

Polarizabilidad Eléctrica de Nanoanillos Semiconductores TIPO n

Rafael Gelvez Hernández

Trabajo de grado para optar al título de Magíster en Física:

Director

Willian Gutiérrez Niño

Doctor en Física

Codirector

Jhon Elber León Padilla

Doctor en Física

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

Bucaramanga

2022

Agradecimientos

El primer agradecimiento, gloria y alabanza es a Jehová, quien le debo todo lo que soy y sólo recibo de él son bendiciones.

También tengo especial agradecimiento a mis padres, Luis Enrique Gelvez Meneses y Teresa Hernandez Gualdrón, quienes me han animado a seguir adelante luchando con toda adversidad y no tengo como pagarles por todo lo bueno que recibí de ellos. También he sido afortunado por tener dos madres y padres, porque desde que inicié mi vida Universitaria tuve la suerte de contar con la ayuda de Luz Marina Manrique y Abelardo Buitrago, quienes no tengo ningún parentesco de sangre, pero se volvieron mi familia con el pasar de los años, todavía recuerdo el día que los conocí y me regalaron el primer plato de comida, parece poco, pero para mí cambió por completo mi futuro, quienes me han ayudado más que cualquier ser humano puede ayudar.

A mi Universidad la UIS, quien le debo la oportunidad de ingresar y tener un título profesional, logrando estudiar y trabajar en lo que siempre me ha fascinado “La Física”.

Muy agradecido a mi director, el profesor William Gutiérrez, por su orientación, conocimiento, guía y calidad de persona que es, muestra de ejemplo a seguir. También a mi codirector, Elber León, a quién estoy agradecido por sus charlas científicas y apoyo emocional en este bello proceso que es seguir creciendo como Físico.

Nuevamente y de forma muy especial, mil gracias a mis dos profesores, mi director y mi codirector, quienes cada uno me ayudó a crecer como Físico y ser humano.

También muy agradecido por mis amigos Alfredo Blanco, quien me ayudó a encontrar información en el inicio de la maestría, y a Laurita Lara, siempre conté con ella en todo lo que necesité.

A todos y cada uno de ellos, de corazón, mil gracias por aportar a seguir adelante en mi vida y carrera profesional.

Contenido

	Pág.
Introducción	11
1. Fundamentación Teórica.....	13
1.1 Aproximación de Masa Efectiva.....	13
1.2 Puntos Cuánticos.....	16
1.3 Efecto Aharonov -Bohm.....	22
1.4 Oscilaciones Aharonov-Bohm en Sistemas Ligados	26
1.5 Propiedades Eléctricas en un Sistema.....	29
1.5.1 Momentos dipolares inducidos	30
2 Modelo de Confinamiento	31
2.1 Perfil de un Punto Cuántico	32
2.2 Metodología	34
2.2.1 Aproximación Adiabática	34
2.2.2 Método de Elementos Finitos (FE).....	37
2.2.3 Uso del Método (FE) en el Software Comsol.....	39
3. Resultados y Discusión	41
3.1 Efecto del Confinamiento Estructural y Coulombiano.....	41
3.2 Efecto del Campo Magnético.....	44

POLARIZABILIDAD ELÉCTRICA NANOANILLOS SEMICONDUCTORES TIPO n 4

3.3 Efecto del campo eléctrico..... 48

3.4 Polarización y Polarizabilidad Eléctrica 51

4. Conclusiones..... 53

Referencias Bibliográficas 55

Apéndices..... 59

Lista de Figuras

	Pág.
Figura 1. <i>Energía Versus Curva de un Vector de Onda para un Electrón en la Banda de Conducción bajo la Aproximación de Masa Efectiva</i>	16
Figura 2. <i>Representación Gráfica de la Evolución de la Densidad de Estados para Cristal, Pozo, Hilo y un Punto Cuántico</i>	17
Figura 3. <i>Gráfica que Representa la Variación de la Longitud de Onda de De Broglie en Función de su Masa Efectiva para Diferentes Materiales Semiconductores.</i>	19
Figura 4. <i>Diagrama Esquemático de Evolución de un Punto Cuántico a un Anillo Cuántico</i>	20
Figura 5. <i>Diagrama Esquemático de Anisotropía de un Anillo Cuántico en las Diferentes Direcciones Cristalográficas</i>	21
Figura 6. <i>Diagrama Esquemático del Experimento de Difracción para Electrones en una Región afectada por el Vector Magnético un Solenoide cuyo Campo Magnético Interno es Uniforme y Fuera de él es Cero.</i>	25
Figura 7. <i>Diagrama Esquemático de un Anillo ideal de Radio R en Presencia de un Campo Magnético B en la Dirección z.</i>	26
Figura 8. <i>Diagrama Esquemático de la Forma de los Niveles de Energía, un Anillo Cuántico ideal. En Presencia de un Campo Magnético en la Dirección z</i>	29
Figura 9. <i>Diagrama del Perfil de una Nanoestructura en $\varphi = 0$ para una Donadora Neutra Confinada en un Anillo Cuántico en forma de Volcán de InAs con Altura Variable.</i>	32

Figura 10. *Representación Esquemática de los dos Modelos de QRs Considerados, para (a) $n=0$ y (b) $n=1$.* 33

Figura 11. *Proyecciones de las Densidades Electrónicas de los Primeros 6 Estados sobre el Plano XY (ordenadas de arriba abajo) para los Dos Modelos, y Considerando la Presencia ($\alpha_i = 1$) o Ausencia de Impureza ($\alpha_i = 0$).* 43

Figura 12. *Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos respecto a la Intensidad de Campo Magnético para el QR del Modelo 1, a) sin Impureza y b) con Impureza.* 45

Figura 13. *a) Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos Respecto a la Intensidad de Campo Magnético para el QR del Modelo 2 sin Impureza, b) Amplificación para los Primeros 2 Niveles.* 46

Figura 14. *Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos Respecto a la Intensidad de Campo Magnético para el QR del Modelo 2 con Impureza.* 47

Figura 15. *Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos Respecto a la Intensidad de Campo Eléctrico para el QR del Modelo 1, a) sin Impureza y b) con Impureza.* 48

Figura 16. *Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos respecto a la Intensidad de Campo Eléctrico para el QR del Modelo 2, a) Sin Impureza y b) Con Impureza.* 49

Figura 17. *Dependencia de la Polarización con el Campo Eléctrico de los 3 Primeros estados para el QR con Altura Uniforme, a) sin Impureza y b) con Impureza* 51

Figura 18. *Dependencia de la Polarización con el Campo Eléctrico de los 3 Estados más bajos Para un QR de Altura Variable, (a) sin Impureza y (b) con Impureza.* 53

Lista de Apéndices

	Pág.
Apéndice A. Hamiltoniano General.....	59
Apéndice B. Hamiltoniano Adimensional.	61
Apéndice C. Modelo Simple de un Electrón en un Campo Magnético Externo.	62
Apéndice D. Vector Potencial Magnético Producido por un Solenoide.....	64

Acrónimos y Símbolos

\vec{A}	– Potencial Vectorial Magnético
AB	– Aharonov-Bohm
AME	– Aproximación de Masa Efectiva
\vec{B}	– Campo Magnético
e	– Carga del electrón
\vec{F}	– Campo Eléctrico
QW	– Pozo Cuántico
QWW	– Hilo Cuántico
QD	– Punto Cuántico
QR	– Anillo Cuántico
SAQD	– Punto Cuántico Autoensamblado
MBE	– Deposición Molecular Epitaxial
m_e^*	– Masa efectiva del electrón
OAB	– Oscilaciones Aharonov-Bohm
R_{int}, R_{ext}	– Radios internos y externos
MOCVD	– Deposición Química Metal-Orgánica
μ_i	– Vector momento dipolar eléctrico
V_c	– Potencial de Confinamiento
W	– Ancho de la base del volcán

Resumen

Título: Polarizabilidad eléctrica de nanoanillos semiconductores tipo- n *

Autor: Rafael Gelvez Hernandez**

Palabras Claves: anillo cuántico, oscilaciones Aharonov-Bohm, polarizabilidad eléctrica, impureza donadora, anisotropía estructural.

Descripción

En este trabajo se estudia el efecto de la anisotropía estructural de un anillo cuántico autoensamblado de InAs/GaAs sobre el espectro de energía, la polarización y la polarizabilidad eléctrica de una impureza donadora localizada en el interior del anillo, y en presencia de un campo eléctrico aplicado en el plano de crecimiento y de un campo magnético perpendicular a este plano. El sistema se ha modelado como un punto cuántico tridimensional en forma de volcán de altura no uniforme y la ecuación de Schrödinger se ha planteado en el marco de la aproximación de masa efectiva. Con el objetivo de reducir el problema tridimensional a uno bidimensional, hemos tomado ventaja de la aproximación adiabática para obtener un potencial adiabático en el plano de crecimiento y resolver la ecuación de Schrödinger mediante un método de elementos finitos bidimensionales.

Nuestros resultados muestran que en un anillo anisotrópico sin impurezas es posible encontrar oscilaciones de Aharonov-Bohm de baja amplitud en la energía, pero ante la presencia de una impureza positivamente cargada dichas oscilaciones desaparecen completamente. De otra parte, este trabajo también pone de manifiesto la posibilidad de tener un pico agudo en la polarizabilidad eléctrica conjugando la existencia de anisotropía estructural junto con la presencia de una impureza donadora descentrada.

Este comportamiento abrupto en los momentos dipolares eléctricos será un aspecto que verá reflejado en las probabilidades de transición entre niveles y por tanto en las propiedades ópticas al momento de estudiar QRs

* Trabajo de grado

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutiérrez Niño, Doctor en Física. Codirector: Jhon Elber León Padilla, Doctor en Física

Abstract

Title: Electric polarizability of n -type semiconductor nanorings*

Author: Rafael Gelvez Hernandez**

Keywords: quantum ring, Aharonov-Bohm oscillations, electric polarizability, donor impurity, structural anisotropy.

Description

In this paper we study the effect of the structural anisotropy of a self-assembled quantum ring of InAs / GaAs on the energy spectrum, polarization and electric polarizability of a donor impurity located inside the ring, and in the presence of an electric field applied in the plane of growth and of a magnetic field perpendicular to this plane. The system has been modeled as a three-dimensional quantum dot volcano-shaped of not uniform height, and the Schrödinger equation has been formulated within the framework of the effective mass approximation. In order to reduce the three-dimensional problem to a two-dimensional one, we have taken advantage of the adiabatic approach to obtain an adiabatic potential in the growth plane and solve the Schrödinger equation by means of a two-dimensional finite element method.

Our results show that in an anisotropic ring without impurities it is possible to find low amplitude Aharonov-Bohm oscillations in energy, but in the presence of a positively charged impurity such oscillations disappear completely. On the other hand, this work also highlights the possibility of having a peak in electric polarizability due to the existence of structural anisotropy and the presence of a donor.

This abrupt behavior in the electrical dipole moments will be an aspect that will be reflected in the probabilities of transition between levels and therefore in the optical properties when studying QRs.

* Degree work

** Science Faculty. School of Physics. Director: Willian Gutiérrez Niño, Ph.D. in Physics. Co-director: Jhon Elber León Padilla, Ph.D. in Physics

Introducción

Los puntos cuánticos (QDs-Quantum Dots) son materiales semiconductores nanoestructurados en las tres dimensiones, por lo que han resultado ser un excelente laboratorio para estudiar propiedades cuánticas debido al fuerte confinamiento que impone su diminuto tamaño, pues sus dimensiones son de algunas decenas de nanómetros o incluso de solo unos cuantos nanómetros (Ashoori, 1996). Estos puntos cuánticos presentan un confinamiento en las tres dimensiones espaciales, dejando una similitud clara con los sistemas atómicos. El espectro energético de estos sistemas depende fuertemente de la forma y el tamaño del punto cuántico. Dentro de la amplia diversidad de morfologías que pueden presentar los puntos cuánticos, sin duda, la que viene ganando más interés en la comunidad científica es la geometría anular, es decir los QDs denominados anillos cuánticos (QRs-Quantum Rings) (Fomin, y otros, 2018). El creciente desarrollo en física experimental y teórica ha permitido la fabricación de esta clase de nanoestructuras, las cuales son obtenidas a partir del recubrimiento de puntos cuánticos autoorganizados crecidos por técnica de epitaxia de haz molecular. Estos sistemas presentan características diferenciales, con respecto a sus QDs homólogos. Por ejemplo, las singulares propiedades magnéticas de los QRs están asociadas con su particular topología no simplemente conexa, la cual hace posible la aparición de las llamadas oscilaciones de Aharonov-Bohm en la energía, y por ende en todas sus propiedades espectrales. Es precisamente esta particularidad la que permite su aplicación en el desarrollo de un buen número de dispositivos optoelectrónicos, como, por ejemplo: el mejoramiento de la calidad de imágenes, donde se pueden obtener una gran variedad de colores ajustando el tamaño del punto cuántico, otras aplicaciones de interés en la

comunidad científica y la industria, recaen sobre la creación de celdas solares más eficientes (Tomah, Qing, & Koichi, 2016), (Nozik, 2002).

Los QRs tienen propiedades diferentes a los QDs, y puede dar lugar a la aparición de efectos únicos como es el caso del efecto Aharonov-Bohm, el cual es un fenómeno puramente cuántico que solo ha sido observado en sistemas con una geometría característica tipo anillo. En el trabajo original de Y. Aharonov y D. Bohm (Aharonov & Bohm, 1959), se demuestra la influencia que tiene en los sistemas cuánticos el vector potencial magnético, para observar este efecto, fue necesario idear un experimento donde el vector de potencial modificara el patrón de interferencia, produciendo una diferencia de fase que es proporcional al flujo magnético.

En este trabajo se estudia el efecto que tiene la anisotropía estructural de un anillo en forma de volcán con altura variable bajo la presencia de campos magnético y eléctrico. Se analiza el efecto que producen estos campos externos sobre la polarización y la polarizabilidad en presencia y ausencia de una impureza donadora neutra (Escorcía, García, & Mikhailov, 2018). En este trabajo también se han obtenido resultados importantes sobre el efecto que tiene la anisotropía estructural de un QR sobre la densidad electrónica y las oscilaciones Aharonov-Bohm en la energía.

1. Fundamentación Teórica

1.1 Aproximación de Masa Efectiva

El modelo de masa efectiva es un concepto clave para dilucidar el movimiento de los electrones en materiales semiconductores. Para entender este concepto es necesario entender la influencia de los potenciales cristalinos producidos por los iones del cristal sobre el movimiento de un electrón de conducción, o lo que es lo mismo, considerar un electrón bajo la acción de una serie de pozos de potencial que constituyen esta red atómica. En este caso, a diferencia de lo que sucede en el vacío, la masa del electrón es normalizada por la interacción con la red cristalina, denominándose a este nuevo parámetro masa efectiva, en la cual, están contenidas todas las informaciones de la red y los átomos del material.

Para entender como los portadores de carga se comportan en un sólido cristalino, es necesario estudiar y develar como el movimiento del portador de carga puede ser afectado por la red cristalina. Para el caso unidimensional, el electrón dentro del cristal puede ser descrito como un paquete de onda que se mueve con una determinada velocidad de grupo $v_g = \frac{d\omega}{dk}$, donde la energía es dada por $\varepsilon = \hbar\omega$, y reemplazando la velocidad de grupo podemos obtener la siguiente expresión:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon}{dk} \quad (1,1)$$

En el caso del portador de carga que está sometido a una fuerza eléctrica externa, en este caso la producida por la red cristalina, el trabajo realizado por esta fuerza eléctrica es:

$$d\varepsilon = Fdx$$

$$\frac{d\varepsilon}{dk} = F \frac{dx}{dk} = F \frac{dx}{dt} \frac{dt}{dk} = Fv_g \frac{dt}{dk}. \quad (1.2)$$

Ya que la velocidad del electrón coincide con la velocidad de grupo del paquete de ondas.

Reescribiendo la ecuación 1.2 de la siguiente forma:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = Fv_g, \quad (1.3)$$

Se obtiene que la velocidad a la que varía la energía de una partícula respecto del tiempo es igual al trabajo realizado por la fuerza externa sobre dicha partícula por unidad de tiempo. De la ecuación 1.2 también se puede obtener la ecuación dinámica entre la fuerza y el momento del electrón k .

$$\hbar \frac{dk}{dt} = F. \quad (1.4)$$

Ahora, si tenemos en cuenta que sobre el electrón actúa una fuerza externa F , bajo su acción dicha partícula adquiere una aceleración:

$$a = \frac{F}{m^*} \quad (1.5)$$

en dirección de la fuerza aplicada, donde la masa m^* , representa la masa normalizada por la red cristalina, la cual es llamada masa efectiva del electrón en el cristal. La derivada de la velocidad de grupo respecto del tiempo puede obtenerse derivando la ecuación 1.1

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt} \frac{d^2\varepsilon}{dk^2} \quad (1.6)$$

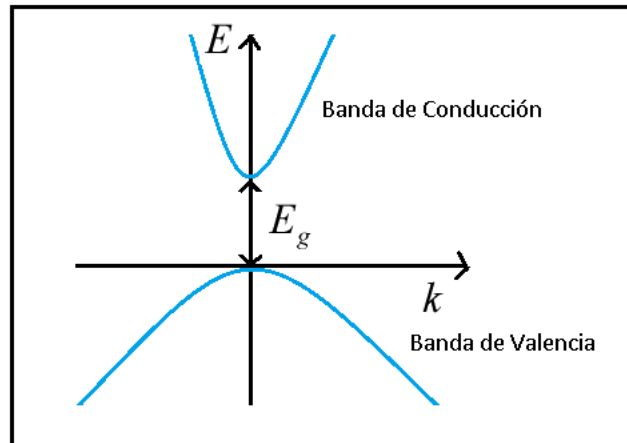
Reemplazando este valor en la ecuación 1.5 y despejando obtenemos la siguiente relación para la masa efectiva:

$$m^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2\varepsilon}{d^2k} \right)^{-1} \quad (1.7)$$

la cual representa la masa del portador de carga como resultado de la interacción con la red cristalina. Una de las primeras conclusiones al analizar la ecuación (1.7), es que la masa efectiva depende de las curvaturas de $\varepsilon(k)$, por lo tanto, el hecho que las curvaturas de las bandas de conducción y valencia sean diferentes, esto lleva, a que las masas efectivas para electrón en la banda de conducción y hueco en la banda de valencia sean diferentes. Para el caso de bajas energías, se tiene que el portador de carga tendrá energías que están cerca al fondo de la banda de conducción (caso del electrón) o cercanas al techo de la banda de valencia (caso del hueco), por lo

que la aproximación armónica será apropiada, y en este caso la masa efectiva del portador será constante en el material.

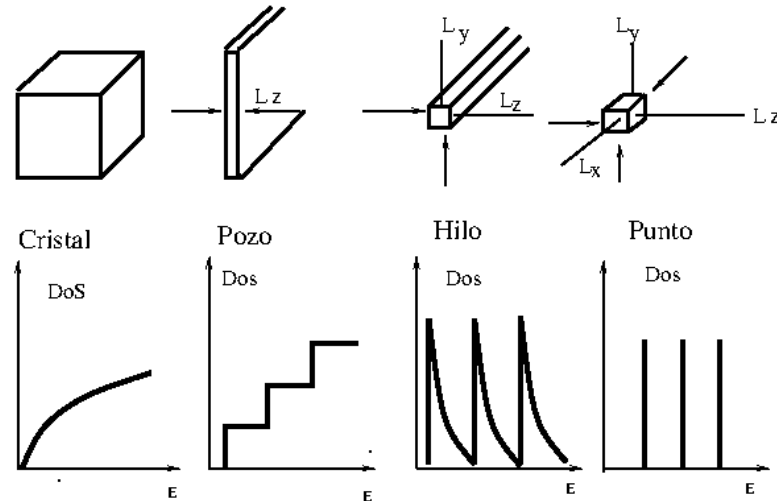
Figura 1. *Energía Versus Curva de un Vector de Onda para un Electrón en la Banda de Conducción bajo la Aproximación de Masa Efectiva*



1.2 Puntos Cuánticos

El confinamiento cuántico que ofrecen las nanoestructuras semiconductoras, hace referencia al confinamiento de los portadores de carga (electrones-huecos) en una o varias direcciones espaciales. Dependiendo del número de dimensiones espaciales en las que sea restringido el movimiento de los portadores de carga, podemos ir de sistemas cuasi-bidimensionales, como pozos cuánticos y superredes, a sistemas cuasi-unidimensionales, llamados hilos cuánticos y por último llegar a sistemas cuasi-cero dimensionales, denominados puntos cuánticos (Jasprit Singh), los cuales por su semejanza con los sistemas Atómicos se las ha considerado como átomos artificiales. En la Figura 2 se observa como varia el comportamiento de la densidad de estados, a medida que pasamos de un sistema 3D,2D,1D,0D.

Figura 2. Representación Gráfica de la Evolución de la Densidad de Estados para Cristal, Pozo, Hilo y un Punto Cuántico



El interés que surge por estudiar los QDs obedece a que son un excelente laboratorio para el estudio de diversos fenómenos cuánticos en condiciones de fuerte confinamiento. Esto se debe a que cuando las dimensiones espaciales de un cristal son reducidas a escalas que son comparables con la longitud de onda de De Broglie, comienza a ser notable el comportamiento cuántico de las partículas confinadas. Por ejemplo, para electrones moviéndose en cierto material semiconductor y a una temperatura T , la longitud de onda de De Broglie está dada por:

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{m^* k_b T}} \quad (1.8)$$

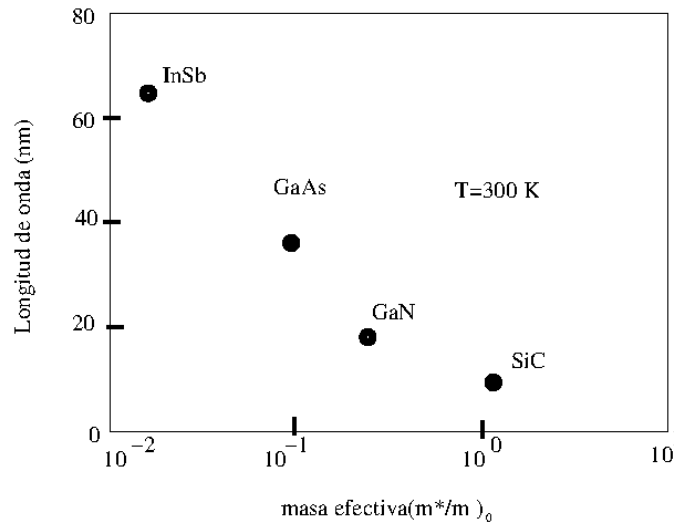
donde m^* es la masa efectiva del electrón y k_b es la constante de Boltzmann.

En el caso de GaAs, uno de los materiales semiconductores más estudiados, el valor de la masa efectiva es $m^* = 0.067m_e$ y a una temperatura ambiente de $T = 300^{\circ}k$, se obtiene una longitud de onda de De Broglie $\lambda_{DB} = 4.2nm$. Por lo tanto, para poder observar efectos cuánticos en estructuras de GaAs es necesario que sus dimensiones sean del orden de los 10 nm. De otra parte, para determinar cómo varía la longitud de onda De Broglie del electrón en diferentes materiales semiconductores se tiene la siguiente expresión en la relación a la masa efectiva:

$$\lambda_{DB} = \frac{h}{\sqrt{m^* k_b T}} = \frac{h}{p} = \lambda_0 \sqrt{\frac{m_e}{m^*}} \quad (1.9)$$

donde h representa la constante de Planck, p es la magnitud del momentum del electrón, λ_0 representa la longitud de De Broglie para el electrón en el vacío. Si variamos las masas efectivas entre 0.01 y 0.1 veces m_e , obtenemos que la longitud de onda de De Broglie estará entre 73 y 7.3 nm, las cuales son mayores que las constantes de red de la mayoría de materiales semiconductores. A continuación, hacemos una representación gráfica para observar la variación de la longitud de onda de De Broglie dada por la ecuación 1.9, para algunos de los materiales semiconductores más utilizados en la actual industria de semiconductores. Podemos observar que materiales con menor masa efectiva como InSb, tiene una longitud de onda de De Broglie Mayor.

Figura 3. Gráfica que Representa la Variación de la Longitud de Onda de De Broglie en Función de su Masa Efectiva para Diferentes Materiales Semiconductores.

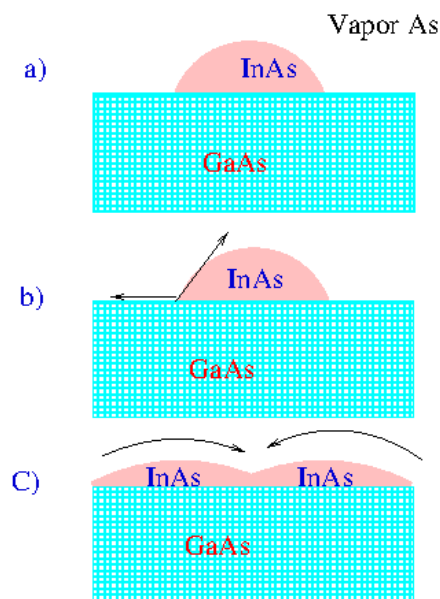


Todos estos resultados sobre el confinamiento de los portadores de carga tienen consecuencias observables sobre el espectro de los niveles de energía del sistema, que pueden ser apreciados específicamente cuando se calcula la densidad de estados, que es una magnitud presente en muchos de los cálculos que se hacen para encontrar las propiedades eléctricas, ópticas o termoeléctricas de materiales semiconductores nanoestructurados.

Ahora, ante la cuestión: ¿cómo se fabrican estos puntos cuánticos? Podemos decir que las heteroestructuras semiconductoras se forman de la unión de dos materiales semiconductores, y esto fue posible gracias al avance en las técnicas experimentales de crecimiento, como son las técnicas: Molecular Beam Epitaxi(MBE) e Metal-Organic Chemical Vapour Deposition (MOVCD) (Nishinaga & Naritsuka, 2003), (Williams, 1989). Estas técnicas consiguieron un crecimiento de capa por capa para una gran cantidad de materiales semiconductores. Uno de los métodos más usados para el crecimiento de puntos cuánticos autoensamblados es el método de crecimiento de Stranski Krastranov (Stranski & Krastanow, 1938). Este método precisa de

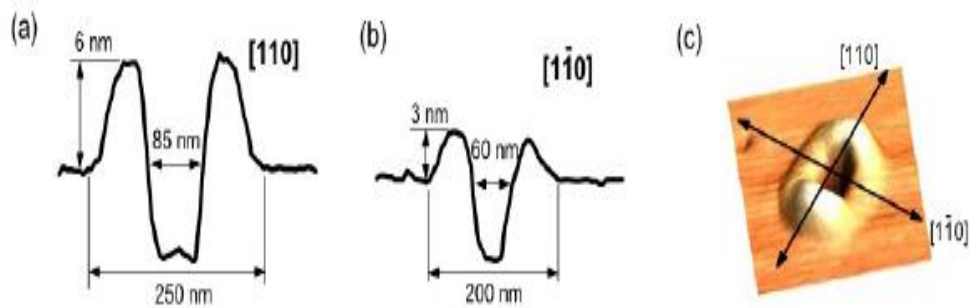
materiales de diferentes constantes de red, y consiste en crecer una capa de un material sobre un sustrato, forzando a que el material depositado sobre el sustrato trate de asumir el parámetro de red de este último, lo cual genera una tensión que va aumentando a medida que se aumenta el número de capas de material depositadas, hasta llegar a un determinado espesor crítico, los efectos de las tensiones producen una auto-organización del material depositado. En ese preciso momento los átomos de la última camada se desplazan hacia los laterales agrupándose en pequeñas islas que pueden presentar diversidad de formas, dependiendo de las condiciones de crecimiento. García y coautores (García, y otros, 1997) consiguieron crecer anillos cuánticos de InAs cubiertos por una capa amortiguadora de GaAs con un grosor menor que la altura máxima del punto. Como resultado de esta investigación se obtuvo que para ciertos valores específicos de esta capa se produce un cambio abrupto en el perfil de los puntos cuánticos; con lo cual, el material contenido en el centro de estas nanoestructuras es expulsado hacia los bordes, originando la forma geométrica de un anillo, tal como se puede observar en Figura 4.

Figura 4. Diagrama Esquemático de Evolución de un Punto Cuántico a un Anillo Cuántico



La fabricación de estas estructuras, llamadas anillos cuánticos o nanoanillos, han creado un nuevo campo de investigación en física de semiconductores con miras a innumerables aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos. Un rasgo relevante de estas formas anulares es que no son perfectamente circulares y de altura uniforme, por el contrario, presentan variaciones en su ancho y altura cuando se hace un barrido respecto a la coordenada azimutal, tal como observa en imágenes experimentales reportadas recientemente (ver figura 5). En esta imagen se presentan los resultados de algunas mediciones experimentales, observando una notable diferencia de alturas entre diferentes direcciones cristalográficas.

Figura 5. Diagrama Esquemático de Anisotropía de un Anillo Cuántico en las Diferentes Direcciones Cristalográficas



Nota: Aierken, A.; Hakkarainen, T.; Riikonen, J. and Spooanen, M. (2008). Nanotechnology 19,245304

La presencia de esta anisotropía estructural en los QRs hace que sea necesaria la implementación de modelos teóricos tridimensionales y muy elaborados, en los cuales se consideren algunos de los rasgos más importantes de la morfología. Este hecho hace que el estudio

teórico de tales estructuras presente mayores dificultades al momento de encontrar soluciones, ya sean analíticas o computacionales. A este respecto, vale la pena mencionar el trabajo de Rodríguez-Prada y colaboradores, pertenecientes al grupo FICOMACO, quienes estudiaron el espectro de energía de un QR tridimensional de altura no uniforme con un electrón confinado y en presencia de un campo magnético externo aplicado en la dirección de crecimiento mediante el método de diagonalización exacta (Rodríguez-rada, García, & Mikhailov, s.f.), (Betancur, Gutiérrez, Mikhailov, & Paredes, 2006).

Cuando unimos dos materiales semiconductores con diferentes propiedades como: constante de red, diferentes masas efectivas, diferentes brechas de energía prohibidas. En el caso de estudio de heteroestructuras semiconductoras donde se tiene discontinuidad de las bandas en varias direcciones, se han planteado modelos sofisticados para describir el potencial de confinamiento creados por la discontinuidad de las bandas en la dirección de crecimiento, que son producidas por los saltos de las energías correspondientes a los pisos de las bandas de conducción en las juntas. Este potencial de confinamiento es dependiente de los cambios bruscos de la constante dieléctrica (Cen, Chen, & Baja, 1994), defectos de tensión (Grundman, Stier, & Bimberg, 1995). En este trabajo de maestría trabajamos con un potencial de confinamiento simple de barrera infinita, que permite obtener soluciones analíticas para el confinamiento radial. Esta solución en esta dirección de confinamiento depende de los parámetros del material de pozo. Esto se hace como primera medida para simplificar los cálculos.

1.3 Efecto Aharonov -Bohm

Uno de los efectos físicos más importantes en la física contemporánea, es el denominado efecto Aharonov-Bohm., el cual tiene implicaciones en innumerables campos de la física actual,

pasando por cosmología a física de semiconductores (Bowick & et.al., 1988). Este efecto nace como consecuencia de estudiar el efecto mensurable del vector potencial magnético en sistemas cuánticos, es bien conocido de la electrodinámica clásica que los vectores potenciales surgen como simplificaciones meramente matemáticas, que permiten simplificar las ecuaciones de Maxwell a través de transformaciones de gauge, dejando una solución más clara y simplificada, lo cual a posteriori, deja inalterada las distribuciones de carga y de corriente (Feynman, Leighton, & Sands, 1979).

Con objeto de estudiar las implicaciones físicas del vector potencial magnético sobre sistemas cuánticos, tenemos que recurrir a modificar la ecuación que describe el comportamiento de partículas bajo campo magnético en sistemas cuánticos, esto puede hacerse modificando el vector momento en la ecuación de Schrödinger para tomar la acción del campo magnético:

$$\frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla - q\vec{A} \right)^2 \psi + V\psi = E\psi \quad (1.10)$$

Esta modificación del momento del electrón por cuenta del campo magnético, es equivalente a expresar la función de onda ψ multiplicarla por una fase arbitraria que depende del vector potencial.

$$\psi' = e^{ig(r)}\psi(r) \quad (1.11)$$

la elección de la fase $g(r')$ (Griffiths, sf) es arbitraria y está dada por la expresión:

$$g(r') = \frac{q}{\hbar} \int_0^r A(r') dr' \quad (1.12)$$

donde q es la carga del electrón, \hbar es la constante de Planck, con algunos artificios matemáticos se puede demostrar que la función de onda ψ' modificada por una fase satisface la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} (\nabla)^2 \psi' + V\psi' = E\psi' \quad (1.13)$$

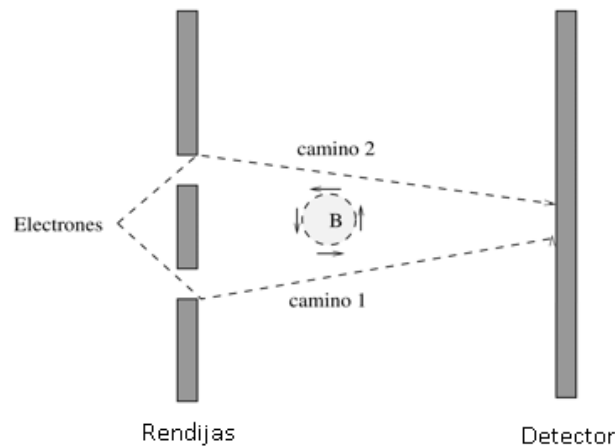
Por ejemplo, si aplicamos el campo magnético en la dirección $B = B_z$ perpendicular al plano del anillo, dada que las transformaciones de gauge para potenciales se cumplen para la ecuación de Schrödinger. Esto significa que al definir un nuevo vector potencial $A'(r) = A(r) + \Delta\Lambda(r)$, donde Λ es una función real arbitraria, el valor del campo magnético no se ve afectado, se puede escoger un valor del vector de potencial arbitrario. Podemos concluir que la elección de una nueva fase, no altera la física del sistema, para una discusión más amplia de estos conceptos físicos puede hacerse una consulta mayor en la lectura de Feynman en el capítulo introductorio a los efectos de superconductividad.

Para demostrar las implicaciones físicas que tiene el vector potencial en sistemas cuánticos Aharonov y Bohm, plantearon el siguiente experimento: hacer pasar un haz de electrones por dos rendijas, en la región entre las rendijas y el detector es colocado un solenoide en forma vertical,

produciendo un campo magnético dentro del solenoide en la dirección *z* (apuntando fuera de la página), y fuera de este, un campo magnético nulo. En la región sin presencia de campo magnético, se tiene un vector potencial magnético¹.

$$\vec{A} = \frac{nu_0iR^2}{2\rho} \hat{\theta}. \quad (1.14)$$

Figura 6. Diagrama Esquemático del Experimento de Difracción para Electrones en una Región afectada por el Vector Magnético un Solenoide cuyo Campo Magnético Interno es Uniforme y Fuera de él es Cero.



Mostrando que los electrones recorren la trayectoria circular dependiendo del sentido del vector potencial respecto al sentido del movimiento de las partículas, el vector magnético efectivo $\vec{p}' = \vec{p} - q\vec{A}$ aumenta si el vector magnético \vec{A} se encuentra en la misma dirección que el momento \vec{p} , y disminuirá en caso contrario. Esto trae como consecuencia directa que electrones que recorren

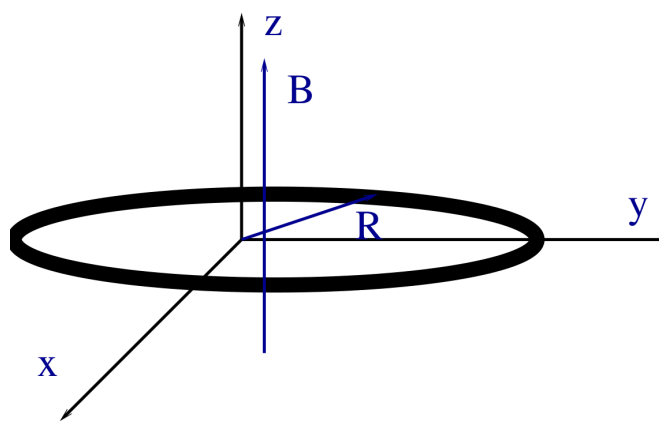
¹ Ver Apéndice D. Vector Potencial Magnético producido por un solenoide.

el camino 1 tendrán un momento diferente al momento de los electrones que recorren el camino 2, como es mostrado en la figura 6, dejando como consecuencia una alteración en el patrón de interferencia (Chambers, 2009).

1.4 Oscilaciones Aharonov-Bohm en Sistemas Ligados

Con el objetivo de estudiar las oscilaciones Aharonov-Bohm en sistemas ligados, se iniciará por analizar el efecto de un campo magnético sobre los niveles de energía de un anillo cuántico ideal como el mostrado en la figura 7. El cuál es el sistema más simple para comenzar a estudiar este efecto².

Figura 7. Diagrama Esquemático de un Anillo ideal de Radio R en Presencia de un Campo Magnético B en la Dirección z



El Hamiltoniano de un electrón de masa m^* dentro de un anillo ideal con simetría azimutal, bajo la presencia de un magnético en la dirección de crecimiento del anillo, puede ser expresado de la siguiente forma:

² Ver Apéndice C. Modelo simple de un electrón en un campo magnético externo.

$$\hat{H}_{1D} = -\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \quad (1.15)$$

Donde R es el radio que va desde el origen hasta la posición del electrón, el primer término de la derecha de la ecuación (1.15), representa la energía cinética del electrón, el segundo representa el término paramagnético y el último es el diamagnético respectivamente, la competencia entre estos dos últimos términos es una de las causas de las oscilaciones en los niveles de energía.

El Hamiltoniano aplicado a la ecuación de Schrödinger.

$$H_{1D}\psi_{1D}(\varphi) = E\psi_{1D}(\varphi) \quad (1.16)$$

Debido a la simetría de nuestro sistema, la función de onda es periódica $\psi_{1D}(\theta) = \psi_{1D}(\theta + 2\pi)$, y por conveniencia, para encontrar los valores propios de energía de la ecuación (1.16), se tomó la función de onda de la forma $\psi_{1D}(\theta) = Ae^{im\theta}$, donde m es el momento angular y varia ($m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm n$)

Reemplazando la función de onda $\psi_{1D}(\theta)$ en la ecuación 1.16, se tiene la energía³

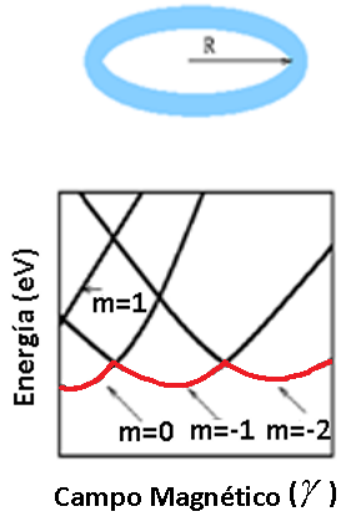
$$E_m = \frac{m^2}{R^2} + \gamma m + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \quad (1.17)$$

³ En el Apéndice A y B, se presenta el Hamiltoniano adimensional.

La contribución de energía γm es paramagnética, la cual define el acople entre el campo magnético y el momento magnético permanente del electrón al rotar en el anillo, este término puede tomar valores positivos o negativos, representados en el giro horario o anti horario del electrón. El último término de $\frac{\gamma^2 R^2}{4}$ es la energía representada en el término diamagnético, presente cuando hay un cambio del momento orbital producido por la aplicación de un campo magnético, incrementando la energía cinética del electrón, siempre será positiva y cuadrática (ASHCROFT/ MERMIN, sf).

Donde m representa el momento angular, y para un determinado valor fijo de m tenemos una dependencia parabólica de la energía respecto al campo magnético, a lo que se denominó oscilaciones de Aharonov-Bohm (Peshkin & Tonomura, sf), porque representan oscilaciones periódicas del campo magnético, al tomar variaciones entre la contribución de estos términos, ya que en algunos instantes la energía se comporta como una línea recta decreciente, indicando que el término paramagnético es más fuerte que el diamagnético, y en otros instantes del campo magnético, el término diamagnético es más fuerte y forma una parábola cóncava hacia arriba. En la figura 8 se muestra una representación gráfica de como varían estas oscilaciones de energía a medida que aumenta el campo magnético, y la curva roja representa las oscilaciones de menor energía para cada estado $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$.

Figura 8. Diagrama Esquemático de la Forma de los Niveles de Energía, un Anillo Cuántico ideal. En Presencia de un Campo Magnético en la Dirección z



1.5 Propiedades Eléctricas en un Sistema

Una propiedad eléctrica se puede considerar como la interacción entre diferentes cargas o bien entre una carga y un campo eléctrico externo. Produciendo la primera interacción la aparición de un momento dipolar eléctrico, y la segunda se puede relacionar con el índice de refracción o la actividad óptica.

Para el caso del dipolo eléctrico, se tienen dos cargas eléctricas q y $-q$ separadas una distancia d , y la distribución de carga se representa por un vector conocido como el momento dipolar eléctrico $\vec{\mu}$, cuya magnitud es $\vec{\mu} = q\vec{d}$. Una molécula polar se presenta cuando el momento dipolar eléctrico es permanente, y en el caso de una molécula no polar se tendrá un momento dipolar inducido, producido por un campo eléctrico externo, y cuando este campo se retira de la molécula su momento dipolar también desaparece. La polarización de una muestra, P , es la

densidad del momento dipolar eléctrico, es decir, es el momento dipolar eléctrico medio de las moléculas $\langle \vec{\mu} \rangle$ multiplicado por la densidad numérica, N :

$$P = \langle \vec{\mu} \rangle N \quad (1.18)$$

Se conoce un dieléctrico como un medio no conductor polarizable. Y la polarización de un material isotrópico es cero cuando las moléculas tienen orientaciones al azar y por lo tanto $\langle \vec{\mu} \rangle = 0$. En presencia de un campo eléctrico externo, las moléculas tienden a linearse, debido a que algunas orientaciones tienen energía mínima (Atkins, sf).

1.5.1 Momentos dipolares inducidos

Clásicamente, la energía E de un átomo en presencia de un campo eléctrico F se puede expresar como una serie de Taylor alrededor del campo $F = 0$.

$$E = E_0 - \vec{\mu} \cdot \vec{F} - \frac{1}{2} \vec{F} \cdot \vec{\alpha} \cdot \vec{F} - \dots, \quad (1.19)$$

donde la magnitud μ es el momento dipolar eléctrico y se puede expresar como la variación de la energía del sistema respecto al campo eléctrico aplicado:

$$\mu = - \left[\frac{\partial E}{\partial F} \right]_{F=0} \quad (1.20)$$

Un campo eléctrico externo puede cambiar el dipolo eléctrico permanente de un átomo o molécula, distorsionando dicho sistema. Y este momento dipolar inducido, $\bar{\mu}^*$, es proporcional a la intensidad del campo eléctrico \vec{F} . Teniendo su forma $\bar{\mu}^* = \alpha \vec{F}$.

Donde la constante de proporcionalidad α es la polarizabilidad del sistema, la cual de la ecuación 1.24 se puede escribir como:

$$\alpha = - \left[\frac{\partial^2 E}{\partial F^2} \right]_{F=0}, \quad (1.21)$$

o también se puede expresar como la variación del momento dipolar eléctrico respecto al campo eléctrico externo:

$$\alpha = \frac{\partial \mu}{\partial F}, \quad (1.22)$$

2. Modelo de Confinamiento

Para esta investigación se presenta en la sesión 2.1 una descripción del perfil del punto cuántico y los parámetros usados para modelar nuestro sistema. Y en las sesiones siguientes se presenta la metodología seguida para resolver nuestro problema.

donde el parámetro h_0 corresponde a la mínima altura que tendrá el anillo al hacer un recorrido sobre la trayectoria central, esto es, siguiendo la circunferencia $\rho_c = 0.5(R_e + R_i)$

Y el parámetro Δh define la máxima variación en la altura por encima de h_0 al seguir la misma trayectoria central. El parámetro n permite modular la cantidad de máximos que presentará la estructura al hacer un barrido en dirección azimutal ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$).

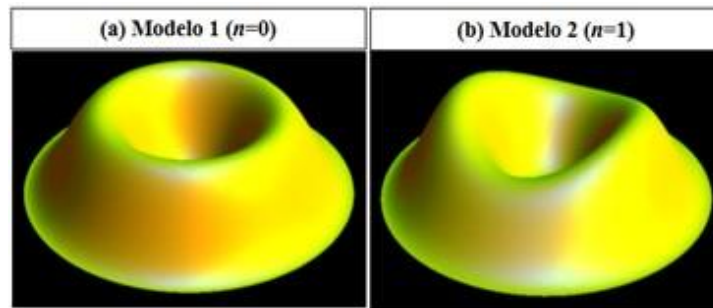
El potencial de confinamiento de la estructura es:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \text{si } (R_i < \rho < R_e) \wedge (0 < z < h) \\ \infty, & \text{en cualquier otro caso.} \end{cases} \quad (2.3)$$

Con potencial cero dentro del punto cuántico e infinito por fuera de ella, usando un potencial de barrera infinita.

En la figura 10 se observan las dos representaciones esquemáticas del punto cuántico en forma de volcán para los casos con $n=0$ y $n=1$.

Figura 10. Representación Esquemática de los dos Modelos de QRs Considerados, para (a) $n=0$ y (b) $n=1$.



Dado que el potencial de confinamiento estructural es de barrera infinita, los parámetros físicos pertenecen exclusivamente al InAs, por lo que la masa efectiva para el electrón tiene el valor $m^* = 0.023m_e$, y el valor de la constante dieléctrica es $\epsilon = 15.2\epsilon_0$

2.2 Metodología

A continuación, se da una descripción de los principales componentes de la metodología seguida para dar solución a nuestro problema.

2.2.1 Aproximación Adiabática

Para este sistema de baja dimensionalidad se resuelve la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de la forma $H\psi(r) = E\psi(r)$. Escribiendo el Hamiltoniano, bajo la aproximación de la masa efectiva para el electrón con masa m_e^* , en la forma: $H = H_B + H_F$, para discriminar la contribución de cada uno de los campos, tenemos que:

$$\begin{aligned}
 H_B &= \frac{1}{2m^*} (\vec{p} - e\vec{A}) + V = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + \frac{i\hbar e B}{2m^*} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m^*} + V(\vec{r}) \\
 H_F &= e\vec{F} \cdot \vec{r} - \frac{\alpha_i e^2}{4\pi\epsilon |\vec{r} - \vec{r}_i|}
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Por lo que el Hamiltoniano que describe nuestro sistema en forma general es:

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + \frac{i\hbar e B}{2m^*} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m^*} + e\vec{F} \cdot \vec{r} - \frac{\alpha_i e^2}{4\pi\epsilon |\vec{r} - \vec{r}_i|} + V(\vec{r}) \tag{2.5}$$

donde B es la intensidad del campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento, \vec{F} es el vector de campo eléctrico orientado en el plano de crecimiento, $r = (\rho, \varphi, z)$ es el radio vector que define la posición del electrón, $\vec{r}_i = (\rho_i, \varphi_i, z_i)$ es el radio vector para la posición de la impureza, α_i es un parámetro que introduce, ($\alpha_i = 1$) u omite ($\alpha_i = 0$) la presencia de la impureza cargada positivamente, y $V(r)$ representa el potencial de confinamiento estructural, el cual para nuestro caso está definido en (2.3).

Debido a que nuestro sistema presenta anisotropía de tipo estructural, ya que la morfología descrita ofrece un confinamiento diferente para diferentes direcciones, y teniendo en cuenta, además, que la impureza se considera descentrada, no es posible realizar una separación de variables de ninguna de las tres coordenadas. Por tal motivo, y con el objeto de evitar también un alto costo computacional que tiene el resolver un modelo tridimensional mediante el método de elementos finitos, hemos aplicado la aproximación adiabática y ha mostrado ser una herramienta poderosa para encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger en diferentes puntos cuánticos autoensamblados. Bajo esta aproximación el grupo FICOMACO ha realizado algunas publicaciones (Rodríguez-Prada, García, & Mikhailov, 2014), (Gómez, Marín, Gutiérrez, & García, 2009), (R-Fulla, Marín, Gutiérrez, Mora-Ramos, & Duque, 2014), obteniendo resultados que están en concordancia con técnicas de solución más exactas. En este mismo grupo, recientemente se han hecho estudios de puntos cuánticos de diferentes formas usando el software COMSOL multiphysics® bajo la aproximación de masa efectiva (Vinasco, y otros, 2020). La aproximación adiabática aprovecha el hecho de que los QRs auto ensamblados son estructuras muy delgadas, por lo que el movimiento en la dirección de crecimiento es mucho más rápido que

el movimiento en el plano. En este sentido, la solución de la ecuación de Schrödinger que corresponde al Hamiltoniano (2) se representa como sigue:

$$\psi(r) = f(z, h)\psi(x, y) \quad (2.6)$$

El primer factor en esta expresión corresponde al movimiento rápido del electrón en la dirección del eje Z para diferentes posiciones en el plano XY , donde la altura del QR es h y se trata como un parámetro. El segundo factor describe los desplazamientos lentos que tienen lugar en el plano de crecimiento. La eigenfunción $f(z = h)$ y el eigenvalor más bajo $E_z(h)$ se obtienen como solución de la ecuación:

$$-\frac{d^2 f(z)}{dz^2} + V(z, h) f(z) = E_z(h) f(z) \quad (2.7)$$

La solución de esta ecuación se puede obtener de forma analítica, ya que corresponde al problema de una partícula confinada en un pozo de potencial rectangular infinito de ancho bajo $h(\rho, \varphi)$, donde la energía del estado base y la eigenfunción correspondiente serán funciones uniparamétricas de la altura h :

$$f_z(z, h) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \text{sen} \left(\frac{\pi z}{h(\rho, \varphi)} \right). \quad (2.8)$$

$$E_z(h) = \frac{\hbar\pi^2}{2m^*\hbar^2(\rho, \varphi)}. \quad (2.9)$$

La función $E_z(h)$ representa el potencial adiabático efectivo debido a la altura del anillo, con lo cual ahora la ecuación de Schrödinger que gobierna el movimiento lento del electrón en el plano XY queda reducida a una ecuación bidimensional así:

$$-\frac{\hbar^2\nabla^2\psi(\rho, \varphi)}{2m^*} + \frac{i\hbar eB}{2m^*} \frac{\partial\psi(\rho, \varphi)}{\partial\varphi} + \left[\frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m^*} + e\vec{F} \cdot \vec{r} - V_c + E_z(h) \right] \psi(\rho, \varphi) = E\psi(\rho, \varphi) \quad (2.10)$$

Como nuestro anillo presenta una variación de altura la fuerza de atracción de Coulomb entre el electrón y la donadora está dada a través de un potencial de Coulomb efectivo V_c en el plano XY , el cual hemos calculado como:

$$V_c(\rho, \varphi) = \int_0^{h(\rho, \varphi)} \frac{\alpha_i e^2 f_z^2(z_i, h) dz}{4\pi\epsilon\sqrt{\rho^2 + \rho_i^2 - 2\rho\rho_i \cos(\varphi - \varphi_i)}}, \quad (2.11)$$

Este es el potencial electrostático efectivo que “siente” el electrón de parte de la impureza, al tener en cuenta el efecto de las variaciones de altura del anillo, para cualquier posición en el plano YX .

2.2.2- Método de Elementos Finitos (FE)

Después de haber reducido nuestro problema tridimensional a uno bidimensional mediante la aproximación adiabática, nos encontramos con que esta ecuación diferencial (ecuación 2.10)

tampoco es separable. Por tal motivo debemos recurrir a alguna técnica numérica para hallar su correspondiente solución. Dentro del amplio espectro de métodos numéricos de solución aplicados en mecánica cuántica, nos hemos decidido por el método de elementos finitos, ya que tal método ofrece grandes ventajas sobre otros métodos tradicionales. Dentro de las ventajas más relevantes que hemos tenido en consideración al momento de elegirlo están: alta precisión, obtención de las funciones de onda y valores de energía del estado base y estados excitados, fácil adaptabilidad a cualquier geometría y a cualquier escenario bajo la presencia de campos externos, bajo costo computacional para problemas en 2 dimensiones.

El método de elementos finitos se basa en una discretización del dominio del problema mediante una división en subdominios llamados elementos, los cuales pueden presentar diferentes geometrías. Para nuestro problema hemos utilizado elementos de forma triangular. La discretización se da por medio una cantidad de puntos llamado nodos, y un conjunto de estos nodos es lo que se denomina malla. Las funciones propias que satisfacen el problema de Sturm-Liouville se proponen como funciones de interpolación entre los nodos del mallado, las cuales pueden tener diferente grado y forma. En nuestro caso hemos trabajado con polinomios de Lagrange de orden tres. De esta manera el problema se transforma en un sistema de N ecuaciones algebraicas con N incógnitas (Darrell, Pepper, & Heinrich, *sf*), cuyas dimensiones dependerán del número de nodos que compongan la malla.

En términos generales, las ventajas de este método son:

- Eficiencia numérica: la discretización del dominio de cálculo con elementos finitos produce matrices que en la mayoría de los casos son dispersas y simétricas. Por lo tanto, la matriz del sistema, que se obtiene después de la discretización espacial y temporal, también es dispersa y

simétrica. Tanto el almacenamiento de la matriz del sistema como la solución del sistema algebraico de ecuaciones se pueden realizar de una manera muy eficiente.

- Tratamiento de no linealidades: el modelado del comportamiento de materiales no lineales está bien establecido para el método FE (por ejemplo, curvas no lineales, histéresis).
- Geometría compleja: Mediante el uso del método FE, cualquier dominio complejo puede ser discretizado por elementos triangulares en 2D y por tetraedros en 3D.
- Posibilidades de análisis: el método FE es adecuado para análisis estático, transitorio, armónico y de frecuencia propia (Manfred Kaltenbacher, s.f.).

2.2.3 Uso del Método (FE) en el Software Comsol

Para hallar la solución de nuestro problema mediante el método de elementos finitos hemos empleado la herramienta COMSOL Multiphysics (2018). A continuación, se describen las diferentes etapas del post-procesamiento que se llevó a cabo en COMSOL para calcular las propiedades electrónicas del sistema en cuestión.

1. Se definieron los diferentes parámetros físicos, ya sean geométricos como las dimensiones del sistema, o ya sean composicionales como la masa efectiva o la permitividad de los materiales.
2. Se definió la geometría del dominio y las condiciones de frontera.
3. Se llevó la ecuación de Schrödinger que describe el sistema a la forma de la ecuación diferencial parcial que COMSOL trae por defecto, la cual presenta la siguiente forma:

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + au = f \quad (2.12)$$

Pero nuestro problema es una ecuación diferencial con valores propios, por tanto, es necesario realizar un cambio de variable con valores propios, asumiendo que nuestras variables dependientes varían con el tiempo, se tiene.

$$u(t) = u_0 e^{-\lambda t} \tag{2.13}$$

Donde u_0 es la amplitud compleja y λ el valores propios, si derivamos y reemplazamos en la ecuación (2,12), se tiene

$$\lambda^2 e_a u - \lambda d_a u + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f \tag{2.14}$$

Para el caso de nuestro modelo, los coeficientes de esta ecuación diferencial toman la siguiente forma:

$e_a = 0$	$d_a = 1$	$c = \hbar^2 / 2m^*$	$\beta = e i \hbar B / 2m^* [-y, x]$
$\alpha = [0, 0]$	$\gamma = [0, 0]$	$f = 0$	$a = e^2 B^2 / 8m^* (x^2 + y^2) + e F x + E_z + V_c$

4. Se calculó el valor de la energía para los 15 estados más bajos, junto con el grafico de las respectivas densidades electrónicas proyectadas sobre el plano XY, considerando los 2 modelos y la presencia y ausencia de la impureza.

5. Para obtener la dependencia de los niveles de energía, en función de los campos externos aplicados, se realizó un barrido paramétrico de los 15 niveles de energía más bajos en función de la intensidad del campo magnético y la intensidad del campo eléctrico.

De las tablas obtenidas en el ítem anterior para energía versus campo eléctrico, mediante un procedimiento de derivación numérica, realizado con la herramienta computacional Origin, se obtuvo la polarización y la polarizabilidad eléctrica según las ecuaciones 1.20 y 1.21.

3. Resultados y Discusión

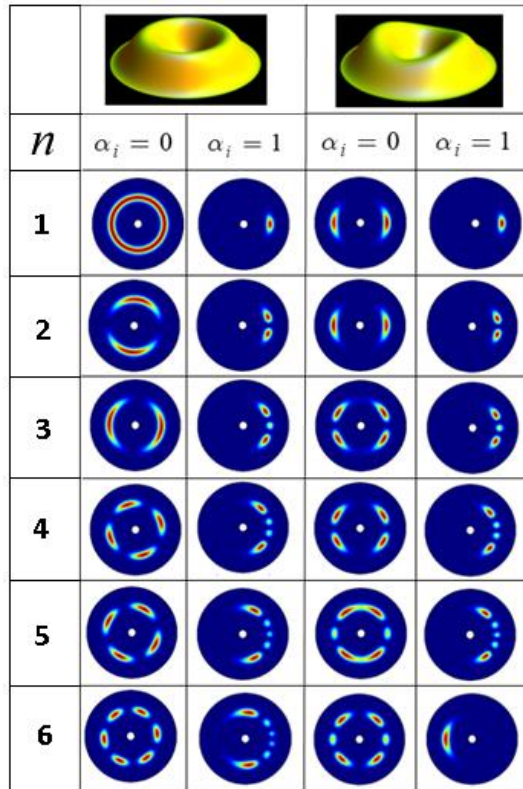
Todos los resultados mostrados a continuación corresponden a los dos modelos de anillo presentados en la figura 11, con los siguientes valores para los parámetros geométricos comunes: $R_e = 35\text{ nm}$, $R_i = 3\text{ nm}$, $h_0 = 2\text{ nm}$, y $\Delta h = 0.02\text{ nm}$ para el caso del modelo 2, el cual presenta variaciones de altura respecto al ángulo acimutal. Según lo anterior, se tiene que nuestro modelo se ajusta geoméricamente bastante bien a los QRs crecidos mediante autoensamblado, ya que está lejos de ser un QR delgado y además incluye variaciones de altura. La impureza se considerará descentrada y localizada sobre el eje X en la posición $\mathbf{r}_i = (19, 0, 0)\text{ nm}$. De otra parte, con el objeto de comprender mejor el efecto que tiene la presencia del núcleo positivamente cargado de la impureza donadora neutra sobre las propiedades a estudiar, se presentan también resultados para el caso del anillo con solo el electrón confinado, los cuales servirán como punto de referencia para nuestro análisis.

3.1 Efecto del Confinamiento Estructural y Coulombiano

Para analizar el efecto de diferentes factores, tales como la no uniformidad en la altura y la presencia de una impureza positivamente cargada, sobre las propiedades electrónicas de QRs, en

la figura 13 se muestran las proyecciones de las densidades electrónicas sobre el plano XY para los primeros 6 estados, ordenados de arriba hacia abajo, correspondientes a los dos modelos de QR y considerando los casos sin ($\alpha_i = 0$) y con impureza ($\alpha_i = 1$). Para el caso del modelo 1 (izquierda), se tiene que la densidad electrónica en ausencia de impureza ($\alpha_i = 0$) es la esperada para un QR uniforme, pero un rasgo a destacar es que a pesar de nuestro sistema ser bastante ancho en la base $w = 32\text{nm}$, la densidad electrónica en dirección radial se concentra en una región estrecha de aproximadamente unos 7 nm de ancho. Lo anterior se debe a que nuestro modelo se hace más estrecho hacia la parte superior, dada la forma de la ecuación (33), y este fuerte confinamiento radial influye notablemente sobre la densidad electrónica en dirección radial debido a que la altura del QR es mucho menor que el ancho. En los gráficos de la segunda columna se aprecia como la presencia de la impureza modifica completamente la distribución electrónica del caso anterior. El potencial Coulombiano rompe la simetría rotacional de la estructura y hace que la densidad electrónica pase de ser extendida a lo largo del QR a estar localizada en la vecindad de la impureza. Se observa además como los estados alternan entre par e impar, y como los estados superiores muestran un carácter más extendido que los inferiores dado que son más energéticos y pueden por tanto sustraerse en mayor medida del efecto atractivo de la impureza.

Figura 11. Proyecciones de las Densidades Electrónicas de los Primeros 6 Estados sobre el Plano XY (ordenadas de arriba abajo) para los Dos Modelos, y Considerando la Presencia ($\alpha_i = 1$) o Ausencia de Impureza ($\alpha_i = 0$).



En relación con el modelo 2 (derecha) tenemos para el caso del electrón solitario, la densidad toma una distribución con simetría C_2^4 dado que la estructura ahora presenta 2 máximos idénticos en su altura, localizados uno exactamente frente al otro. Es muy interesante notar que estos orbitales tienen propiedades de orbitales moleculares, pues se aprecia en ellos su carácter enlazante y anti-enlazante en forma alternante, de manera análoga a un ion molecular de hidrogeno H_2^+ (Eoin P.O'Reilly, sf). Por último, para este mismo modelo se consideró la presencia de la

⁴ Los pares de estados 1 y 2; 3 y 4, del modelo 2 y sin impureza. Presentan una densidad electrónica análoga a la simetría molecular con eje de rotación de orden C_2 .

impureza y se observaron efectos similares a los observados en el primer modelo, salvo que ahora la localización alrededor de la impureza es un poco más fuerte en los primeros 5 estados, dado que uno de los máximos en la altura del QR coincide con la posición de la impureza, por lo que se tiene una superposición de dos pozos de potencial, el del confinamiento estructural y el del Coulombiano. Por otro lado, una peculiaridad aparece en este caso para el estado 6, ya que la densidad electrónica se concentra completamente en la posición opuesta a la de la impureza⁵, lo cual se debe a que en dicha posición se tiene el otro pozo de potencia debido al confinamiento estructural, comportándose de esta manera nuestro sistema como un pozo doble asimétrico.

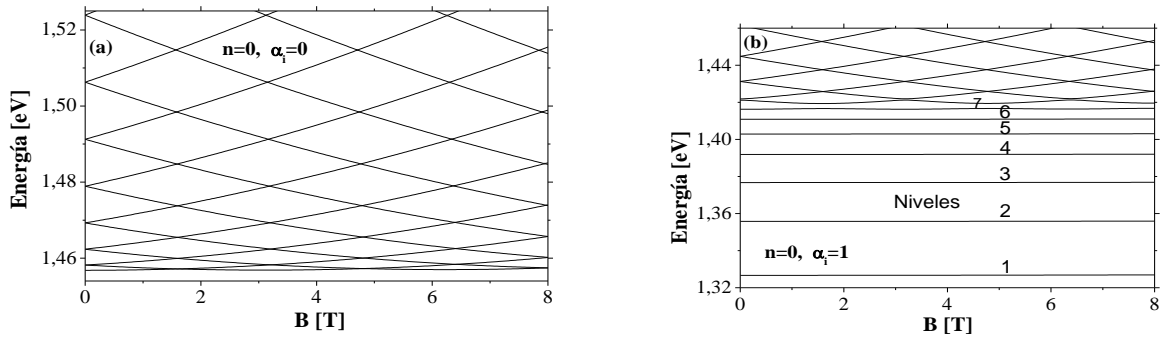
3.2 Efecto del Campo Magnético

En la figura 14 se muestra la dependencia de los niveles de energía más bajos respecto a la intensidad de un campo magnético uniforme aplicado en la dirección de crecimiento para el QR de altura uniforme correspondiente al modelo 1. En primer lugar se aprecia como, en ausencia de impureza (figura 10a), se obtienen las bien conocidas OAB (oscilaciones de Aharonov-Bohm) en la energía del estado base. Si bien nuestro QR es ancho en su base, el comportamiento del espectro se asemeja al de un QR unidimensional, lo cual indica el fuerte efecto de confinamiento en dirección radial que presenta nuestro perfil transversal, el cual se hace bastante estrecho en la región del máximo. En este sentido, el movimiento del electrón será a lo largo de una región anular delgada alrededor de la línea central $\rho_c = 0.5(R_e + R_i) = 19\text{nm}$. Cuando se tiene en cuenta el efecto de la impureza (figura 10b), se aprecia como la fuerte localización de los estados alrededor de la impureza anula las OAB en los 7 niveles más bajos y los hace casi insensibles al campo magnético.

⁵ En la figura 11, la impureza se encuentra en el estado $n=6$, primero de derecha a izquierda.

Esto pone de manifiesto el fuerte efecto localizador del potencial Coulombiano introducido por la impureza.

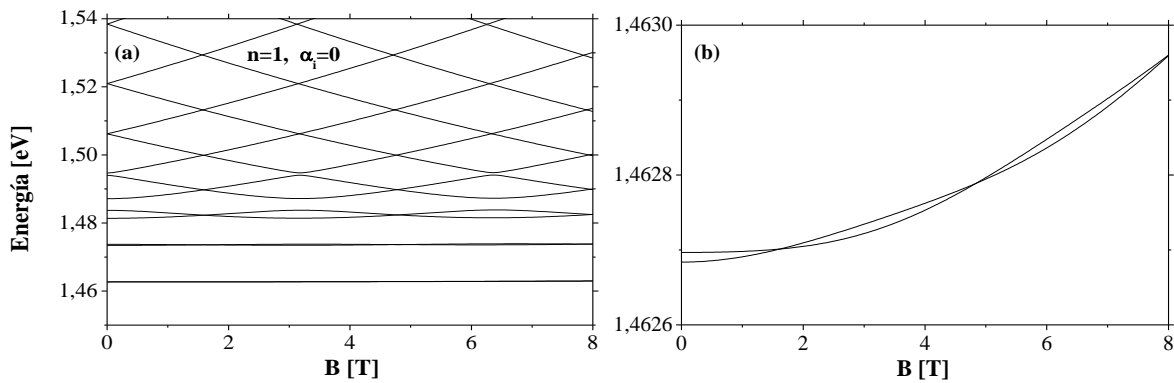
Figura 12. Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos respecto a la Intensidad de Campo Magnético para el QR del Modelo 1, a) sin Impureza y b) con Impureza.



Para el caso del electrón confinado en el QR con variaciones de altura respecto al ángulo acimutal, esto es el modelo 2, se obtuvo el espectro mostrado en la figura 13. En este caso, la característica más notable es el hecho de tener en los estados más bajos, parejas de niveles trenzados entre si, los cuales se hallan tan juntos que parecen degenerados. En la figura 13b se hace una ampliación del primer par de niveles, y se puede apreciar como forman una trenza que crece lentamente con la intensidad del campo magnético, tal como se espera que suceda para QRs de ancho finito, pues el efecto de confinamiento central que aporta el término diamagnético produce un incremento en la energía con una dependencia parabólica respecto a la intensidad del campo magnético aplicado. Estas trenzas que aparecen entre pares de niveles se deben a la simetría C_2 que presenta la estructura, ya que en su recorrido a lo largo del QR, el electrón se encuentra con un par de pozos debido al potencial estructural y puede llegar a completar una vuelta mediante el tunelamiento cuántico a través de la barrera que separa dichos pozos.

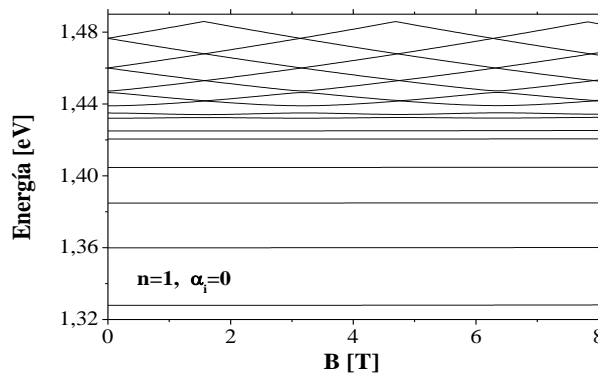
Por otra parte, estos graficos tambien revelan como una pequeña variación en la altura de la estructura, en este caso del 1%, (tenemos que $h_0 = 2\text{ nm}$ y $\Delta h = 0.02\text{ nm}$), generan un cambio importante en el espectro de energía, respecto al caso del anillo de altura uniforme. Esta pequeña variación en la altura del anillo, desde el punto de vista energetico, se traduce en la presencia de dos pozos de potencial identicos, los cuales tendran una profundidad de 0.08 eV y son los responsables de la formación de las trenzas de dos niveles y del desacople de los 6 niveles más bajos del resto del espectro, pues los estados superiores tendran energía suficiente para estar fuera de los pozos y tendran por tanto un carácter extendido en la dirección acimutal, tal como sucede para el caso de un anillo de altura uniforme.

Figura 13. a) Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos Respecto a la Intensidad de Campo Magnético para el QR del Modelo 2 sin Impureza, b) Amplificación para los Primeros 2 Niveles.



En la figura 16 se tiene el mismo caso anterior pero incluyendo el efecto de la impureza. A primera vista se observa la desaparición de los pares de niveles trenzados, pues la impureza descentrada ⁶rompe la simetría C_2 que tiene la estructura y genera una fuerte localización de los estados más bajos al rededor de ella. Al contrastar este grafico con el caso del QR uniforme con presencia de impureza (fig. 14), se observa una gran similitud, lo que pone de manifiesto el carácter dominante del potencial Coulombiano del núcleo de la impureza sobre el potencial estructural que produce la no uniformidad en la altura, para nuestro caso de estudio, en el cual la variación en la altura no supera el 1%.

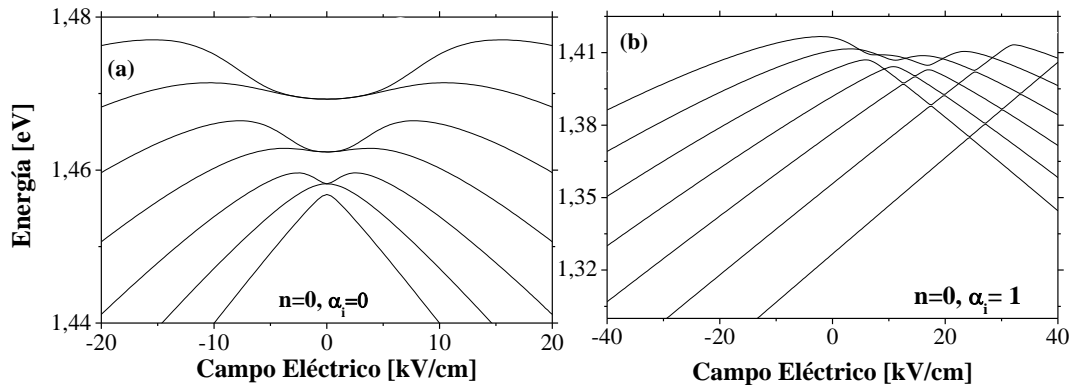
Figura 14. Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos Respecto a la Intensidad de Campo Magnético para el QR del Modelo 2 con Impureza.



⁶ La impureza se considera descentrada y localizada en el eje X en la posición $\vec{r}_i = (19, 0, 0) nm$.

3.3 Efecto del campo eléctrico

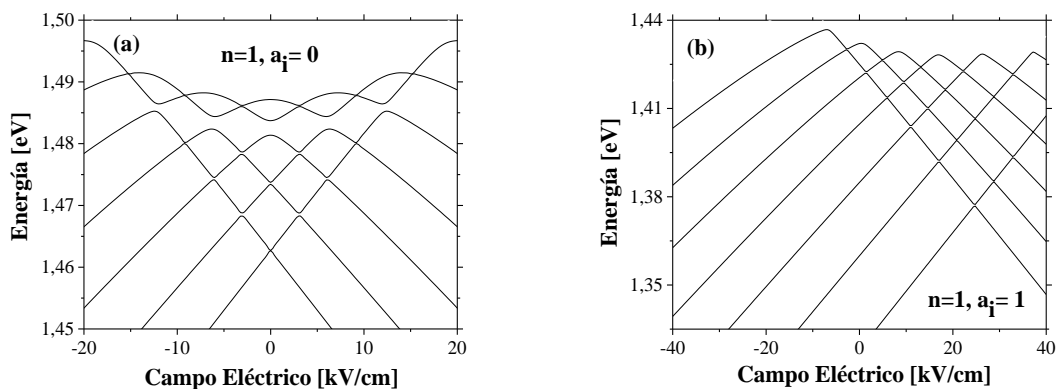
Figura 15. Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos Respecto a la Intensidad de Campo Eléctrico para el QR del Modelo 1, a) sin Impureza y b) con Impureza.



En el grafico 15a se muestra la dependencia de los niveles más bajos del espectro electrónico respecto a la intensidad de un campo eléctrico uniforme aplicado en la dirección del eje x (valores positivos) para el caso del QR de altura uniforme. Las curvas muestran una simetría especular respecto al eje vertical que corresponde con la simetría que tiene la estructura respecto al plano normal al eje x , esto es el plano yz , ya que en este caso es indistinto aplicar el campo en dirección positiva o negativa del eje x . De otra parte, también se aprecia un desacople de cada nivel de energía en dos niveles, con excepción del estado base (Efecto Stark), esto debido a que la doble degeneración de cada estado excitado respecto al número cuántico orbital es destruida por la presencia del campo eléctrico que rompe la simetría rotacional del electrón. Es evidente como este desacople requiere campos más intensos para niveles superiores, pues en estos estados la partícula tiene mayor energía cinética y por tanto se requiere un mayor campo eléctrico para impedir su rotación acimutal. A medida que el campo se incrementa, el desacople entre el par de niveles, antes

degenerados, se hace mayor, hasta que los dos niveles se tornan casi lineales y paralelos entre sí, dejando al descubierto el completo dominio del potencial eléctrico sobre el potencial de confinamiento estructural. En el grafico 16b se muestra lo que ocurre cuando al sistema anterior se le añade un ión positivo inmóvil localizado sobre el eje x , a 19nm del centro del QR. Lo primero que salta a la vista es el descenso en las energías y la ruptura en la simetría especular que ocasiona la presencia de este potencial Coulombiano atractivo. En este caso no se observa un desacople en los niveles correspondientes a estados excitados ya que la presencia de la impureza ha roto la simetría rotacional. Si seguimos el estado base se observa como cuando se alcanza un valor de campo eléctrico alrededor de los 25 Kv/cm, este nivel sufre un cambio brusco en la pendiente lo cual está relacionado con un salto en la posición del electrón desde la vecindad del núcleo de la impureza hacia el extremo opuesto (parte negativa del eje x) debido a la interacción del electrón con el campo eléctrico aplicado. Para los estados excitados se aprecia un mayor número de cruces entre niveles y un comportamiento no lineal en estos dado que en estos estados el electrón posee mayor energía cinética que le hace contrapeso al efecto del campo eléctrico externo.

Figura 16. Dependencia de los Niveles de Energía más Bajos respecto a la Intensidad de Campo Eléctrico para el QR del Modelo 2, a) Sin Impureza y b) Con Impureza.

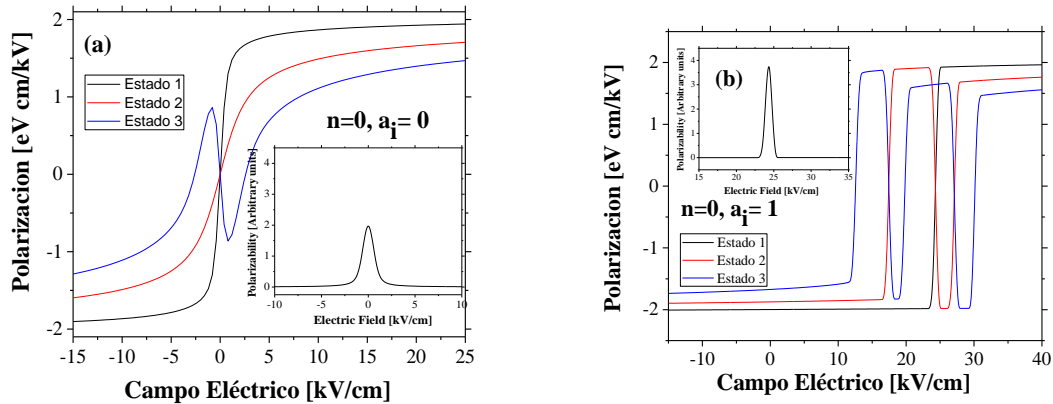


Ahora consideraremos el caso del QR con altura variable (modelo 2) bajo el efecto del campo eléctrico uniforme, aplicado de igual manera que para el modelo 1, esto es en dirección del eje x . En la figura 18a se muestran las curvas para el caso sin impureza, esto es solo para el electrón. En este caso los niveles de energía muestran un comportamiento simétrico respecto al eje vertical debido a la simetría $C2$ que posee el QR, y también se aprecia como en ausencia del campo eléctrico, el espectro está estructurado en parejas de niveles muy cercanos, correspondientes a un estado enlazante y otro anti-enlazante, debido al sistema de doble pozo que se forma por los dos máximos en la altura que posee la estructura. La intervención del campo eléctrico incrementa la separación entre el par de niveles, haciendo que los niveles correspondientes a estados enlazantes decrezcan, mientras que los correspondientes a estados anti-enlazantes crezcan de manera cuasi-lineal. Este comportamiento trae como consecuencia la aparición de cruces entre niveles, aunque también se observa la aparición de anti-cruces como es natural en sistemas de doble pozo.

Para estudiar lo que ocurre cuando al sistema anterior se le añade un ión positivo inmóvil localizado sobre el eje x , a 19nm del centro del QR, se presenta el gráfico 16b. En este caso, a semejanza de lo que ocurrió para el QR uniforme, la presencia de este potencial Coulombiano atractivo produce la ruptura de la simetría especular en la estructura, lo que ocasiona la pérdida de la simetría en el espectro de energía. Una diferencia notable en este caso, entre los modelos 1 y 2, es el comportamiento casi lineal que se observa para el modelo 2 en cuanto a la dependencia de los niveles de energía respecto a la intensidad del campo eléctrico, lo cual es producto de la mayor localización que experimenta el electrón en este modelo debido al doble efecto localizador que se tiene, por la superposición del potencial Coulombiano y del doble pozo generado por el potencial estructural.

3.4 Polarización y Polarizabilidad Eléctrica

Figura 17. Dependencia de la Polarización con el Campo Eléctrico de los 3 Primeros estados para el QR con Altura Uniforme, a) sin Impureza y b) con Impureza



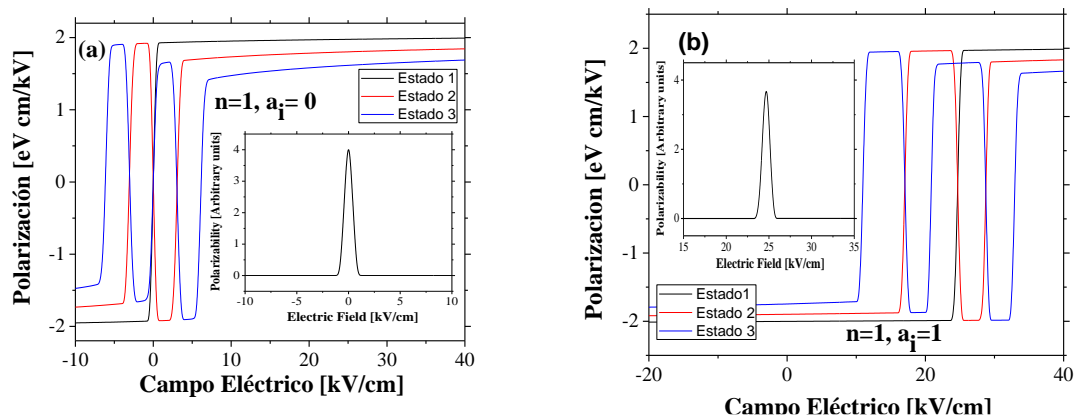
Dado que la polarizabilidad constituye una de las propiedades más importantes en cuanto al estudio de sistemas nanoestructurados, no solo porque nos brinda información sobre sus propiedades eléctricas, sino porque nos permite extraer información sobre sus propiedades ópticas, en los gráficos que componen la figura 17 se exhibe la dependencia de la polarización o el momento dipolar eléctrico, correspondiente a los tres primeros niveles, respecto a la intensidad de un campo eléctrico uniforme aplicado en la dirección del eje x . Estos cálculos se han realizado para el caso de temperatura cero, aplicando las ecuaciones (1.20) y (1.21), las cuales permiten obtener el momento dipolar eléctrico y la polarizabilidad eléctrica una vez se ha calculado la energía del estado base del sistema en función del campo eléctrico aplicado. La línea negra corresponde a la polarización del estado base, la roja a la polarización del primer estado excitado y la azul a la del segundo estado excitado. Se han considerado cuatro casos: la figura 17a corresponde al QR del modelo 1 sin impureza, la figura 17b al mismo modelo con impureza, la

figura 18a al modelo 2 sin impureza y la figura 18b al modelo 2 con impureza. Al analizar las curvas de polarización para los tres estados considerados, se llega a que la polarización asociada al estado base es la que presenta, en todos los casos, el cambio más abrupto ante la variación del campo eléctrico y exhibe el comportamiento típico de una transición de fase. Lo anterior se debe al mayor efecto deslocalizador que tiene el campo eléctrico sobre el electrón en el estado de menor energía, mientras en estados superiores, la mayor energía cinética que posee el portador hace menos notable la acción del campo eléctrico sobre este último. Por otro lado, se observa como al aumentar el campo eléctrico, los tres estados tienden a una polarización máxima de $2 \text{ eVcm} / \text{kV}$ esto se debe a que la localización del electrón está restringida por la morfología del QR. Para poder determinar con más detalle el grado de sensibilidad a polarizarse presente en los tres casos de estudio, hemos incluido en cada caso la polarizabilidad eléctrica del estado base respecto al campo eléctrico aplicado, cuyos gráficos se han insertado dentro de los gráficos correspondientes a cada caso. Al comparar los gráficos insertados de las figuras 17a y 17b se aprecia como la polarizabilidad se incrementa casi en dos veces en el modelo 1 cuando se tiene impureza, respecto al caso sin impureza. Esto es evidente, pues la aplicación del campo eléctrico lleva a que el electrón y la impureza se localicen en posiciones opuestas dentro del QR, lo cual produce un momento dipolar de gran valor.

Por otro lado, en el gráfico 18a se observa como para el modelo 2 sin impureza, se tiene también un comportamiento en forma de pico con el doble de amplitud respecto al obtenido para el modelo 1 (Fig. 17a). Por último, el gráfico 18b corresponde a la situación del modelo 2 con la presencia de la impureza ubicada justo debajo del máximo en la altura (derecha). En este gráfico podemos apreciar un comportamiento casi idéntico al mostrado para el caso del modelo 1 con impureza, de lo que podemos concluir que el efecto del potencial Coulombiano debido al núcleo

positivo de la impureza domina sobre el efecto localizador de la variación en la altura del QR. Nuestros resultados revelan como cambios abruptos en la distribución de carga, ya sean inducidos mediante la presencia de impurezas o la no uniformidad en la morfología, pueden conducir a un comportamiento resonante en la polarizabilidad de QRs respecto a campos eléctricos externos.

Figura 18. Dependencia de la Polarización con el Campo Eléctrico de los 3 Estados más bajos Para un QR de Altura Variable, (a) sin Impureza y (b) con Impureza.



4. Conclusiones

Los resultados obtenidos en este trabajo de investigación permitieron concluir que defectos de diferente naturaleza, ya sean de tipo estructural o por presencia de impurezas, en QRs semiconductores llevan a la formación de estados localizados en su vecindad, lo cual puede generar importantes cambios en sus propiedades. Para el caso de los defectos estructurales, nuestros resultados pusieron de manifiesto que variaciones de altura de solo el 1% ya son suficientes para

producir localización espacial de los portadores de carga. En relación con las propiedades magnéticas se tiene que la presencia de defectos lleva a la extinción de las OAB en la energía de los estados más bajos y por lo tanto la no aparición de corrientes persistentes. Respecto a las propiedades eléctricas se tiene que la presencia de estos defectos puede inducir la formación de momentos dipolares de gran valor con pequeñas variaciones en el campo eléctrico aplicado, lo cual se traduce en un comportamiento resonante en la polarizabilidad eléctrica. Este comportamiento abrupto en los momentos dipolares eléctricos será un aspecto que verá reflejado en las probabilidades de transición entre niveles y por tanto en las propiedades ópticas al momento de estudiar QRs.

Referencias Bibliográficas

- Aharonov, Y., & Bohm, D. (1959). *Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory*. *Phys. Rev.*, 115(3), pp. 485–491.
- Aierken, A.; Hakkarainen, T.; Riikonen, J. and Spooanen, M. (2008). *Nanotechnology* 19,245304
- ASHCROFT/ MERMIN. (sf). *Solid State Physics*. . Cornell University. Pág 643.
- Ashoori, R. (1996). *Electrons in artificial atoms*. . Nature 379, 413–419.
- Atkins, P. (sf). *Physical Chemistry*, 5. Oxford, 11th Edition. Página 58.
- Barseghyan, M.G.; Hakimyfard, A.; Zuhair, M.; Duque, C.A. and Kirakosyan, A.A. (2011). *Physica E* **44**, 419
- Betancur, F. J., Gutiérrez, W., Mikhailov, I. D., & Paredes, H. (2006). *Braz. J.Phys.* 36, 882.
- Bowick, M., & et.al. (1988). *Axionic black holes and an aharonov-bohm efect for strings*. *Physical Review Letters*, APS, v. 61, n. 25, p. 2823.
- Bruno-Alfonso, A. and Latgé, A. (2000). *Phys. Rev. B.* **61**, 15887
- Cen, J., Chen, R., & Baja, K. (1994). *Phys. Rev. B* 50, 10947.
- Chambers, R. (2009). *Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux*. *Physical Review Letters*, APS, v. 5, n. 1, p. 3, 1960, BATELAAN, H.; TONOMURA, A. *The aharonov-bohm efects: Variations on a subtle theme*. .
- Comsol Multiphysics. (2018). *Comsol Multiphysics*, v. 5.2a. COMSOL AB, Stockholm, Sweden.
- Darrell, W., Pepper, & Heinrich, J. C. (sf). *The Finite Element Method*. . Basic Concepts and Applications with Matlab , Maple, and Comsol. Third Edition.
- Eoin P.O'Reilly. (sf). *Quantum Theory of Solids*. Página 26.

- Escorcía, R., García, L., & Mikhailov, I. (2018). *Magnetoelectric effect in concentric quantum rings induced by shallow donor*. *Physica E*, 99, pp. 269–274.
- Feynman, R., Leighton, R., & Sands, M. (1979). *The Feynman lectures on physics, vol. 2: Mainly electromagnetism and matter*. [S.l.]: Addison-Wesley, .
- Fomin, V., Gladilin, V., van Bree, J., Flatté, M., Devreese, J., & Koenraad, P. (2018). *Self-organized Quantum Rings: Physical Characterization and Theoretical Modeling*. In: Fomin V. (eds) *Physics of Quantum Rings. NanoScience and Technology*. . Springer.
- García, J. M., Medeiros-Ribeiro, G., Schmidt, K., Ngo, T., Feng, J. L., Lorke, A., . . . Petroff, P. M. (1997). *Appl. Phys. Lett.* 71, 14.
- García, L. F.; Yu S.; Revinova; and Mikhailov, I. D. *Superlattices and Microstructures*. DOI: 10.1016/j.spmi.2016.12.059
- Gómez, C. A., Marín, J. H., Gutiérrez, W., & García, L. F. (2009). *Denergy spectrum in toroidal quantum ring*. . *J. Phys.: Conference Series*, 167(1), pp. 12032.
- Griffiths, D. J. (sf). *Introduction to Quantum Mechanics*, . Prentice Hall, 3rd ed, Capítulo 10, The Adiabatic Aproximation, pág. 323.
- Grundman, M., Stier, O., & Bimberg. (1995). *Phys. Rev. B* 52.
- Gutiérrez, W.; García, L. F. and Mikhailov, I. D. (2009). *Journal of Physics: Conference Series* 167, 012067
- Jasprit Singh. (s.f.). *Dispositivos Semiconductores. University of Michigan*. McGraw Hill. Pág. 26.
- Manfred Kaltenbacher. (s.f.). *Numerical Simulation of Mechatronic Sensors and Actuators, Finite Elements for Computational Multiphysics. Third Edition, Springer*. Obtenido de 10.1007/978-3-642-40170-1.2015

- Marín, J.H.; Gutiérrez, W.; Mikhailov, I.D. (2019). *Electrical instability of donor states in elongated quantum ring induced by external fields*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, Volume 111, Pages 98-102,
- Nishinaga, T., & Naritsuka, S. (2003). "*Epitaxial Growth of III-V Compounds*" (en inglés). En K. Byrappa, T. Ohachi, W. Michaeli, H. Warlimont, & E. Weber (Edits.), *Crystal Growth Technology* (págs. 55-92). . William Andrew Publishing.
- Nozik, A. (2002). *Quantum dot solar cells*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, Volume 14, Issues 1–2, Pages 115-120.
- Peshkin, M., & Tonomura, A. (sf). *Lecture Notes in Physics. The Aharonov-Bohm Effect*. Springer-Verlag.
- R-Fulla, M., Marín, J., Gutiérrez, W., Mora-Ramos, M., & Duque, C. (2014). *Superlattices and Microstructures* 67, 207.
- Rodríguez-Prada, F., García, L., & Mikhailov, I. (2014). *One-electron quantum ring of non-uniform thickness in magnetic field*. . Physica E 56, 393–399.
- Rodríguez-rada, F., García, L., & Mikhailov, I. (s.f.). Obtenido de doi.org/10.1016/j.physe.2013.10.016
- Stranski, I. N., & Krastanow, L. (1938). *Zur Theorie der orientierten Ausscheidung von Ionenkristallen aufeinander. Abhandlungen der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Klasse IIIb*. . Akademie der Wissenschaften Wien. 146: 797–810.
- Tomah, S., Qing, S., & Koichi, Y. (2016). "*Recent progress on quantum dot solar cells: a review*," . J. Photon. Energy 6(4) 040901.
- Vinasco, J., Radu, A., Tiutiunyk, A., Restrepo, R., Laroze, D., Feddi, E., . . . Duque, C. (2020). *Superlattices and Microstructures*. Volume 138, 106384.

Williams, J. (1989). *Metal Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) Perspectives and Prospects*. . Angewandte Chemie International Edition in English, 28(8), 1110–1120

Apéndices

Apéndice A. Hamiltoniano General

Representación del Hamiltoniano con la interacción de un campo magnético, campo eléctrico y su potencial (de Coulomb y confinamiento).

El Hamiltoniano es de la siguiente forma.

$$H = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + e\vec{F} \cdot \vec{r} + V_c(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon r} \quad (1)$$

Y su expansión es:

$$H = \frac{1}{2m^*} (\vec{p} \cdot \vec{p} + 2e\vec{p} \cdot \vec{A} + e^2 \vec{A} \cdot \vec{A}) + e\vec{F} \cdot \vec{r} + V(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon r},$$

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(p^2 + 2e\vec{p} \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{B}x\vec{r} \right) + e^2 \left(\frac{1}{2} \vec{B}x\vec{r} \right) \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{B}x\vec{r} \right) \right) + e\vec{F} \cdot \vec{r} + V(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon r} \quad (2)$$

se tiene los operadores físicos para el potencial magnético, momento lineal, el momento angular en la componente z, y el triple producto punto:

$$\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B}x\vec{r}; \quad \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}; \quad L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}; \quad \vec{A} \cdot (\vec{B}x\vec{C}) = \vec{C} \cdot (\vec{A}x\vec{B}) = \vec{B} \cdot (\vec{C}x\vec{A}) \quad (3)$$

Usando las ecuaciones (3) en (2) se tiene

$$\begin{aligned}
 p^2 &= \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right) \cdot \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right) = -\hbar^2 \nabla^2 \\
 \vec{p} \cdot (\vec{B} x \vec{r}) &= \vec{B} \cdot (\vec{r} x \vec{p}) = \vec{B} \cdot \vec{L} = B_z \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \\
 \left(\frac{1}{2} \vec{B} x \vec{r} \right) \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{B} x \vec{r} \right) &= \frac{1}{4} B^2 r^2 \text{Sen}^2 \varphi = \frac{B^2 \rho^2}{4}
 \end{aligned} \tag{4}$$

Se reemplaza (4) en (2) da el Hamiltoniano en forma general

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{ie\hbar B}{2m^*} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m^*} + e\vec{F} \cdot \vec{r} + V(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon r} \tag{5}$$

Apéndice B. Hamiltoniano Adimensional.

De la ecuación (5) se tiene en cuenta el campo magnético, el potencial de Coulomb y de confinamiento.

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{ie\hbar B}{2m^*} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m^*} + V(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon r} \quad (6)$$

Para tener el Hamiltoniano adimensional se tiene los siguientes cambios de variables:

$$R_y^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a_0^{*2}} = \frac{e^2}{\epsilon a_0^*}; \quad \gamma = \frac{e\hbar B}{2m^* R_y^*} \quad (7)$$

$$H = \tilde{H} R_y^*; \quad V = \tilde{V} R_y^*; \quad \Delta = \frac{\tilde{\Delta}}{a_0^{*2}}; \quad r = \tilde{r} a_0^*$$

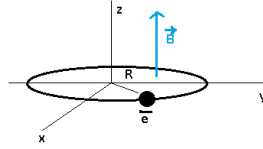
Al sustituir los términos de la ecuación (7) se tiene el Hamiltoniano en forma adimensional.

$$\tilde{H} = -\tilde{\nabla}^2 - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2}{4} \tilde{\rho}^2 + \tilde{V} - \frac{1}{\tilde{r}} \quad (8)$$

Para mejor uso del Hamiltoniano se puede escribir como:

$$H = -\nabla^2 - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2}{4} \rho^2 + V - \frac{1}{r} \quad (9)$$

Apéndice C. Modelo Simple de un Electrón en un Campo Magnético Externo.



Se tiene un electrón girando en forma circular sin carga en el centro y con campo magnético externo $\vec{B} = B(\hat{z})$, y radio constante.

Teniendo en cuenta la simetría del modelo, se usa el Laplaciano en coordenadas cilíndricas.

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (10)$$

Al aplicarlo al Hamiltoniano se llega a:

$$H = - \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2}{4} \rho^2 + V \quad (11)$$

Según las características de nuestro modelo simple, se tiene las siguientes condiciones

$$dr \rightarrow 0; dz \rightarrow 0; r \rightarrow R; \rho \rightarrow R; V(r) \rightarrow 0. \quad (12)$$

Llegando a la simplificación del Hamiltoniano en 1D y aplicándolo a la ecuación de Schrödinger se obtiene:

$$H_{1D} = -\frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 R^2}{4}; \quad H_{1D} \psi_{1D}(\varphi) = E \psi_{1D}(\varphi); \quad \psi_{1D}(\varphi) = e^{im\varphi} \quad (13)$$

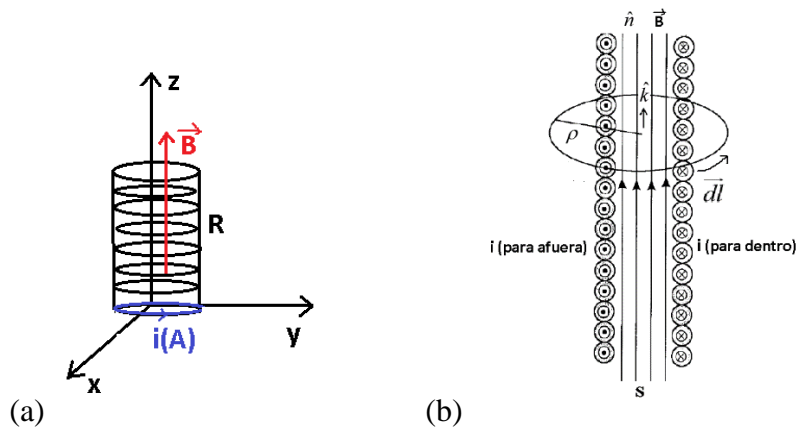
Como el modelo es simple, el electrón presenta simetría rotacional y su función $\psi_{1D}(\varphi)$ se reemplaza en la ecuación de Schrödinger. Teniendo una energía de:

$$E_m = \frac{m^2}{R^2} + \gamma m + \frac{\gamma^2 R^2}{4}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad E_0 = \frac{\gamma^2 R^2}{4}, \quad E_m = \frac{1}{R^2} + \gamma + \frac{\gamma^2 R^2}{4} \quad (14)$$

Apéndice D. Vector Potencial Magnético Producido por un Solenoide.

Se desea conocer el potencial magnético por fuera de un solenoide $\rho > R$, con una corriente $i(A)$, creando un campo magnético en la dirección del eje z $\vec{B} = n\mu_0 i(\hat{k})$.

Figura 1. Representación de la espira de radio R con una corriente i y dirección del campo magnético \vec{B} , (a) Solenoide en el eje z , (b) representación de los vectores en el solenoide



El campo magnético es igual a $\vec{B} = \nabla_x \vec{A}$. Aplicando la integral sobre el área de la superficie S , tenemos.

$$\int_S \vec{B} \cdot \hat{n} dA = \int_C (\nabla_x \vec{A}) \cdot \hat{n} dA \quad , \text{ y por el teorema de Stokes, se tiene: } \int_S \vec{B} \cdot \hat{n} dA = \int_C \vec{A} \cdot \hat{n} dl \quad , \text{ reemplazando}$$

el campo magnético y el diferencial de longitud de la superficie, la integral se reduce a:

$$\int_{\text{Solenoides}} n\mu_0 i (\hat{k} \cdot \hat{k}) dA = \int_0^{2\pi} (A\hat{\theta}) \cdot (\rho d\theta \hat{\theta})$$

$$n\mu_0 i \int_{\text{Solenoides}} dA = A\rho \int_0^{2\pi} d\theta$$

$$n\mu_0 i \pi R^2 = A\rho 2\pi$$

Con esto, se tiene el potencial magnético

$$A = \frac{n\mu_0 i R^2}{2\rho}$$

Y vectorialmente: $\vec{A} = \frac{n\mu_0 i R^2}{2\rho} \hat{\theta}$