niveles más fácilmente afectados por pequeñas perturbaciones, es el efecto de disminución de potencial efectivo en a las esquinas; cuando el parámetro w es de ancho 15 [nm] y la probabilidad electrónica se localiza en la corteza, si el campo eléctrico es aplicado a lo largo de uno de los radios de la estructura, como es el caso a 30° (3.9c) y el confinamiento se da en uno de los vértices, las energías obtenidas son menores que aquellas conseguidas cuando la dirección del campo eléctrico confina el electrón en una de las secciones rectas de la corteza, el caso a 0° (3.9a);

aunque esta diferencia sea del orden de los milielectronvoltios bajo grandes campos eléctricos para el primer nivel energético, lo cual no es apreciable gráficamente, es evidencia del efecto en el potencial debido al cambio de curvatura del QR dada por la ecuación 1, un aspecto recurrente en este trabajo y que vale la pena señalar.

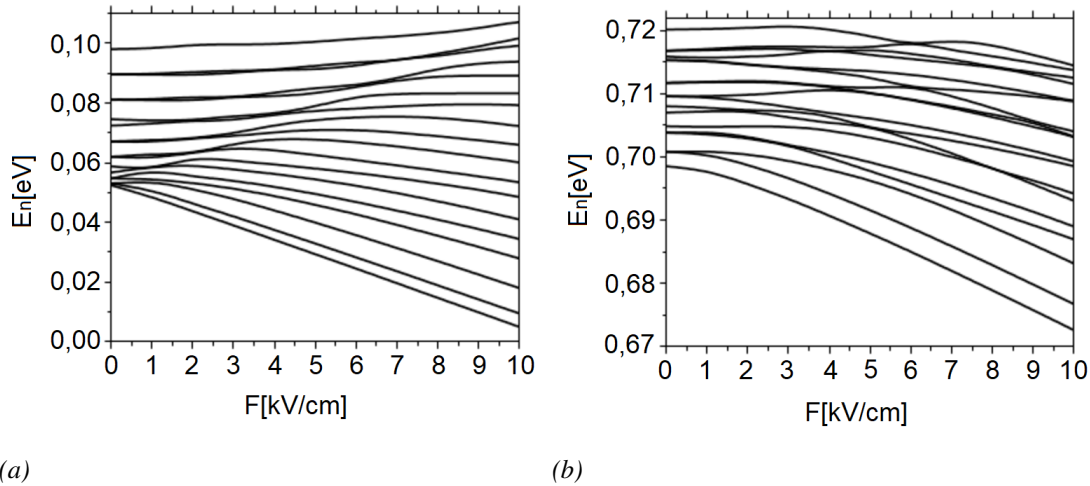


Figura 3.10. Dependencia de los niveles energéticos del campo eléctrico para CSWN con 2 diferentes grosores de la corteza, (a) 15 y (b) 2 [nm].

En los gráficos de la figura 3.10 se observa la evolución de los niveles energéticos respecto al campo eléctrico. Lo primero que salta a la vista es el rompimiento de los niveles degenerados, conocido como *Efecto Stark*, el cual se da en presencia de campo eléctrico; este se presenta más prontamente en los estados menos energéticos, mientras en aquellos con más energía se requieren campos eléctricos de mayor magnitud para conseguir este efecto.

Además se aprecia una diferencia significativa en el orden de las energías para los dos casos de la figura, lo cual no es consecuencia directa de la aplicación del campo eléctrico sino del potencial estructural del sistema; el orden de las energías es mucho mayor cuando $w = 2$ debido

a la mayor probabilidad electrónica en el centro de la estructura donde el potencial estructural no es cero, caso que se presenta cuando $w = 15$. Con relación a esto se observa un comportamiento diferente en la evolución de los niveles energéticos: en el gráfico 3.10a es notable que los niveles energéticos superiores presentan un incremento visible antes de que se rompa la degeneración, resultado que no se observa en el gráfico 3.10b, lo cual indica que éste es una consecuencia observada en morfologías tipo QR, por lo que no aparece en QDs. Esto se puede explicar más ilustrativamente haciendo uso de los diagramas en la figura 3.8.

En dicha figura se observan el efecto del campo eléctrico sobre el potencial estructural para los dos casos de interés en 3.10 y hay una diferencia esencial: mientras que en 3.10b el potencial dentro de la estructura resulta en una línea recta con pendiente eF , de modo que la zona de menor potencial se encuentra siempre a la izquierda, y la de mayor potencial siempre estará en la zona derecha, en la figura 3.10a, y manteniendo esta visión bidimensional con fines explicativos, se observa que, si bien la zona de menor potencial sigue siendo la izquierda, a la cual los niveles menos energéticos caen prontamente, la siguiente zona de menor potencial se encuentra en la derecha de la estructura, donde el electrón en los estados de mayor energía también tiene posibilidad de localizarse hasta determinados valores de campo eléctrico; el aumento de la magnitud de F produce un incremento en la pendiente que hace descender el potencial en la zona izquierda de la estructura a la par que eleva el potencial a la derecha, con lo que los estados energéticos situados en esta última región eventualmente sucumben.

3.4. Efecto de los campos magnético y eléctrico combinados

Una vez observados los efectos de la aplicación de campos eléctricos y magnéticos por separado, es importante ver cómo afecta la localización electrónica y el espectro energético la aplicación simultánea de estos dos.

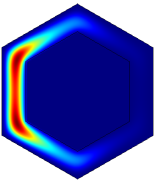
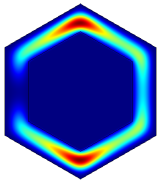
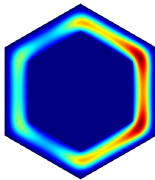
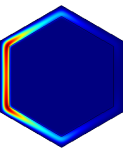
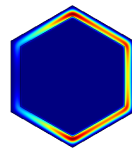
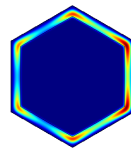
	Estados		
w [nm]	1	2	3
20			
8			

Tabla 3

Densidades de probabilidad electrónica de diferentes estados a intensidad de campo eléctrico 0.1 [kV/cm] y bajo la influencia de un campo magnético de 3 [T].

En la tabla 3 se observa el efecto de un campo magnético de 3[T] y un campo eléctrico de 0.1 [kV/cm] sobre estructuras con corteza de grosor 20 y 8 [nm]. En el estado 1 de ambos casos es notable cómo la probabilidad electrónica es altamente afectada por el campo eléctrico, la máxima probabilidad está a la izquierda de la estructura y no es muy apreciable el efecto del campo magnético. En el estado 2 se evidencia lo comentado en la subsección anterior, 3.3, respecto a la localización electrónica de estados más energéticos alejados de la región de menor potencial efectivo, además de notarse el efecto atractivo de las esquinas superior e inferior para $w = 20$ [nm]; para

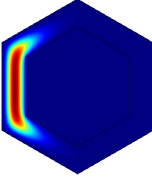
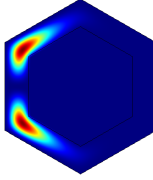
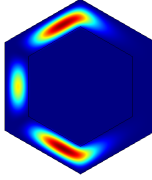
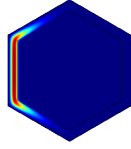
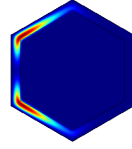
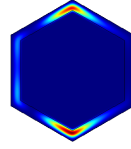
	Estados		
w [nm]	1	2	3
20			
8			

Tabla 4

Densidades de probabilidad electrónica de diferentes estados a a intensidad de campo eléctrico 1 [kV/cm] y bajo la influencia de un campo magnético de 3[T].

$w = 8$ [nm], debido a la mayor separación de los niveles energéticos como consecuencia del confinamiento, la probabilidad electrónica mayor está en una zona de potencial superior, más hacia la región derecha de la estructura. El estado 3 en ambos casos presenta mayor localización electrónica en la zona derecha de las estructuras, y tendencia un poco más visible a rotar debido a su mayor energía. Además, para estos últimos dos estados se puede afirmar que ya se ha roto la degeneración y el estado 2 corresponde a la rama energética inferior ya que se localiza en una región de confinamiento intermedia en la corteza, lo que hace evidente su menor energía en comparación al estado 3, que corresponde a la rama superior de esta degeneración, con energía suficiente para localizarse en la región derecha de la estructura, la región de la corteza de mayor potencial estructural.

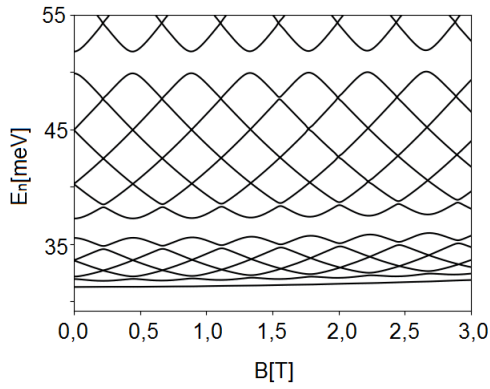
En la tabla 4 se tiene una situación similar, para un campo eléctrico $F = 1$ [kV/cm], por lo cual el efecto de este es mucho más fuerte que en la tabla 3, como se aprecia fácilmente en el

estado 1, donde el confinamiento es mucho más marcado hacia la región izquierda de la estructura. Igual que en el caso anterior, se encuentra que para los estados 2 y 3 ya se ha roto la degeneración.

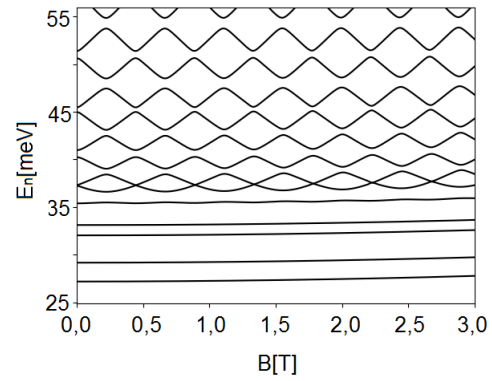
En el gráfico 3.11 se observa el efecto de dos diferentes intensidades de campo eléctrico sobre las oscilaciones AB para tres estructuras con w diferente. En el caso de un campo eléctrico relativamente suave, $F = 0.1$ [kV/cm], se observa como el primer estado energético de las imágenes 3.11a, 3.11c y 3.11e se desacopla de los demás; este desacoplamiento de niveles se debe al confinamiento en la zona de menor potencial energético producida por la inclinación del potencial observada en 3.8 por lo que no perciben los 6 vértices de la estructura y no se entrelazan con las subbandas que se crean entre los niveles energéticos superiores que sí interactúan con las 5 esquinas, los cuales no se ven afectados por la pequeña perturbación.

Cuando el campo eléctrico es de gran magnitud, $F = 1$ [kV/cm], es evidente en las figuras 3.11b, 3.11d y 3.11f cómo la inclinación de potencial efectivo es tan pronunciada que más niveles energéticos son confinados en la región izquierda de la estructura y el efecto de las 6 esquinas pasa a un segundo plano en términos de la influencia que estos tienen en el espectro energético, ya que para este caso se rompe totalmente la simetría de 6 dobles y el agrupamiento en subbandas que había predominado hasta el momento no es evidente para estos niveles energéticos.

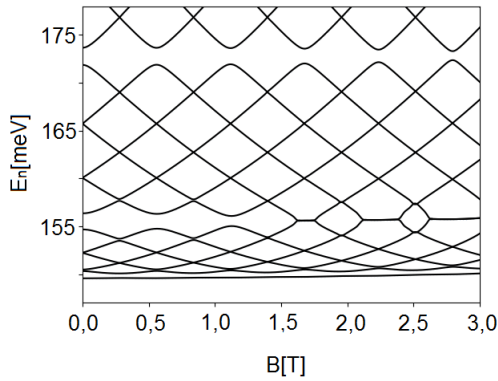
Por último, en el gráfico 3.11d se observa cómo la mezcla de las subbandas se produce para valores de campo magnético menores a aquellos obtenidos en la figura 3.4d. Aunque en este caso las subbandas no estén claramente definidas, se sigue presentando mezcla de los niveles energéticos para este valor de w pero, debido al rompimiento de la simetría hexagonal y al nuevo distanciamiento entre niveles inducido por el fuerte campo eléctrico, esta mezcla se presenta entre



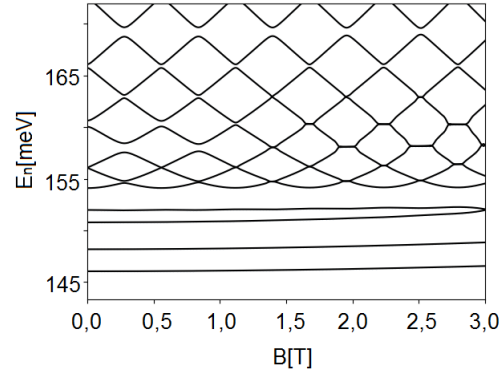
(a)



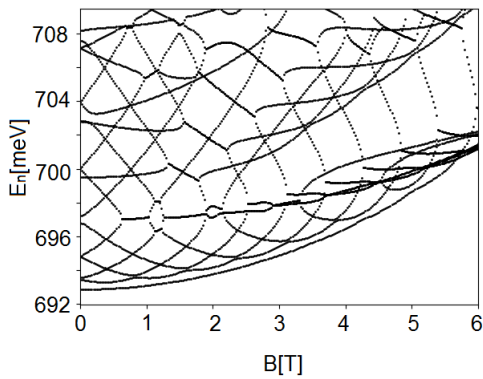
(b)



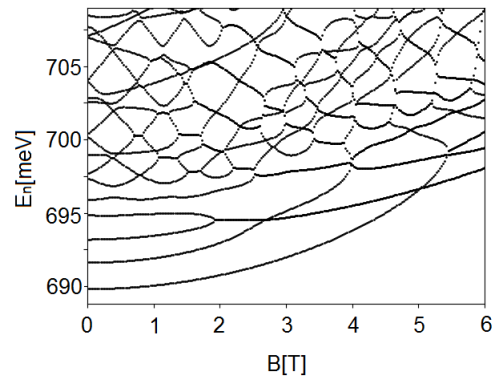
(c)



(d)



(e)



(f)

Figura 3.11. Dependencia de la energía contra el campo magnético a para dos valores fijos del campo eléctrico, (a,c,e) $F = 0, 1$ [kV/cm] y (b,d,f) $F = 1$ [kV/cm] para grosores de la corteza de (a,b) 20, (c,d) 8 y (e,f) 2,5 [nm].

los niveles 7 y 8, en lugar de los niveles 6 y 7, como se vio previamente.

4. Conclusiones

El análisis realizado en este trabajo de grado a partir de la solución de la ecuación de Schrödinger con la aproximación de masa efectiva para un electrón confinado en una nanoestructura bajo efectos de campos eléctricos y magnéticos puede ser sintetizado en los siguientes aspectos.

La capacidad del método de elementos finitos para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales en geometrías complejas permitió la obtención de resultados conformes a lo reportado hasta la fecha en lo que respecta a la localización electrónica en QRs hexagonales.

Se demostró que una partícula confinada en un CSNW de perfil hexagonal presenta un espectro de energía análogo al de la molécula de benceno, lo cual lleva a considerar estas estructuras como posibles candidatos de sistemas moleculares artificiales con gran potencial para futuras aplicaciones opto-electrónicas.

El modelar la estructura con un potencial de barrera finita permitió observar la importante modificación que experimenta el espectro electrónico debida al efecto tunel y al desbordamiento cuántico de la función de onda hacia el núcleo, cuando se tienen condiciones de confinamiento magnético fuerte.

Los resultados mostraron que un CSNW hexagonal resultó ser un buen candidato para observar diferentes regímenes de confinamiento estructural contra confinamiento magnético.

Referencias Bibliográficas

- The comsol® software product suite. <https://www.comsol.com/products>. Acceso: 2019-05-26.
- The finite element method (fem). <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>. Acceso: 2019-05-26.
- Aharonov, Y. and Bohm, D. (1959). Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Physical Review*, 115(3).
- Ballester, A., Planelles, J., and Bertoni, A. (2012). Multi-particle states of semiconductor hexagonal rings: Artificial benzene. *Journal of Applied Physics*, 112(10).
- Ballester, A., Segarra, C., Bertoni, A., and Planelles, J. (2014). Suppression of the aharonov-bohm effect in hexagonal quantum rings. *EPL (Europhysics Letters)*, 104(6):67004.
- Bruno-Alfonso, A. and Latgé, A. (2008). Quantum rings of arbitrary shape and non-uniform width in a threading magnetic field. *Physical Review B*, 77(20):205–303.
- Cheung, H.-F., Gefen, Y., Riedel, E. K., and Shih, W.-H. (1988). Persistent currents in small one-dimensional metal rings. *Physical Review B*, 37(11):50–60.
- Climente, J. I. and Planelles, J. (2008). Nanoscopic semiconductor quantum rings. *Contributions to Science*, 0(0).

COMSOL. *The COMSOL Multiphysics Reference Guide*. COMSOL.

COMSOL. *The COMSOL Multiphysics User's Guide*. COMSOL.

Corfdir, P., Marquardt, O., Lewis, R. B., Sinito, C., Ramsteiner, M., Trampert, A., Jahn, U., Geelhaar, L., Brandt, O., and Fomin, V. M. (2019). Excitonic aharonov–bohm oscillations in core–shell nanowires. *Advanced Materials*, 31(3):1805645.

Cui, L.-F., Ruffo, R., Chan, C. K., Peng, H., and Cui, Y. (2008). Crystalline-amorphous core- shell silicon nanowires for high capacity and high current battery electrodes. *Nano letters*, 9(1):491–495.

Currie, M., Wang, Z., Dianat, P., Prete, P., Miccoli, I., Lovergine, N., and Nabet, B. (2013). Large light emission enhancement in gaas/algaas coreshell nanowires. In *International Conference on One-Dimensional Nanomaterials, ICON2013, Annecy, France*.

Duan, X., Huang, Y., and Lieber, C. M. (2002). Nonvolatile memory and programmable logic from molecule-gated nanowires. *Nano letters*, 2(5):487–490.

Fomin, V. M. (2013). *Physics of quantum rings*. Springer Science & Business Media.

Fuhrer, A., Lüscher, S., Ihn, T., Heinzl, T., Ensslin, K., Wegscheider, W., and Bichler, M. (2001). Energy spectra of quantum rings. *Nature*, 413(6858):822–825.

Furthmeier, S., Dirnberger, F., Gmitra, M., Bayer, A., Forsch, M., Hubmann, J., Schüller, C.,

- Reiger, E., Fabian, J., Korn, T., et al. (2016). Enhanced spin-orbit coupling in core/shell nanowires. *Nature communications*, 7.
- García, L., Escorcía, R., and Mikhailov, I. (2018). Energy spectrum of shallow donor in elongated InAs/GaAs volcano-shaped quantum dot. *Advances in Condensed Matter Physics*.
- García, L., Mikhailov, I., and Paredes, H. (2017). Effect of conduction band nonparabolicity on Aharonov-Bohm oscillations in n-type InAs/GaAs quantum ring. In *Journal of Physics: Conference Series*, volume 935. IOP Publishing.
- García, L. F., Mikhailov, I. D., and Paredes, H. (2017). Effect of conduction band nonparabolicity on Aharonov-Bohm oscillations in n-type InAs/GaAs quantum ring. *Journal of Physics: Conference Series*, 935.
- Gélvez, A. L., Gutierrez, W., and Prada, F. R. (2016). Efecto Aharonov-Bohm en puntos cuánticos no uniformes. *INNOVACIENCIA*, 3(1):9–17.
- Gradečak, S., Qian, F., Li, Y., Park, H.-G., and Lieber, C. M. (2005). GaN nanowire lasers with low lasing thresholds. *Applied Physics Letters*, 87(17).
- Gutiérrez, W., García, L., and Mikhailov, I. (2013). Effect of bipartition on spectral properties of nanorings. *Physica B: Condensed Matter*, 421:63–68.
- Harrison, P. and Valavanis, A. (2016). *Quantum wells, wires and dots: theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures*. John Wiley & Sons.

- Hu, M., Giapis, K. P., Goicochea, J. V., Zhang, X., and Poulidakos, D. (2010). Significant reduction of thermal conductivity in si/ge core-shell nanowires. *Nano letters*, 11(2):618–623.
- Keyser, U., Borck, S., Haug, R., Bichler, M., Abstreiter, G., and Wegscheider, W. (2002). Aharonov–bohm oscillations of a tuneable quantum ring. *Semiconductor Science and Technology*, 17(5):L22.
- Kleemans, N., Bominaar-Silkens, I., Fomin, V., Gladilin, V., Granados, D., Taboada, A. G., García, J., Offermans, P., Zeitler, U., Christianen, P., et al. (2007). Oscillatory persistent currents in self-assembled quantum rings. *Physical review letters*, 99(14).
- Koguchi, M., Kakibayashi, H., Yazawa, M., Hiruma, K., and Katsuyama, T. (1992). Crystal structure change of gaas and inas whiskers from zinc-blende to wurtzite type. *Japanese journal of applied physics*, 31(7R):20–61.
- Lorke, A., Luyken, R. J., Garcia, J. M., and Petroff, P. M. (2001). Growth and electronic properties of self-organized quantum rings. *Japanese Journal of Applied Physics*, 40(3S):1857–1859.
- Mano, T., Kuroda, T., Sanguinetti, S., Ochiai, T., Tateno, T., Kim, J., Noda, T., Kawabe, M., Sakoda, K., Kido, G., et al. (2005). Self-assembly of concentric quantum double rings. *Nano letters*, 5(3):425–428.
- Marin, J., Suaza, Y., and Mikhailov, I. (2018). Hydrogen-like donor in a core-shell nanowire under electric and magnetic fields. *Chemical Physics Letters*, 709:88–95.

- Mitin, V. V., Sementsov, D. I., and Vagidov, N. Z. (2010). *Quantum mechanics for nanostructures*, chapter 1.1. Cambridge University Press.
- Niculescu, E. and Radu, A. (2010). Laser-induced diamagnetic anisotropy of coaxial nanowires. *Current Applied Physics*, 10(5):1354–1359.
- Nikishkov, G. (2004). Introduction to the finite element method.
- Richters, J., Voss, T., Kim, D., Scholz, R., and Zacharias, M. (2008). Enhanced surface-excitonic emission in zno/al₂o₃ core–shell nanowires. *Nanotechnology*, 19(30).
- Rieger, T., Luysberg, M., Schapers, T., Grutzmacher, D., and Lepsa, M. I. (2012). Molecular beam epitaxy growth of gaas/inas core–shell nanowires and fabrication of inas nanotubes. *Nano letters*, 12(11):5559–5564.
- Rodriguez Prada, F. A. (2013). *Sistemas de pocas partículas en anillos cuánticos no uniformes*. PhD thesis, Universidad Industrial de Santander, Escuela de Física.
- Sköld, N., Karlsson, L. S., Larsson, M. W., Pistol, M.-E., Seifert, W., Trägårdh, J., and Samuelson, L. (2005). Growth and optical properties of strained gaas- ga x in1-x p core- shell nanowires. *Nano letters*, 5(10):1943–1947.
- Somaschini, C., Bietti, S., Koguchi, N., and Sanguinetti, S. (2009). Fabrication of multiple concentric nanoring structures. *Nano letters*, 9(10):3419–3424.

- Switkes, E., Russell, E. L., and Skinner, J. L. (1977). Kinetic energy and path curvature in bound state systems. *The Journal of Chemical Physics*, 67(7):3061–3067.
- Tchernycheva, M., Travers, L., Patriarche, G., Glas, F., Harmand, J.-C., Cirlin, G. E., and Dubrovskii, V. G. (2007). Au-assisted molecular beam epitaxy of InAs nanowires: Growth and theoretical analysis. *Journal of Applied Physics*, 102(9).
- Torres, M. U., Sitek, A., Erlingsson, S. I., Thorgilsson, G., Gudmundsson, V., and Manolescu, A. (2018). Conductance features of core-shell nanowires determined by their internal geometry. *Physical Review B*, 98(8).
- Vurgaftman, I., Meyer, J. á., and Ram-Mohan, L. á. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of applied physics*, 89(11):5815–5875.
- Wallentin, J., Anttu, N., Asoli, D., Huffman, M., Åberg, I., Magnusson, M. H., Siefert, G., Fuss-Kailuweit, P., Dimroth, F., Witzigmann, B., et al. (2013). InP nanowire array solar cells achieving 13.8% efficiency by exceeding the ray optics limit. *Science*, pages 123–969.
- Webb, R. A., Washburn, S., Umbach, C., and Laibowitz, R. (1985). Observation of the Aharonov-Bohm oscillations in normal-metal rings. *Physical Review Letters*, 54(25).
- Yang, P., Yan, H., Mao, S., Russo, R., Johnson, J., Saykally, R., Morris, N., Pham, J., He, R., and Choi, H.-J. (2002). Controlled growth of ZnO nanowires and their optical properties. *Advanced Functional Materials*, 12(5):323–331.

Yin, L.-W., Bando, Y., Zhan, J.-H., Li, M.-S., and Golberg, D. (2005). Self-assembled highly faceted wurtzite-type zns single-crystalline nanotubes with hexagonal cross-sections. *Advanced Materials*, 17(16):1972–1977.

Yuan, X., Saxena, D., Caroff, P., Wang, F., Lockrey, M., Mokkaati, S., Tan, H. H., and Jagadish, C. (2017). Strong amplified spontaneous emission from high quality $\text{Ga}_{1-x}\text{Sb}_x$ single quantum well nanowires. *The Journal of Physical Chemistry C*, 121(15):8636–8644.