

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS DONADORAS NEUTRAS CONFINADAS
EN DOS ANILLOS CUÁNTICOS**

JUAN CARLOS PIÑA VELÁSQUEZ

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2008**

**ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS DONADORAS NEUTRAS CONFINADAS
EN DOS ANILLOS CUÁNTICOS**

JUAN CARLOS PIÑA VELÁSQUEZ

**Trabajo de grado presentado para optar
al título de Magister en Física**

**Director
Dr. JAVIER BETANCUR**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga
2008**

a Dios,

*A mis queridos padres
Matilde Velásquez y
Alfonso Rafael Piña*

*A mis hermanos
Luz Dary, Zaida Milena, Ingris Cristina y Danilo
Alfonso*

A toda mi familia

A María E.

Por todo su apoyo e incondicional ayuda

AGRADECIMIENTOS

El autor ofrece sus agradecimientos a las personas que contribuyeron a la realización de este trabajo:

Dr. Javier Betancur, por toda su paciencia y gran colaboración en este proceso tan importante para mí.

Dr. Iliá Mikhailov, por dedicar su tiempo en mi formación académica

Dr. Harold Paredes, por estar en disposición de colaborarme en cada instante que lo necesitaba.

Dr. Carlos Beltrán, por haber confiado en mi honradez y brindarme su apoyo en el fallido intento de realizar mis estudios doctorales en esta universidad.

Msc. Jairo Marín Cadavid, por su amistad incondicional, sus palabras motivadoras para salir adelante y por su preocupación sobre mi situación personal.

Msc. Francisco García, por su amistad y por sus comentarios que llenaron muchos momentos de alegría.

Dr. Álvaro Ramírez, por su colaboración y apoyo durante todo el proceso profesional.

William Gutiérrez, quien es un ejemplo de sencillez, un gran amigo y compañero de viaje.

A todos los amigos que me brindaron gratos momentos:

Paola Ramos, por tantos momentos bellos compartidos sin importar que la vida nos muestre caminos diferentes.

Ligia Jaimes, Alba Castillo, Sandra Plata, Karina, Ivón Vargas, Mónica Jaimes, Melissa Silva,

Janeth Fernández, la única persona que he visto que llora porque viajo a pesar de conocernos muy poco.

Marcela Jaimes, que mi Dios la lleve por un camino de dicha y felicidad junto con su marido e hijo.

Carlos Gómez, Javier del Cristo,

Elkin Ulloa, la persona más correcta que conocí en Bucaramanga, excelente persona y amigo.

Dalgy Acosta, por brindarme su cariño e incondicional amistad.

Luz Estela Gélvez, por ayudarme a conocer mucho sobre mis capacidades y deficiencias a través de sus comentarios y prolongados diálogos.

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN.....	1
1. COMPLEJO D_2^0 CONFINADO EN DOS ANILLOS CUÁNTICOS UNIDIMENSIONALES ACOPLADOS VERTICALMENTE.....	4
1.1 UNIDADES ADIMENSIONALES.....	5
1.2 RESULTADOS	10
1.3 CONCLUSIONES.....	14
2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE IMPUREZAS DONADORAS COMPLEJAS EN UN ANILLO TOROIDAL.....	15
2.1 RESULTADOS.....	20
2.2 CONCLUSIONES.....	23
BIBLIOGRAFÍA.....	24

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Fig. 1. Bandas de energías en un QW formado a partir de dos materiales semiconductores A y B que poseen diferentes brechas de energía	1
Fig. 2. Sistema D_2^0 en Dos anillos cuánticos acoplados verticalmente.....	4
Fig. 3. Gráfica del estado fundamental de energía para (a) diferentes radios con una separación entre anillos $d = 0.3a_0^*$ y (b) diferentes separaciones entre anillos con un radio $R_a = 1.0a_0^*$. Sin campo magnético (líneas continuas), en función de la separación entre centros iónicos. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural [23]....	10
Fig. 4. Gráfica de algunos niveles de energía en función de la distancia entre los centros iónicos para la molécula de hidrógeno artificial (líneas continuas) con radio de los anillos $R_a = 1.0a_0^*$, una separación entre anillos $d = 0.3a_0^*$ y sin campo magnético. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural [23].....	11
Fig. 5. Gráfica de algunos niveles de energía en función de la intensidad de campo magnético con un radio $R_a = 1.0a_0^*$, una separación entre centros iónicos $R = 1.0a_0^*$ y una separación entre anillos (a) $d = 0.0a_0^*$ y (b) $d = 0.6a_0^*$	12
Fig. 6. Sistema D_2^0 confinado en un anillo cuánticos toroidal de sección transversal circular.....	14
Fig. 7. Energía del estado base como función de la distancia entre centros iónicos para la molécula de hidrógeno artificial con (a) diferente espesor de anillo (líneas continuas), (b) diferentes radios de anillos (líneas continuas) y de la molécula de hidrógeno natural (línea discontinua) [23].....	20
Fig. 8. Energías de algunos niveles más bajos como función de la distancia entre centros iónicos para la molécula de hidrógeno artificial con un radio de revolución del anillo $R_a = 1.0a_0^*$ y radio de sección transversal $R_t = 0.2a_0^*$ (líneas continuas) y en la molécula de hidrógeno actual (línea discontinua).....	21

LISTA DE TABLAS

Pág.

Tabla. 1. Energías renormalizadas $\bar{E} = R_a^2 E(M, m, s)$ de algunos niveles de energía de la molécula de hidrógeno artificial con diferentes separaciones entre centros iónicos (R), diferentes radios de anillos y con una separación entre anillos igual a cero. Las energías están dadas en unidades de Ry^* y las distancias en a_0^* 9

Tabla. 2. Energías renormalizadas de algunos niveles de la molécula de hidrógeno artificial con diferentes separaciones entre centros iónicos (R), para radio $R_a = 1.0 a_0^*$, un radio de sección transversal $R_t \rightarrow 0$ y con una separación entre anillos igual a cero. Las energías están dadas en unidades de Ry^* y las distancias en a_0^* 19

TÍTULO: ESPECTRO ENERGÉTICO DE DOS D^0 CONFINADAS EN DOS ANILLOS CUÁNTICOS ACOPLADOS VERTICALMENTE*

AUTOR: Juan Carlos Piña Velásquez**

PALABRAS CLAVES: Punto cuántico, punto cuántico auto –ensamblado, aproximación adiabática, pozo cuántico

DESCRIPCIÓN: En la primera parte de este trabajo se encuentra el espectro energético de dos donadoras neutras (D_2^0) confinadas en dos anillos cuánticos unidimensional acoplados verticalmente. Se analiza el comportamiento de los niveles energéticos al variar el radio de los anillos y la separación entre anillos así como el efecto del campo magnético aplicado en la dirección del eje de simetría de los anillos sobre el espectro energético.

En la segunda parte, se encuentra el espectro energético del sistema D_2^0 confinado en un anillo cuántico de forma toroidal con sección transversal circular cuyo radio es bastante menor que el radio interno. Dicha característica del sistema permite el uso de la aproximación adiabática para descomponer el movimiento de los electrones en dos: el movimiento rápido en la dirección transversal y el movimiento lento alrededor del eje de simetría del anillo. La ecuación que corresponde al movimiento transversal se resuelve de forma analítica, mientras que para resolver la ecuación correspondiente al movimiento en el plano se utilizó el método numérico basado en el procedimiento del barrido trigonométrico.

En ambos problemas se realizan las gráficas de los niveles energéticos en función de la separación entre centros iónicos y se comparan los resultados con la curva de potencial existente de la molécula de hidrógeno.

* Proyecto de Grado de Maestría

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Javier Betancur

TITLE: ENERGY SPECTRUM OF TWO NEUTRAL DONORS D^0 CONFINED IN VERTICALLY COUPLED QUANTUM RINGS *

AUTHOR: Juan Carlos Piña Velásquez**

KEY WORDS: Quantum dot, Self Assembled Quantum Dot, adiabatic approximation, quantum well

ABSTRACT: in the first part of this work, the energy spectrum of two neutral donors (D_2^0) confined into two vertically coupled one dimensional rings is obtained. We analyze the energy levels behaviour when the radius of the rings and the separation between them are changed. The effect of the magnetic field applied parallel to the z-axis on the energy spectrum is studied.

In the second part, the energy spectrum of the D_2^0 system confined into a narrow toroidal-shape quantum ring is considered. By using the well known adiabatic procedure, it possible to reduce the initial two-particle three-dimensional problem to one-dimensional wave equation that describes the rotation around the z-axis. Two electrons interact through a renormalized potential which depends on the ring radius, its thickness and separation between donors. Numerical solution of this equation has been obtained by using the trigonometric sweep method. The Coulomb attraction exercised on the two-electrons by the donors and repulsion between them is given by effective potentials that depend of the geometric parameters of ring and distance of the impurity from the symmetry plane. The energies of some low-lying states as a function of the separation between donors are calculated and compared with the potential curve for hydrogen molecule.

* Proyecto de Grado de Maestría

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Javier Betancur

INTRODUCCIÓN

En los últimos años se ha realizado una cantidad considerable de investigaciones relacionadas con los sistemas de baja dimensionalidad debido al aporte tan fundamental que éstos sistemas han proporcionado al desarrollo de nueva tecnología, principalmente en la miniaturización de dispositivos electrónicos y opto – electrónicos, así como su probable utilización en el desarrollo del computador cuántico [1-3]. Los sistemas de baja dimensionalidad más conocidos son: los pozos cuánticos (QW), los hilos cuánticos (QWW), las superredes (SL) y los puntos cuánticos (QD). Los QWs poseen la estructura de un emparedado (Fig. 1) en el cual, una capa de un semiconductor A (por ejemplo, GaAs) está totalmente rodeada de otro semiconductor B (por ejemplo, GaAlAs), cuya brecha de energía es mayor que la del semiconductor A. Por este motivo, en las junturas entre los dos tipos de semiconductores, existen saltos de energía, tanto en el piso de la banda de conducción como en el techo de la banda de valencia, que da lugar al confinamiento de los portadores de carga en las correspondientes bandas.

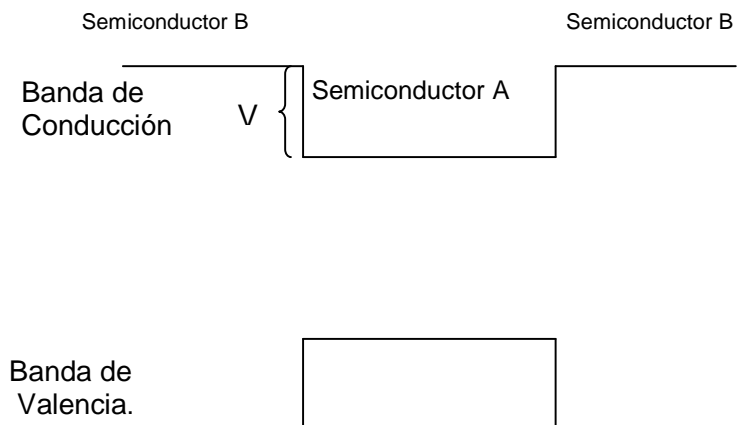


Fig. 1. Bandas de energía en un QW formado a partir de dos materiales semiconductores A y B que poseen diferentes brechas de energía.

Cuando el confinamiento se realiza en dos direcciones se forma un sistema casi unidimensional conocido como QWW, pero si el confinamiento se hace en las tres dimensiones se forma un sistema casi cero dimensional conocido como QD. Los últimos dos sistemas mencionados anteriormente llaman mucho la atención a los

investigadores debido a que poseen un mayor confinamiento, favoreciendo la aparición de nuevos fenómenos mecánico cuánticos que son aprovechados en la creación de nuevos dispositivos.

En la década de los 90's aparece una técnica de crecimiento de cristales denominada de Stranski-Krastanov [4], que permite crecer QDs de forma casi espontánea debido a los efectos de tensión – relajación que surgen en la superficie de un semiconductor cuando es depositado sobre un sustrato semiconductor con constante de red diferente. Esto permite la formación de pequeñas islas semiconductoras con diferentes morfologías [5-7], donde la forma y tamaño de las islas dependen de las condiciones de crecimiento, entre las que se pueden mencionar la forma de disco, lente, anillo, pirámide, etc. Estos QDs se conocen como puntos cuánticos autoensamblados (SAQDs).

Una de las propiedades estructurales más importante de SAQDs es que su tamaño transversal (altura d) es, en gran proporción, menor que su tamaño lateral (Diámetro D), razón por la cual, en una cantidad considerable de trabajos se consideran modelos bidimensionales que solo analizan el movimiento lateral de los portadores de carga. Este modelo bidimensional se ha utilizado para analizar el espectro de uno y dos electrones, excitones y triones en SAQDs [8-12].

A pesar de que el tamaño transversal de los SAQDs es muy pequeño, los modelos estrictamente bi-dimensionales, aunque simplifican notoriamente los cálculos, carecen de validez, ya que los niveles energéticos suben drásticamente llegando incluso a tener un espectro continuo; mientras en lo que respecta al movimiento lateral, éste se encuentra condicionado por la forma del potencial, el cual a su vez depende del perfil transversal del QD. Con el fin de establecer la forma de este potencial, se puede utilizar la aproximación adiabática tal y como se propuso inicialmente en los artículos [13,14]. Esta metodología se utilizó para analizar los espectros electrónicos de donadoras y excitones en pirámides, lentes y anillos cuánticos [15].

El confinamiento tridimensional al cual se encuentran sometidos los portadores de carga en los QDs, conlleva a la cuantización del espectro de energía. Esto hace que estos sistemas se comporten como átomos artificiales, en donde la interacción nuclear se reemplaza por el confinamiento que surge en la diferencia en las brechas de energía de los materiales que conforman el QD. Con estos QDs también es posible simular, de manera artificial, el comportamiento de diversos tipos de moléculas [16] las cuales tienen características similares con los complejos hidrogenoides H_2^+ , H^- , H_2 , y a la molécula de tipo helionioide. Las moléculas artificiales se pueden obtener a partir de dos puntos cuánticos idénticos que se disponen uno encima del otro (acoplamiento vertical) [17] o uno frente al otro (acoplamiento lateral) donde las partículas, electrones o huecos, que están espacialmente separadas y confinadas en puntos diferentes, pueden llegar a

tunelar a través de las barreras de potencial que separan los puntos [18]. Los científicos han establecido que la fabricación de estas moléculas artificiales de QDs permitirá desarrollar las bases de la computación cuántica [19], la cual se fundamenta en modelos simples de espines localizados [20].

Este trabajo está conformado por dos problemas que modelan una molécula artificial de hidrógeno confinada en SAQDs en forma de anillo: en el primero, se modela la molécula a través del sistema D_2^0 confinado en dos anillos cuánticos unidimensional acoplados de manera vertical y bajo la acción del campo magnético aplicado en la dirección del eje z. Los centros iónicos se encuentran ubicados sobre el eje de simetría de los anillos y los electrones están confinados uno en cada anillo.

En el segundo problema, se estudia el mismo sistema D_2^0 confinado en un anillo cuántico de forma toroidal muy delgado en donde los centros iónicos se encuentran sobre el eje z y los electrones se encuentran confinados dentro del anillo a través de un potencial de forma rectangular. Debido a que en este problema se consideran anillos delgados, es posible utilizar la aproximación adiabática que reduce el problema tridimensional al de dos electrones confinados en un anillo unidimensional.

1. COMPLEJO D_2^0 EN DOS ANILLOS CUÁNTICOS UNIDIMENSIONALES ACOPLADOS VERTICALMENTE

Inicialmente se analiza el caso del complejo molecular D_2^0 en un sistema compuesto por dos anillos cuánticos unidimensionales idénticos de radios R_a y acoplados verticalmente (ver figura 2). Cada anillo alberga un único electrón que está obligado a rotar alrededor del eje de simetría en un círculo de radio R_a y bajo la acción de un campo magnético uniforme, mientras que los dos centros iónicos están ubicados sobre el eje de simetría de los anillos en posiciones simétricas con respecto al origen de coordenadas de sistema $(0,0,R/2)$ y $(0,0,-R/2)$.

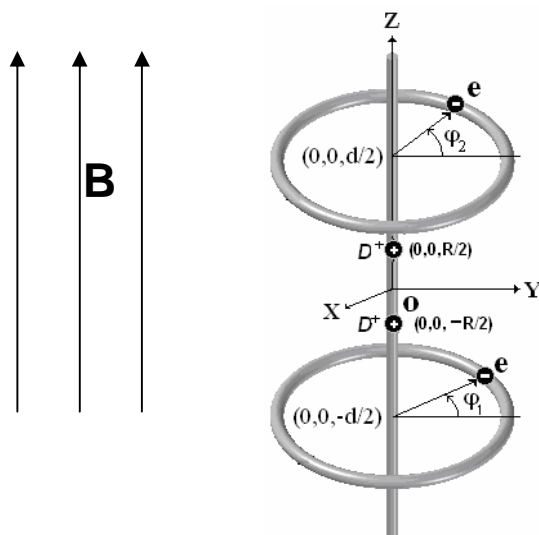


Fig. 2. Sistema D_2^0 en Dos anillos cuánticos acoplados verticalmente

1.1 Unidades adimensionales

Bajo la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano que describe al sistema anteriormente descrito es:

$$H = \frac{1}{2m^*} \sum_{j=1}^2 \left(\vec{p}_j - \frac{e\vec{A}_j}{c} \right)^2 + V_{ee} + V_{eD} + V_{DD} \quad (1.1)$$

Siendo $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ el operador de momento y $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}$ el vector potencial donde \vec{r} es el vector posición del electrón.

Es muy útil trabajar con unidades adimensionales debido a que simplifican los procedimientos computacionales. Para esto se definen las magnitudes de longitud y energía en unidades de radios de Bohr efectivo y Rydberg efectivo, respectivamente

$$\vec{r} = a_0^* \vec{\tilde{r}}; \quad E = Ry^* \tilde{E};$$

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \epsilon}{m^* e^2}; \quad Ry^* = \frac{m^* e^2}{2\epsilon^2 \hbar^2}$$

Luego, el Hamiltoniano (1.1) se puede escribir en coordenadas cilíndricas como

$$H = -\frac{1}{R_a^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} \right\} + V_{ee} + V_{eD} + V_{DD} - i\gamma \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right) + \frac{1}{2} \gamma^2 R_a^2 \quad (1.1a)$$

$$\gamma = \frac{\hbar e B}{2m^* c Ry^*}$$

Donde \hbar : es la constante de Planck

e : es la magnitud de la carga del electrón

B : es la intensidad del campo magnético aplicado

m^* : la masa efectiva del electrón

c : la rapidez de la luz

Ry^* : es el Rydberg efectivo del sistema

Las diferentes interacciones

$$\begin{aligned}
V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2) &= \frac{2}{\sqrt{2R_a^2 + d^2 - 2R_a^2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}} \\
V_{eD} &= - \left\{ \frac{4}{\sqrt{R_a^2 + \left(\frac{R}{2} - \frac{d}{2}\right)^2}} + \frac{4}{\sqrt{R_a^2 + \left(\frac{R}{2} + \frac{d}{2}\right)^2}} \right\} \\
V_{DD} &= \frac{2}{R}
\end{aligned} \tag{1.1b}$$

Los parámetros utilizados son $\varepsilon = 12.71$ y $m^* = 0.076m_e$, siendo m_e la masa del electrón en el vacío [21]. El salto entre las bandas de conducción del electrón es $V_0 = 172meV \approx 40Ry^*$ [21].

El radio de Bohr efectivo correspondiente a estos parámetros del material es $a_0^* = 8.86nm$, el Rydberg efectivo es $Ry^* = 6.4meV$ y la unidad de campo magnético es $\gamma = 1 \rightarrow B = 8.4T$.

Con el fin de simplificar los cálculos, se define la separación entre anillos en función del radio R_a como sigue

$$d = \beta R_a \tag{1.2}$$

Teniendo en cuenta que en el Hamiltoniano (1.1a) aparecen varios términos que son constantes, de aquí en adelante se consideran aquellos términos del Hamiltoniano que dependen de la variable angular, es decir, la interacción entre los electrones $V_{ee}(\varphi_1 - \varphi_2)$ y el término de la interacción del campo magnético correspondiente a la parte paramagnética.

$$\tilde{H} = -\frac{1}{R_a^2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} \right\} + \frac{2}{R_a \sqrt{\beta^2 + 4\text{sen}^2\left(\frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}\right)}} - i\gamma \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right) \tag{1.3}$$

Donde en el Hamiltoniano (1.3) se ha utilizado (1.2).

A las energías halladas considerando el Hamiltoniano (1.3) se les deberá adicionar los aportes hechos por las interacciones restantes, es decir, por aquellas que son independientes de la variable angular.

Para resolver el Hamiltoniano (1.3) se utilizan coordenadas relativas y de centro expresadas como sigue

$$\varphi = \varphi_1 - \varphi_2; \quad \theta = \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2} \quad (1.4)$$

Utilizando el cambio de variable (1.4) se obtiene

$$H = -\frac{2}{R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{2}{R_a \sqrt{\beta^2 + 4 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}} + \frac{1}{2R_a^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (1.5)$$

La ecuación de Schrödinger para el Hamiltoniano (1.5) es

$$-\frac{2}{R_a^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2\psi}{R_a \sqrt{\beta^2 + 4 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}} + \frac{1}{2R_a^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} - i\gamma \frac{\partial \psi}{\partial \theta} = E\psi \quad (1.6)$$

Realizando el procedimiento estándar de separación de variable se define la función de onda de la siguiente manera

$$\psi(\varphi, \theta) = \operatorname{Exp}(iM\theta)\Phi(\varphi) \quad (1.7)$$

La cual, al introducirla en la Ec. (1.6), se llega a la siguiente ecuación de onda para la variable relativa

$$-\frac{2}{R_a^2} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \left(\frac{2}{R_a \sqrt{\beta^2 + 4 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}} + \frac{M^2}{2R_a^2} + \gamma M \right) \Phi = E\Phi \quad (1.8)$$

Para resolver la Ec. (1.8) se hace uso del método de barrido trigonométrico [22], el cual se basa en el uso de las coordenadas de poincaré

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi) &= A(\varphi) \cos[\delta(\varphi)] \\ \Phi'(\varphi) &= A(\varphi) \operatorname{sen}[\delta(\varphi)] \end{aligned} \quad (1.9)$$

De esta forma, la Ec. (1.8) se transforma en una ecuación diferencial de primer orden no lineal mediante el cambio de variable

$$\frac{\Phi'(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = \tan[\delta(\varphi)]; \quad \frac{\Phi''(\varphi)}{\Phi(\varphi)} = \frac{\delta'(\varphi)}{\cos^2[\delta(\varphi)]} + \tan^2[\delta(\varphi)] \quad (1.10)$$

Haciendo uso de (1.9) y (1.10), la Ec. (1.8) se transforma en

$$\delta'(\varphi) = \left\{ \left[\sin^2[\delta(\varphi)] + \frac{R_a^2}{2} \left[\tilde{E}(m,s) - \frac{2}{R_a \sqrt{\beta^2 + 4 \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right)}} \right] \right] \cos^2[\delta(\varphi)] \right\} \quad (1.11)$$

$$\text{Donde } \tilde{E}(m,s) = E(M,m,s) - \frac{M^2}{2R_a^2} - \gamma M.$$

La Ec.(1.11) se resuelve utilizando el método de Runge – Kutta de cuarto orden con las condiciones de contorno adecuadas. Para los valores de las energías $\tilde{E}(m,s)$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ es el número cuántico azimutal y $s = 0, 1$ es el número cuántico de espín que toma los valores de cero cuando están antiparalelos y uno cuando están paralelos.

$$E(M,m,s) = \tilde{E}(m,s) + \frac{M^2}{2R_a^2} + \gamma M + V_{eD} + 2/R + \frac{\gamma^2 R_a^2}{2} \quad (1.12)$$

Una vez encontrados los niveles de energía, la amplitud $A(\varphi)$ se define a través de la integración numérica mediante la fórmula:

$$A(\varphi) = A_0 \exp \left\{ \int_0^\varphi \left[1 - \frac{R_a^2}{2} \left(\tilde{E}(m,s) - \frac{2}{R_a \sqrt{\beta^2 + 4 \sin^2\left(\frac{t}{2}\right)}} \right) \right] \sin \delta(t) \cos \delta(t) dt \right\} \quad (1.13)$$

Por lo tanto, la solución de la ecuación (1.6) finalmente es de la siguiente forma

$$\psi(\varphi, \theta) = A(\varphi) \exp(iM\theta) \cos[\delta(\varphi)] \quad (1.14)$$

Algoritmo de solución

- 1) Se realiza una malla de paso δE
- 2) Para cada punto de la malla se resuelve la ecuación (1.11) mediante el método de runge kutta con un valor inicial de $\delta(0)$
- 3) Se verifica la condición de periodicidad de la función $\delta(\varphi)$ para determinar los niveles de energía del sistema.
- 4) La energía con su respectiva función $\delta(\varphi)$ se reemplaza en la ecuación (1.13) y se encuentra $A(\varphi)$.
- 5) Estos valores se reemplazan en (1.14) y se encuentra la función de onda del sistema.

1.2 Resultados

En esta primera parte se realizan los cálculos numéricos de algunos niveles de energía $E(M, m, s)$ para dos valores del radio, separación entre anillos igual a cero y para diferentes separaciones entre centros iónicos. En la tabla I se encuentran registrados los resultados para las energías renormalizadas, calculadas como $\bar{E} = R_a^2 E(M, m, s)$. Comparándolas con las obtenidas en [14] para dos electrones en un anillo unidimensional. Se puede ver que los niveles de energía de la molécula de hidrógeno artificial tiende a la del sistema compuesto por dos electrones en un anillo unidimensional cuando la separación entre centros iónicos es muy grande, de manera que la contribución de las interacciones electrón - centro iónico y centro iónico - centro iónico sean muy pequeñas.

Tabla I. Energías renormalizadas $\bar{E} = R_a^2 E(M, m, s)$ de algunos niveles de energía de la molécula de hidrógeno artificial con diferentes separaciones entre centros iónicos (R), diferentes radios de anillos y con una separación entre anillos igual a cero. Las energías están dadas en unidades de Ry^* y las distancias en a_0^* .

(M,m,s)	$R_a=1$					$R_a=4$				
	Ref[14]	Molécula de hidrógeno artificial				Ref[14]	Molécula de hidrógeno artificial			
		R=2000	R=14	R=8	R=2		R=2000	R=14	R=8	R=2
(0,0,0)	1.72	1.71	0.73	0.025	-2.94	5.18	5.07	-8.41	-13.44	-9.86
(1,1,1)	2.23	2.22	1.24	0.54	-2.43	5.68	5.57	-7.91	-12.94	-9.35
(0,2,1)	3.61	3.61	2.63	1.93	-1.04	7.92	7.80	-5.67	-10.71	-7.13
(2,0,0)	3.72	3.71	2.73	2.03	-0.94	7.18	7.07	-6.41	-11.44	-7.86

Esta excelente concordancia entre los resultados obtenidos con el método implementado en la presente tesis y los obtenidos de manera exacta en [14], se puede considerar como una prueba indirecta de la efectividad del procedimiento numérico que se ha utilizado.

En la fig. 3 (a) se presentan las curvas de la energía del estado base como función de la separación entre los centros iónicos para diferentes valores de los radios, con una separación entre anillos de $0.3a_0^*$ para el caso en el cual no existe campo magnético (líneas continuas), así como la curva de potencial para la molécula de hidrógeno natural (líneas discontinuas) [23].

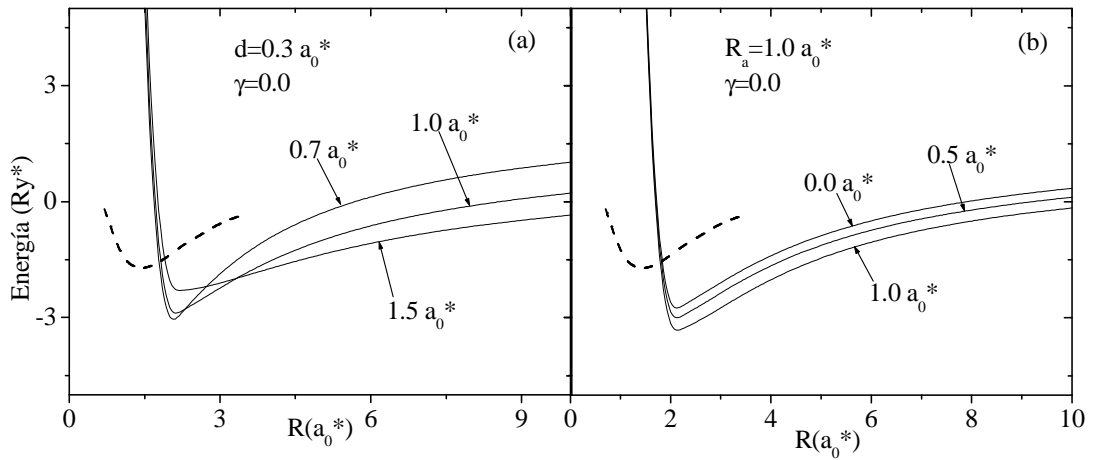


Fig. 3. Gráfica del estado fundamental de energía para (a) diferentes radios con una separación entre anillos $d = 0.3 a_0^*$ y (b) diferentes separaciones entre anillos con un radio $R_a = 1.0 a_0^*$, sin campo magnético (líneas continuas), en función de la separación entre centros iónicos. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural [23].

Se observa un comportamiento similar entre las curvas de la molécula de hidrógeno artificial y la natural. Sin embargo, el pozo es más profundo para la primera y el mínimo se encuentra localizado aproximadamente a una separación entre centros iónicos de $R = 2.0 a_0^*$. Esto se debe a que, a diferencia de la molécula de hidrógeno natural, en la molécula de hidrógeno artificial existe un confinamiento adicional de los electrones dentro de los anillos, haciendo que estos no alteren su posición en el eje z con la ubicación de los centros iónicos. Por otra parte, entre mayor es el radio de los anillos menor es la profundidad del pozo y existe una inversión de los valores de energía en donde, para valores pequeños de separación entre centros iónicos, entre menor sea el radio de los anillos mayor será el valor absoluto de la energía del sistema y para valores grandes de separación entre centros iónicos se invierte.

En la fig. 3 (b) se muestran las curvas de la energía fundamental para diferentes separaciones entre anillos en función de la separación de los centros iónicos para un valor de radio $R_a = 1.0 a_0^*$ y sin campo. En ella se observa un comportamiento similar entre las curvas de energía mostrando que entre mayor sea la separación entre los anillos menor será la energía. Lo anterior es debido a que disminuye el potencial producido por la atracción coulombiana entre los electrones, ya que al separar los anillos se aumenta la separación entre los electrones.

De la figura anterior se puede concluir que es posible encontrar diferentes configuraciones del espectro energético variando los parámetros del sistema tales

como el radio de los anillos y la separación entre ellos que es bien sabido son fáciles de manipular, lo que representa una gran ventaja frente a la molécula de hidrógeno natural.

En la figura 4 se muestran los cálculos obtenidos para algunos niveles de energía $E(M, m, s)$ en función de la separación de los centros iónicos para el caso en el cual no existe campo magnético (líneas continuas) y la curva de energía de la molécula de hidrógeno natural (línea discontinua)[23].

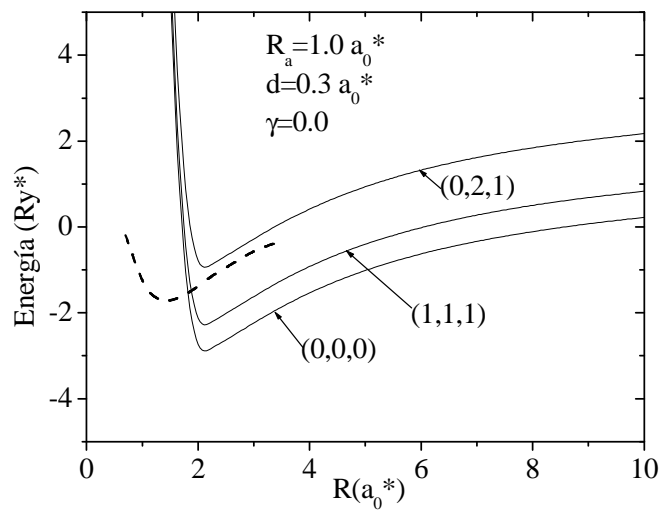


Fig. 4. Gráfica de algunos niveles de energía en función de la distancia entre los centros iónicos para la molécula de hidrógeno artificial (líneas continuas) con radio de los anillos $R_a = 1.0 a_0^*$, una separación entre anillos $d = 0.3 a_0^*$ y sin campo magnético. La línea a trazos muestra la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural [23].

En este sistema es posible obtener niveles excitados debido al confinamiento que producen los anillos restringiendo el movimiento de los portadores de carga alrededor del eje de simetría de los anillos a una distancia R_a de dicho eje. Todos los estados de energía poseen un comportamiento similar: para pequeñas separaciones de los centros iónicos la energía es muy grande debido a que prima la interacción entre centros iónicos sobre la interacción entre electrones y centros iónico-electrón. Aproximadamente para una separación entre centros iónicos de dos radios de Bohr efectivo, se encuentra la parte correspondiente al equilibrio del sistema y para valores mayores que este comienza a tener un aporte importante la interacción repulsiva.

En la figura 5 se presentan los gráficos de los diferentes niveles energéticos en función de la intensidad de campo magnético aplicado para un radio de $R_a = 1.0a_0^*$, dos separaciones diferentes entre anillos de $d = 0.6a_0^*$ y una separación entre centros iónicos de $R = 1.0a_0^*$.

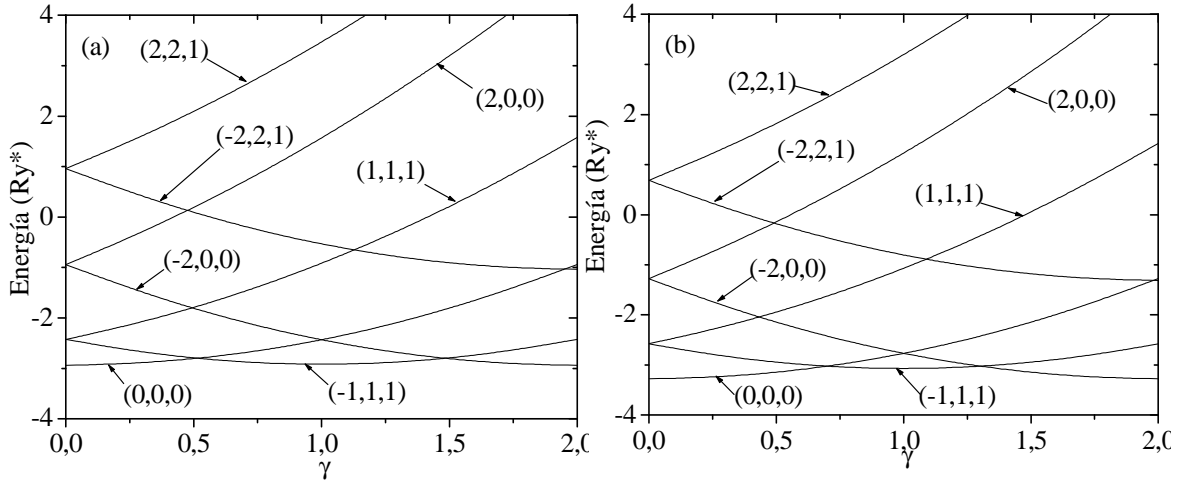


Fig. 5. Gráfica de algunos niveles de energía en función de la intensidad de campo magnético con un radio $R_a = 1.0a_0^*$, una separación entre centros iónicos $R = 1.0a_0^*$ y una separación entre anillos (a) $d = 0.0a_0^*$ y (b) $d = 0.6a_0^*$.

Se puede ver que la presencia del campo magnético rompe la degeneración de los niveles energéticos que poseen momento angular M con diferente signo. Entre mayor sea la intensidad del campo magnético mayor es el desacople de los niveles inducido por el término paramagnético en el Hamiltoniano (1.3). Generalmente, el comportamiento de las curvas está definido por la fuerte competición entre la contribución del término paramagnético y el diamagnético a la energía total (1.12). La contribución del término paramagnético depende linealmente de la intensidad del campo magnético mientras que para el término diamagnético existe una dependencia cuadrática. Por lo tanto, para intensidades de campo magnético pequeñas predomina la contribución del término paramagnético mientras que para grandes intensidades de campo magnético la contribución del término diamagnético se vuelve importante. Por tal motivo, para pequeñas intensidades de campo magnético las curvas presentan un comportamiento casi lineal cambiando a parabólico cuando se incrementa la intensidad del campo magnético. Se observa que, en la fig. 5(a) para $\gamma < 0.5$ y en la fig. 5(b) para $\gamma < 0.75$, el estado fundamental corresponde al nivel $\tilde{E}(0,0,0)$, cuando la intensidad del campo magnético se aumenta el estado fundamental cambia al nivel $\tilde{E}(-1,1,1)$, después al $\tilde{E}(-2,0,0)$, etc. Este comportamiento oscilatorio se mantiene para diferentes valores de radios de anillo y diferentes

valores de separación entre ellos por lo cual se evidencia que el número cuántico M del estado fundamental se incrementa al aumentar la intensidad del campo magnético con un periodo de oscilación que aumenta al incrementar la distancia de separación entre anillos.

1.3 Conclusiones

Se halló el espectro energético de una molécula artificial de hidrógeno compuesta por dos donadoras neutras confinadas en dos anillos cuánticos unidimensionales en función de la separación entre los centros iónicos y se realizó una comparación con la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural en donde se observó un comportamiento similar entre ellas mostrando que para pequeñas separaciones gobierna el potencial de interacción entre centros iónicos, pasando por un punto de equilibrio en $R = 2.0a_0^*$ y después de este valor, comienza a tener un aporte importante la interacción repulsiva electrón-electrón.

Se analizó el comportamiento del nivel fundamental al variar tanto el radio de los anillos como la separación entre ellos, encontrándose las configuraciones con diferentes valores de la profundidad del pozo y de la posición de equilibrio pero con un comportamiento similar. Por lo tanto, para el modelo de molécula de hidrógeno artificial propuesta, es posible alterar el valor de los niveles de energía con solo cambiar el radio de los anillos y/o la separación entre ellos.

Se obtuvo la gráfica de los niveles de energía para diferentes valores de la intensidad del campo magnético mostrando un desacople de los niveles con diferente signo de momento angular. Además, se observa una oscilación del estado fundamental del sistema para lo cual se puede decir que el número cuántico M de este estado se incrementa al aumentar la intensidad del campo magnético con un periodo de oscilación que crece a medida que la distancia entre anillos se hace mayor.

2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE IMPUREZAS DONADORAS COMPLEJAS EN UN ANILLO TOROIDAL

Como segundo modelo de molécula hidrogenoide se considera un anillo cuántico de forma toroidal con sección transversal circular (fig. 6) con un radio R_t que es considerablemente más pequeño que el radio medio del anillo R_a dentro del cual se van a encontrar confinados los electrones por un potencial rectangular que vale cero dentro del anillo y V_0 fuera, donde V_0 es la altura de la barrera proveniente del salto en la banda de conducción en las junturas. Los centros iónicos se encuentran ubicados sobre el eje de simetría del anillo en los puntos $(0,0,-R/2)$ y $(0,0,R/2)$.

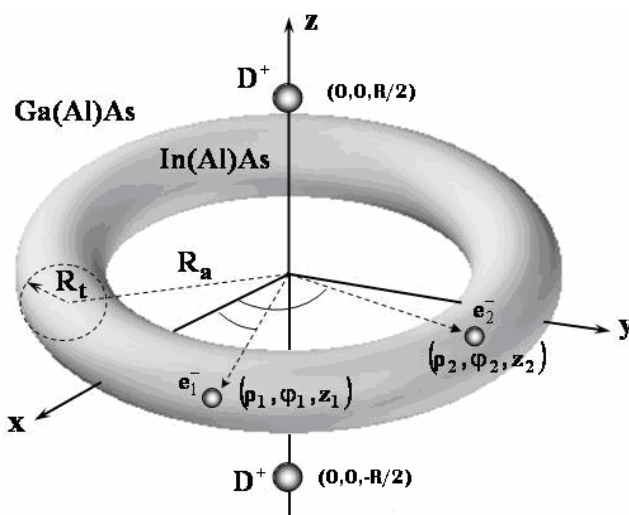


Fig. 6. Sistema D_2^0 confinado en un anillo cuántico toroidal de sección transversal circular

Bajo la aproximación de la masa efectiva, el Hamiltoniano adimensional que describe al sistema se puede escribir en coordenadas cilíndricas como:

$$H = \sum_{i=1}^2 \left[-\nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_i) - 2/|\vec{\mathbf{r}}_i - \vec{\mathbf{R}}/2| - 2/|\mathbf{r}_i + \vec{\mathbf{R}}/2| \right] + 2/|\vec{\mathbf{r}}_1 - \vec{\mathbf{r}}_2| + 2/R \quad (2.1)$$

Aquí, \mathbf{r}_i y \mathbf{R}_i son los vectores posición de los electrones y los iones, respectivamente. $V(\mathbf{r})$ Es el potencial de confinamiento. Los términos restantes en el Hamiltoniano (2.1) son las energías de interacción coulombiana correspondientes a la atracción electrón-centro iónico (términos con signo menos) y la repulsión electrón-electrón e ion-ion (los últimos dos términos). Las unidades de longitud y de energía son las mismas que se utilizaron en el anterior sistema (Capítulo 1).

El Hamiltoniano (2.1), en el caso general, no es completamente separable y no se puede encontrar la solución exacta de la correspondiente ecuación de onda. Por lo tanto, es de interés considerar el caso límite adiabático cuando el espesor del anillo tiende a cero. Debido a que el movimiento de los electrones a lo largo de la sección transversal del toroide es mucho mayor que su rotación alrededor del eje z , se sigue el procedimiento adiabático [15]. Para tal fin, se define la función de onda del sistema de la siguiente forma:

$$\psi(\rho_1, \rho_2, \phi_1, \phi_2, z_1, z_2) = \psi_{rap1}(\rho_1, z_1) \psi_{rap2}(\rho_2, z_2) \psi_{lento}(\phi_1, \phi_2) \quad (2.2)$$

Que al introducirla en la ecuación de schrödinger construida con el Hamiltoniano (2.1) se llega a la siguiente ecuación diferencial

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{\rho_1 \psi_{rap1}} \frac{\partial}{\partial \rho_1} \left(\rho_1 \frac{\partial \psi_{rap1}}{\partial \rho_1} \right) - \frac{1}{\rho_2 \psi_{rap2}} \frac{\partial}{\partial \rho_2} \left(\rho_2 \frac{\partial \psi_{rap2}}{\partial \rho_2} \right) - \frac{1}{\psi_{lento}} \left(\frac{1}{\rho_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_1^2} + \frac{1}{\rho_2^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi_2^2} \right) \psi_{lento} \\ & - \frac{1}{\psi_{rap1}} \frac{\partial^2 \psi_{rap1}}{\partial z_1^2} - \frac{1}{\psi_{rap2}} \frac{\partial^2 \psi_{rap2}}{\partial z_2^2} + V_{ee} + V_{eD} + V_{DD} + V_{conf} - E = 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

Donde

$$\begin{aligned}
V_{ee} &= \frac{2}{\sqrt{\rho_1^2 + \rho_2^2 + (z_1 - z_2)^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2)}} \\
V_{eD} &= -\sum_{i=1}^2 \left\{ \frac{2}{\sqrt{\rho_i^2 + (z_i - R/2)^2}} + \frac{2}{\sqrt{\rho_i^2 + (z_i + R/2)^2}} \right\} \\
V_{DD} &= \frac{2}{R}
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Bajo la consideración que los portadores de carga se encuentran con mayor probabilidad dentro del anillo, se realiza un cambio de variable

$$\rho_i = R_a + x_i, \quad x_i \ll R_a \tag{2.5}$$

Que al reemplazar en (2.3) y (2.4) se obtiene

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{\psi_{rap1}} \frac{\partial^2 \psi_{rap1}}{\partial x_1^2} - \frac{1}{\psi_{rap2}} \frac{\partial^2 \psi_{rap2}}{\partial x_2^2} - \frac{1}{\psi_{rap1}} \frac{\partial^2 \psi_{rap1}}{\partial z_1^2} - \frac{1}{\psi_{rap2}} \frac{\partial^2 \psi_{rap1}}{\partial z_2^2} + V_{conf} \\
& - \frac{1}{R_a^2 \psi_{lento}} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} \right) \psi_{lento} + V_{ee} + V_{eD} + V_{DD} - E = 0
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Que puede descomponerse en dos ecuaciones diferenciales

$$-\frac{1}{\psi_{rap1}} \frac{\partial^2 \psi_{rap1}}{\partial x_1^2} - \frac{1}{\psi_{rap1}} \frac{\partial^2 \psi_{rap1}}{\partial z_1^2} + V_{conf1} = E_0 \tag{2.7a}$$

$$-\frac{1}{\psi_{rap2}} \frac{\partial^2 \psi_{rap2}}{\partial x_2^2} - \frac{1}{\psi_{rap2}} \frac{\partial^2 \psi_{rap1}}{\partial z_2^2} + V_{conf2} = E_0 \tag{2.7b}$$

$$-\frac{1}{R_a^2 \psi_{lento}} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi_2^2} \right) \psi_{lento} + \tilde{V}_{ee} + \tilde{V}_{eD} + 2/R + 2E_0 - E = 0 \tag{2.7c}$$

Donde

$$V_{confi} = \begin{cases} 0, & x^2 + z^2 < R_i^2 \\ V_0, & x^2 + z^2 > R_i^2 \end{cases}$$

Por tal motivo, (2.7a) y (2.7b) se convierten, cada una por separado, en el problema de un portador de carga dentro de un pozo cuántico circular de radio R_t y altura de la barrera V_0 cuya solución es conocida y se expresan en términos de las funciones de Bessel. Por lo tanto, los valores propios para este problema se encuentran solucionando la ecuación trascendente

$$k \frac{J_0'(kR_t)}{J_0(kR_t)} - \kappa \frac{K_0'(\kappa R_t)}{K_0(\kappa R_t)} = 0; \quad \kappa = \sqrt{V_0 - E_0}, \quad k = \sqrt{E_0}$$

Y la función de onda se obtiene mediante las condiciones de frontera

$$\psi_{rap}(\rho, z) = f_0(\tilde{\rho}) = \begin{cases} J_0(k\tilde{\rho}); & \tilde{\rho} < R_t \\ \frac{J_0(kR_t)}{K_0(\kappa R_t)} K_0(\kappa\tilde{\rho}); & \tilde{\rho} > R_t \end{cases} \quad (2.8)$$

Donde se han utilizado coordenadas cilíndricas para el problema del pozo circular y se ha hecho la sustitución

$$x = \tilde{\rho} \cos \theta; \quad z = \tilde{\rho} \sin \theta$$

La energía del movimiento rápido entra en (2.7c) como un potencial efectivo y se utilizan potenciales renormalizados de donde se tiene que

$$V_{ee}(\varphi) = 2 \int_0^\infty \tilde{\rho}_1 f_0^2(\tilde{\rho}_1) d\tilde{\rho}_1 \int_0^\infty \frac{\tilde{\rho}_2 f_0^2(\tilde{\rho}_2) d\tilde{\rho}_2}{\sqrt{\tilde{\rho}_1^2 + \tilde{\rho}_2^2 + 4R_a^2 \sin^2(\varphi/2)}} \quad (2.9)$$

Los últimos tres términos en la ecuación (2.7c) son constantes y corresponden a la energía del estado base del movimiento rápido de los electrones, la repulsión entre iones y la atracción entre electrones-centros iónicos que se calcula así:

$$V_{eD} = -4 \int d\theta \int \tilde{\rho} f_0^2(\tilde{\rho}) [V_+(\tilde{\rho}, \theta) + V_-(\tilde{\rho}, \theta)] \quad (2.10)$$

$$V_\pm(\tilde{\rho}, \theta) = \frac{1}{\sqrt{(R_a + \tilde{\rho} \cos \theta)^2 + (\tilde{\rho} \sin \theta \pm R/2)^2}}$$

Como el potencial efectivo en (2.7c) depende únicamente de la diferencia entre las coordenadas angulares, la ecuación de onda se puede separar utilizando las coordenadas de centro de masa, $\Theta = (\varphi_1 + \varphi_2)/2$, y relativas, $\varphi = \varphi_1 - \varphi_2$. Al igual

que en el capítulo 1, las funciones propias del Hamiltoniano (2.1) están definidas por medio de tres números cuánticos, el de centro masa, M , el relativo, m , y el del espín, s . Utilizando la sustitución $\psi_{lento}^{M,m,s}(\varphi_1, \varphi_2) = e^{iM\Theta} \Phi_{m,s}(\varphi)$ se puede reducir el problema de valor propio en (2.7c) a la siguiente ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{2}{R_a^2} \frac{d^2 \Phi_{m,s}(\varphi)}{d\varphi^2} + \left[\frac{M^2}{2R_a^2} + V_{ee}(\varphi) + V_{eD} + 2/R \right] \Phi_{m,s}(\varphi) = E(M, m, s) \Phi_{m,s}(\varphi) \quad (2.11)$$

Con condiciones periódicas de frontera. Las energías en (2.11), $E(M, m, s)$ han sido nivelados con los número cuánticos M, m ($M, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) y de espín s que es igual a cero (uno) para la solución par (impar) con respecto a la variable φ y se encuentran referenciado con respecto a la energía del estado base del movimiento rápido de los electrones, razón por la cual, el término $2E_0$ en (2.7c) se encuentra ausente en (2.11). La ecuación (2.11) se resuelve utilizando el método de barrido trigonométrico [22] de forma similar como se realizó para solucionar la ecuación (1.8).

Algoritmo

- 1) Se definen las funciones de onda para el movimiento rápido del electrón que corresponde a funciones de Bessel y se obtiene la energía de un electrón en un pozo cilíndrico de radio R_i que entra en la ecuación (2.7c) en forma de un potencial efectivo.
- 2) Se calcula el potencial efectivo (2.9) para 100 valores diferentes de φ
- 3) Se reconstruye el potencial efectivo (2.9) utilizando b-spline
- 4) Se calculan los potenciales efectivos (2.10)
- 5) Se aplica el método de barrido trigonométrico para solucionar (2.11)

2.1 Resultados

Con el propósito de probar la eficacia del método utilizado para solucionar el sistema, se analiza el caso límite cuando el espesor del anillo es muy pequeño ($R_r \rightarrow 0$) comparándolo con los resultados obtenidos en [14] y los del primer capítulo. Los datos se encuentran registrados en la tabla II donde se puede observar una buena concordancia entre los datos garantizando la buena fiabilidad del método.

Tabla II. Energías de algunos niveles de la molécula de hidrógeno artificial con diferentes separaciones entre centros iónicos (R), para radio $R_a = 1.0a_0^*$, un radio de sección transversal $R_r \rightarrow 0$ y con una separación entre anillos igual a cero. Las energías están dadas en unidades de Ry^* y las distancias en a_0^* .

(M,m,s)	$R_a=1$						
	Ref[14]	Molécula artificial de hidrógeno					
		R=2000		R=8		R=2	
		Cáp. I	Cáp. II	Cáp. I	Cáp. II	Cáp. I	Cáp. II
(0,0,0)	1.72	1.71	1.70	0.025	0.023	-2.94	-2.95
(1,1,1)	2.23	2.22	2.23	0.54	0.54	-2.43	-2.43
(0,2,1)	3.61	3.61	3.61	1.93	1.93	-1.04	-1.04
(2,0,0)	3.72	3.71	3.70	2.03	2.01	-0.94	-0.95

En la Fig. 7 (a) se presentan los resultados de los cálculos para la energía del estado base como una función de la separación entre centros iónicos en la molécula de hidrógeno artificial con diferentes parámetros geométricos (líneas continuas) y en la molécula de hidrógeno natural (línea discontinua [23]).

Por un lado, puede observarse el comportamiento similar de las curvas de potencial de la molécula de hidrógeno artificial y la natural, y por otro lado, los resultados presentados ilustran un amplio rango de posibilidades para la alteración de las características de las curvas de potencial, tanto de la posición de equilibrio como la profundidad del pozo, para el caso de la molécula artificial por la variación del espesor del anillo o del radio.

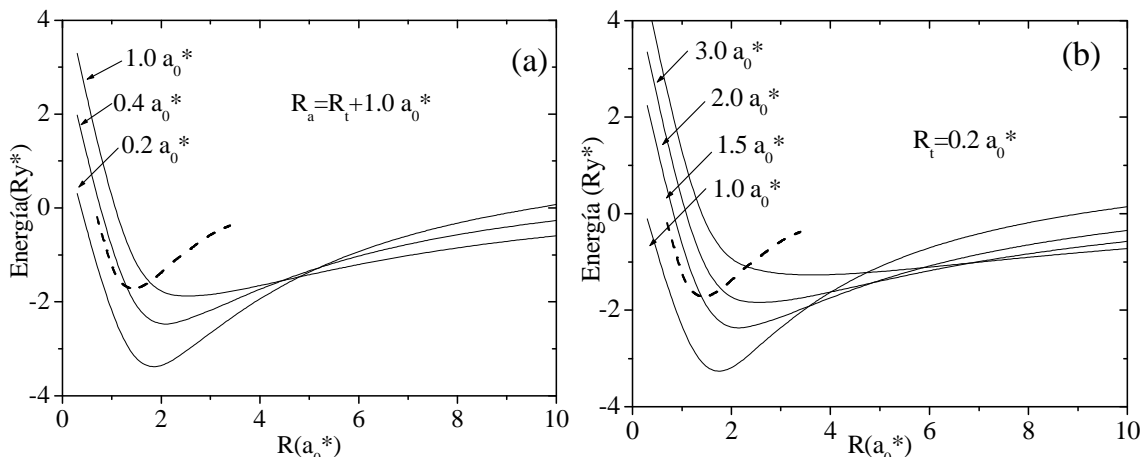


Fig. 7. Energía del estado base como función de la distancia entre centros iónicos para la molécula de hidrógeno artificial con (a) diferente espesor de anillo (líneas continuas), (b) diferentes radios de anillo (líneas continuas) y de la molécula de hidrógeno natural (línea discontinua) [23]

Otra peculiaridad curiosa de las curvas de potencial para diferentes parámetros geométricos es la existencia de una región muy pequeña alrededor de la separación entre centros iónicos $R = 5.0 a_0^*$, donde el orden de los niveles de energía para los radios de la parte derecha e izquierda de esta región se invierte. Todas estas características se deben a la diferencia esencial entre la distribución de carga de las molécula de hidrógeno artificial y la natural.

En la Fig. 7 (b) se presentan las curvas de potencial para anillos con diferentes radios pero igual espesor. Se puede ver claramente, a partir de estas figuras, cómo la competencia entre la repulsión y la atracción entre partículas cambia el orden de las energías del estado base en la molécula de hidrógeno artificial con radios diferentes. Cuando la separación entre iones es muy pequeña, la mayor contribución en la energía la hace la repulsión entre centros iónicos, seguida por la atracción electrón-centros iónicos, mientras que el aporte más pequeño lo hace la repulsión electrón-electrón. Como la contribución de la repulsión entre centros iónicos define el signo de la energía total y es la misma para todos los diferentes radios, el orden de los niveles depende solamente de los valores relativos de los otros dos tipos de interacciones. Los valores absolutos, tanto de la atracción entre electrones y los centros iónicos como de la repulsión entre electrones, es mayor en anillos con radios más pequeños.

Para pequeñas separaciones entre centros iónicos, la energía negativa de la atracción de los electrones con los centros iónicos es mayor que la energía positiva de la repulsión entre electrones y por lo tanto, la energía total de la molécula artificial con radio de anillo más pequeño es más baja. Para grandes distancias entre centros iónicos sucede lo contrario, la repulsión es mayor que la atracción y la estructura con el anillo de radio más grande posee el estado base de

energía más bajo. Esto se muestra en la inversión del orden de la energía del estado base para las estructuras con diferentes radios del anillo.

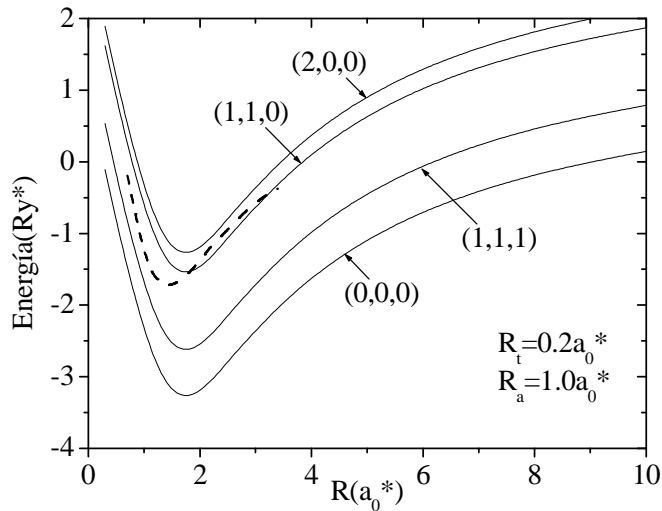


Fig. 8. Energías de algunos niveles más bajos como función de la distancia entre centros iónicos para la molécula de hidrógeno artificial con un radio de revolución del anillo $R_a = 1.0a_0^*$ y radio de sección transversal $R_t = 0.2a_0^*$ (líneas continuas) y en la molécula de hidrógeno natural (línea discontinua).

Finalmente, en la fig. 8 se presentan las curvas de potencial correspondiente a algunos niveles de energía en la molécula de hidrógeno artificial con el radio de revolución del anillo $R_a = 1.0a_0^*$ y radio de sección transversal $R_t = 0.2a_0^*$. Se ve que todas las curvas de potencial tienen una profundidad del pozo mayor a $3Ry^*$ y, por lo tanto, todos los estados son estables. El estado base de la molécula es singlete seguido de lejos, para toda separación entre centros iónicos, por el primer estado triplete.

2.2 Conclusiones

Se calcularon las energías de algunos niveles más bajos como función de la separación entre centros iónicos para el modelo de molécula de hidrógeno artificial que consiste de dos donadoras neutras, D^0 , confinadas en un anillo cuántico toroidal de sección transversal circular y se compararon con la curva de potencial de la molécula de hidrógeno natural. Se muestra que la forma y posición de las curvas de potencial en la molécula de hidrógeno artificial puede cambiarse variando el radio y el espesor del anillo.

Se observa una diferencia en los valores de la profundidad del pozo y de la posición entre las gráficas de la molécula artificial y la molécula natural que es debido al confinamiento adicional que aporta el anillo cuántico impidiendo que el portador se vaya junto con el centro iónico.

Se implementó un modelo de solución que permite calcular, de una manera simple, los niveles de energía aprovechando el hecho que el anillo considerado en este sistema posee un espesor de radio muy pequeño comparado con el radio medio del anillo lo que hace posible la implementación de la aproximación adiabática.

Se destaca la posibilidad de ampliar esta investigación aplicando campo magnético al sistema en la dirección de crecimiento del QD. También, considerar dos QDs acoplados verticalmente

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por la Universidad Industrial de Santander (UIS) a través de la Dirección General de Investigaciones (DIF Ciencias, Cod. 5124) y el Centro de Excelencia de Nuevos Materiales-CENM, bajo contrato No 043-2005 y el código No 1102-05-16923 suscrito con COLCIENCIAS.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] L. Jacak, P. Hawrylak, and A. Wojs, *Quantum Dots* _Springer, Berlin, 1998
- [2] X. Hu and S. D. Sarma, Phys. Rev. A **61**(062301), 062301 (2000).
- [3] G. Burkard, G. Seelig, and D. Loss, Phys. Rev. B **62**(4), 2581 (2000).
- [4] R. J. warburton, C. Schafflein, D. haft, F. Bleckel, A. Lorke, K. Karral, J. M. Garcia, W. Schoenfeld, and P. M. Petroff, Nature, **405**, 926 (2000), T. Fujisawa, D. G. Austin, Y. Tokura, Y. Hirayama, and S. Tarucha, Nature, **419**, 278 (2002)
- [5] A. Lorke, R. J. Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia, and P. M. Petroff, Phys. Rev. Lett. **84**, 2223 (2000).
- [6] T. Raz, D. Ritter, G. Bahir, Appl. Phys. Lett. **82**, 1706 (2003)
- [7] D. Granados, J. M. García, Appl. Phys. Lett. **82**, 2401(2003)
- [8] J. L. Zhu, J. Z. Yu, Y. Kawazoe, J. Phys: Condens. Matter **8**, 7857 (1996)
- [9] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov,. Phys. Stat. Sol. B **213**, 325 (1999)
- [10] B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek, Phys. E **5**, 185 (2000)
- [11] M. V. Broek, F. M. Peeters, Phys. E **11**, 345 (2001)
- [12] B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek, J. Phys.: Condens. Matter **14**, 73 (2002)
- [13] F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B **53**, 1468 (1996)
- [14] J.-L. Zhu, Z. Dai and X. Hu, Phys. Rev. B **68**, 045324 (2003); H. Hu, J. L. Zhu, and J. J. Xiong, Phys. Rev B **62** ,16777 (2000)
- [15] F. J. Betancur, W. Gutierrez, and J. C. Piña, Phys. B **396**, 12-15 (2007)
- [16] B. Partoens, A. Matulis, and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **59**, 1617 (1999), E. Anisimovas and F. M. Peeters, Phys. Rev. B **68**, 115310 (2003), J. L. Zhu, Z. Dai, and X. Hu, Phys. Rev. B **68**, 045324 (2003)

- [17] J. H. Marín, F. García, and I. D. Mikhailov, *Brazilian J. Phys.* **36**, 3B 940 (2006)
- [18] F. Ancioloto, D. G. Austing, M. Barranco, R. Mayol, K. Muraki, M. Pi, S. Sasaki, and S. Tarucha, *Phys. Rev. B* **67**, 205311 (2003); P. A. Maksym, H. Imamura, G. P. Mallon, and H. Auki, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, R299 (2000)
- [19] D. P. DiVincenzo, *Science* **270**, 255 (1995)
- [20] D. Loss and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998)
- [21] K. L. Janssens, F. M. Peeters and V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B* **63**, 205311 (2001);
I. Vurgaftman, J. R. Meyer and L. R. Ram-Mohan. *Appl. Phys. Rev.* **89**, 5815 (2001).
- [22] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, and L. E. Oliveira, *J. Appl. Phys. D* **31**, 3391(1998)
- [23] W. Kolos and L. Wolniewicz, *J. Chem. Phys.* **43**, 2429 (1965)