

OSCILACIONES CUÁNTICAS EN LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE
UN NANOTUBO CÓNICO

ANA MILENA FORERO PINTO

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2017

OSCILACIONES CUÁNTICAS EN LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE
UN NANOTUBO CÓNICO

ANA MILENA FORERO PINTO

Proyecto de investigación presentado como requisito de grado
en el marco del programa de Física

Director

WILLIAN GUTIÉRREZ NIÑO
Doctor en Ciencias Naturales- Física

Co-Directores

DAVID ALEJANDRO MIRANDA MERCADO
Doctor en Química Aplicada
JOSÉ ROBERTO HERRERA IBAGOS
Físico

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2017

*A mi familia y aquellos que han marcado mi vida.
Porque la felicidad está en los pequeños detalles que
compartes con otros.*

Agradecimientos

La gente cambia, situaciones, personas y seres, son los que hacen el camino durante la breve experiencia que se llama vida. Por ello, he de agradecer a todo y a todos los que han estado presentes en mi vida, que han ayudado a la evolución de mi forma de pensar, que me han enseñado mis errores y ayudado a corregirlos.

Agradezco con mucho cariño a mi familia, a mis padres, a mis hermanos, a mi novio, a mis maestros, a mis compañeros y amigos. Los acontecimientos que ocurrieron durante el transcurso de la elaboración de este proyecto han sido de mucho significado, no sólo académico sino también personal; muchísimas gracias a mi director de tesis Willian Gutierrez por ser tan amable, paciente, guiarme en todo momento en la elaboración de este proyecto y tener charlas constructivas sobre el mundo; a mis co-directores: David Miranda por su generosidad, apoyo, por sus grandes ideas y aportes a mis conocimientos; y Jose Herrera por enseñarme cómo usar el software y responder a mis dudas sobre ello.

Finalmente, pero no menos importante, agradezco a “Dios” o a quien muchos llaman el creador; simplemente porque pienso que en esta vida, debe tener algún gran significado.

Índice general

1	Introducción	13
2	Detalles Teóricos	15
2.1	Nanoestructuras Semiconductoras	15
2.2	Nanotubos	17
2.3	Sistemas de pocas partículas en nanotubos	22
3	Modelo Matemático	24
3.1	Geometría del Sistema y parámetros estructurales	24
3.2	Ecuación de Schrödinger para un electrón en un nanotubo cónico con campos externos	26
3.3	Un electrón ligado a una superficie cónica	27
4	Modelado y Simulación	30
4.1	Acerca del Software	30
4.2	Método de elementos finitos	32
4.3	Validación del método y convergencia	34
5	Análisis de Resultados	37
5.1	Potencial debido a la curvatura	38
5.2	Modelo nanotubo cónico delgado	39
5.3	Modelo nanotubo cónico de espesor uniforme	51
5.4	Modelo nanotubo cónico de espesor no uniforme	52
6	Conclusiones	55
	Bibliografía	56

Índice de figuras

Figura 1	Pasos para la síntesis de nanotubos de <i>CdSe</i> vía electroquímica. Fuente: [1].	18
Figura 2	Imágenes tomadas por SEM y TEM de nanotubos de <i>CdSe</i> fabricados por: (a), (b) y (e) electrodeposición sobre plantillas de nanohilos de <i>ZnO</i> , y (c), (d) sonoelectroquímica. Fuente: [1-3].	20
Figura 3	Tipos de plantilla para un nanotubo cónico: a) nanoconos y b) nanoconos truncados. (c) nanotubos cónicos de PANI realizados por electropolimerización sin plantillas. Imágenes tomadas por SEM. Fuente: [4-6].	21
Figura 4	Parámetros geométricos del cono truncado. Representación tridimensional (Izquierda); sección transversal (Derecha)	25
Figura 5	Estructuras del <i>CdSe</i> : a) Hexagonal (Wurtzita), b) cúbica (zinc blenda) y c) cúbica ('Rock salt')	26
Figura 6	Densidad de probabilidad de los estados $Z_0(z), Z_1(z), Z_2(z)$ para $z_{max} = 4\rho$, con $\eta = 0, \lambda = 1$. Fuente: [7].	28
Figura 7	Elementos bidimensionales a) De primer orden o lineales y b) Cuadráticos o de segundo orden. Adaptado de: [8]	34
Figura 8	Comparación de los estados electrónicos de un QD circular, modelos 2D por Lent [9] (Izquierda) y modelo 2D axisimétrico en COMSOL. (Derecha)	35
Figura 9	Modelo y malla del nanotubo cónico realizado en COMSOL; a la derecha se muestra un aumento de la figura izquierda, donde la longitud máxima del elemento es $h=0.8$ [nm].	36
Figura 10	Potencial debido a la variación de la curvatura del nanotubo, para dos radios medios superiores: $R_t = 10$ [nm] (azul), $R_t = R_b/2$ (magenta).	38
Figura 11	Energías de un electrón en un nanotubo cónico delgado, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para cuatro valores de radio medio superior R_t .	41
Figura 12	Densidad de probabilidad electrónica del estado base para diferentes valores de radio medio superior R_t y campo magnético B.	43

Figura 13	Densidades de probabilidad electrónica de los primeros estados de tres valores de radio medio superior R_t , para campo magnético $B = 0[T]$.	45
Figura 14	Momento magnético dipolar M en función del campo magnético externo B para nanotubos con cuatro radios superiores R_t .	47
Figura 15	Energías de un electrón en un nanotubo cónico con radio superior $R_t = 10[nm]$, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para dos valores diferentes de campo eléctrico F en el mismo sentido de B a), b) y en sentido opuesto c), d).	48
Figura 16	Densidad de probabilidad para el estado más bajo y diferentes valores de radio superior R_t , campo magnético B y campo eléctrico F, para el nanotubo delgado.	50
Figura 17	Momento magnético dipolar M, de un nanotubo con $R_t = 10[nm]$, en función del campo magnético externo B para dos valores diferentes de campo eléctrico F en el mismo sentido de B a), b) y en sentido opuesto c), d).	51
Figura 18	Energías de un electrón en un nanotubo cónico de ancho uniforme w_t con radio superior $R_t = 0,5R_b$ en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para dos valores de ancho.	52
Figura 19	Energías de un electrón en un nanotubo cónico con $R_t = 0,5R_b$ y $w_t = 5[nm]$, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para dos valores de ancho de la base w_b .	53
Figura 20	Energías de un electrón en un nanotubo cónico con $w_t = 5[nm]$, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para valores diferentes de campo eléctrico F en sentido contrario de B. Con a) $w_b = 10[nm]$ y $R_t = 0,5R_b$, b) $w_b = 10[nm]$ y $R_t = 10[nm]$ y c), d) $w_b = 20[nm]$ y $R_t = 0,5R_b$.	54

Índice de cuadros

Cuadro 1	Refinamiento de malla para elementos Lagrangianos de segundo (I) y tercer orden (II); con parámetros del tubo $w_t = w_b = 5[nm]$ y $R_t = 0,5R_b$; para las intensidades de campo: (a) $B = 0[T]$, $E = 0[kV/cm]$ y (b) $B = 1,2[T]$ y $E = 0,1[kV/cm]$	36
----------	----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----

Resumen

TÍTULO: OSCILACIONES CUÁNTICAS EN LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE UN NANOTUBO CÓNICO *

AUTOR: ANA MILENA FORERO PINTO **

PALABRAS CLAVE: Nanotubo Cónico, CdSe, Espectro energético, Método de Elementos Finitos.

DESCRIPCIÓN:

En este trabajo de investigación se estudió el espectro energético de un electrón confinado en un nanotubo de CdSe en forma de cono truncado, sometido a campos magnético y eléctrico en dirección del eje de simetría. El sistema fue modelado utilizando la ecuación de Schrödinger estacionaria en coordenadas cilíndricas bajo el marco de la aproximación de masa efectiva, para la función de onda correspondiente a la parte transversal del cono $\chi(r, z)$; donde dicha ecuación fue solucionada utilizando el método de elementos finitos.

Se consideraron tres casos para el modelo: nanotubo cónico delgado, de espesor uniforme y no uniforme, para los cuales se estudió el comportamiento de la energía del electrón en función del campo magnético y para el caso de campo eléctrico simultáneo; se calculó el momento magnético dipolar y se mostraron gráficas de densidad de probabilidad.

Como resultado de la investigación, se observó una fuerte dependencia de las oscilaciones del estado base y el momento magnético dipolar con la morfología del sistema; además se mostró la posibilidad de una reestructuración de las propiedades magnéticas mediante la aplicación de campos eléctricos. De esta forma, este trabajo constituye una base para la construcción de nanotransistores controlados por campo magnético y el diseño de nuevos materiales con propiedades magnetoeléctricas.

*Trabajo de grado

**Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutiérrez Niño. Co-Directores: David Alejandro Miranda Mercado y José Roberto Herrera Ibagos.

Abstract

TITLE: QUANTUM OSCILLATIONS IN THE ELECTRONIC PROPERTIES OF A CONICAL NANOTUBE*

AUTHOR: ANA MILENA FORERO PINTO**

KEYWORDS: Conical Nanotube, CdSe, Energy Spectrum, Finite Element Method.

DESCRIPTION:

In this research work has been studied the energy spectrum of an electron confined in a truncated cone-shaped CdSe nanotube, in the presence of magnetic and electric fields in the symmetry axis direction. The system was modeled using the stationary Schrödinger equation in cylindrical coordinates under the effective mass approximation, for the wave function corresponding to the transverse part of the cone $\chi(r, z)$; and was solved using the finite element method.

Three cases were considered for the model: the thin conical nanotube, uniform and not uniform conical nanotube; for those, the behavior of the electron energy in function of the magnetic field and for the case of simultaneous electric field were studied; In addition, the magnetic dipole moment was calculated and graphics of probability density were shown.

The results revealed a strong dependence of the ground state oscillations and magnetic dipole moment with the morphology of the system; furthermore, the possibility of a restructuring of the magnetic properties through the application of electric fields was shown. In this way, this work constitutes a basis for the manufacture of nanotransistors controlled by a magnetic field and the design of new materials with magnetoelectric properties.

*Bachelor Thesis

**Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutiérrez Niño. Co-Directors: David Alejandro Miranda Mercado y José Roberto Herrera Ibagos.

Introducción

A través de la historia, el ser humano ha estado en contacto con sistemas nanoestructurados sin percatarse de ello, puesto que en la naturaleza siempre han existido un sinnúmero de ejemplos de estructuras de tamaños de unos cuantos nanómetros; es así que, actualmente con el conocimiento en este campo, se han simulado las propiedades de estas estructuras de la naturaleza para obtener objetos e instrumentos útiles en la vida del hombre, como es el caso de aquellas estructuras en las patas de los Geckos que se comportan como cintas adhesivas.

Entre algunos sistemas mesoscópicos conocidos actualmente se encuentran: las conchas de los abulones u orejas de mar, las cuales están formadas por la unión de pequeñas unidades nanoestructuradas de carbonato de calcio con un pegamento compuesto de proteínas y carbohidratos, que por su disposición permiten la absorción de energía de grandes impactos y constituyen un material macroscópico de gran dureza[10]; las alas de una mariposa, cuya superficie está compuesta por multicapas de estructuras nanométricas de aproximadamente el tamaño de la longitud de onda de la luz visible, y debido a las cuales se crean interferencias ópticas, siendo constructiva para la longitud de onda que da color a las alas y destructiva para las demás [11]; y por último, la hoja de Loto, en la que se observa el efecto de superhidrofobicidad y que lleva su nombre “Efecto loto”; este fenómeno ocurre debido a que la superficie de esta planta está compuesta por cúmulos de tamaño micrométrico adornados con pequeñas protuberancias en forma de rama, de dimensiones nanométricas y que reduce el área de contacto entre la superficie y una gota de líquido [12].

Por otra parte, se puede decir que los primeros materiales obtenidos usando nanotecnología fueron los vidrios opalescentes rojos y rojo rubí del antiguo Egipto y Roma, donde destaca, en el museo Británico de Londres, un utensilio romano llamado “copa de Licurgo”, hecho de vidrio de sosa y cal con nanopartículas de oro y plata, que pasa de ser color verde a rojo al introducirse una fuente luminosa en su interior; así mismo, más adelante, en la época medieval, también se observa el uso de nanopartículas metálicas en vidrio, para la construcción de vitrales en las catedrales europeas.[10]

En cuanto a lo anterior, sólo después de muchos siglos en el que se fabricaron vitrales y utensilios con nanopartículas, el físico y químico Michael Faraday en una publicación en la revista *Philosophical Transactions of the Royal Society* en el año 1857, trató de explicar cómo dichas partículas metálicas proporcionaban el color a los vitrales de las iglesias; así mismo, en 1908, el físico Gustav Mie, dió por primera vez una explicación de la dependencia de los colores de los vidrios con el tamaño y el tipo de metal de estas partículas. [10] Sin embargo, no fue sino hasta un poco después de la conferencia del físico Richard Feynman titulada “*There’s plenty of room at the bottom*”, donde expuso algunas de las consecuencias de medir y manipular materiales en la nanoescala e incluso átomos individuales, que a finales del siglo XX la nanociencia se consolidó como campo y hasta la fecha se ha realizado un mayor avance en el conocimiento de la física y química de lo mesoscópico; publicándose cada día, más trabajos sobre nanoestructuras, su síntesis y sus aplicaciones.

La presente investigación, pretende mostrar el comportamiento de un electrón ligado a un nanotubo en forma de cono truncado, donde se estudia su espectro energético y densidad de probabilidad, para variaciones estructurales y en presencia de campos eléctrico y magnético uniformes en dirección del eje de simetría. Así, éste se organiza de la siguiente forma: en el capítulo 2, se presentan algunos aspectos teóricos sobre nanoestructuras semiconductoras y sistemas unidimensionales, y en particular, se considera la síntesis experimental de nanotubos de Seleniuro de Cadmio; en el capítulo 3 se establecen los parámetros que describen a la nanoestructura, se describe la ecuación que modela a un electrón dentro del nanotubo y por último se realiza una revisión del estado del arte para el caso de un nanotubo truncado delgado, y en general para una partícula cuántica ligada a una superficie y que experimenta la acción de un campo magnético. Luego, en el capítulo 4, se da una breve descripción del software y del método numérico utilizado para resolver la ecuación diferencial planteada en el capítulo anterior, que describe el sistema considerado en esta investigación, además, se incluye una pequeña sección en la que se realiza una verificación del método y su convergencia. En el capítulo 5 se presentan los resultados de la investigación, donde primero se estudia el efecto sobre los estados energéticos del electrón, debido a la acción de un potencial geométrico relacionado con la curvatura de la superficie a la cual se encuentra ligado, para luego describir el comportamiento de esta partícula cuántica bajo campos eléctrico y magnético para 3 modificaciones estructurales del nanotubo. Finalmente, en el capítulo 6, se dan las conclusiones del trabajo.

Detalles Teóricos

En este capítulo, se tratarán algunos aspectos generales sobre las nanoestructuras semiconductoras y se enfatizará en las características y estudios que se han realizado con respecto a los nanotubos y sistemas afines.

2.1. Nanoestructuras Semiconductoras

Los materiales semiconductores desde su descubrimiento han sido ampliamente utilizados en la electrónica debido a que al estar en un punto intermedio entre los conductores y los aislantes, su conductividad puede ser cambiada fácilmente dependiendo bajo qué condiciones se encuentren, ya sea temperatura, presión, radiación o campos externos; además sus propiedades pueden ser mejoradas si se les añade un cierto tipo de impureza a lo cual se le denomina dopaje, o incluso si se disminuye su tamaño. Es así que durante la última mitad del siglo XX, en un afán de mejorar el rendimiento y disminuir el consumo de energía, hubo cierto interés en la miniaturización de los dispositivos semiconductores y como resultado de ello, éstos han ido evolucionando desde dispositivos de tamaño milimétrico como el transistor, hasta aquellos micrométricos como los diodos emisores de luz. [13, 14] Así mismo, desde la fabricación en 1998 del primer nanotransistor de efecto de campo basado en un nanotubo de carbono por el científico holandés Cees Dekker [15] y gracias al avance en las técnicas para sintetizar nanoestructuras; hoy en día se realizan muchos estudios teóricos y experimentales con miras en la creación de

2.1. NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

dispositivos nanométricos de diferentes materiales que tengan propiedades excepcionales y puedan contribuir al avance de la ciencia, la tecnología y por ende a la mejora de la calidad de vida del ser humano en general; donde aquellos dispositivos fabricados a base de semiconductores son ideales en el campo de la electrónica e inclusive poseen cierto potencial en el área de salud.

Al respecto, la nanoestructuración es actualmente el camino más propicio si se quiere lograr un control refinado de las propiedades de un material, pues la discretización de los niveles de energía de sus portadores de carga aparece como consecuencia de restringir el movimiento de estos a una región del espacio (por lo menos en alguna de las direcciones) que sea del tamaño de unos cuantos nanómetros, generalmente comparable con su longitud de onda de De Broglie[15, 16]; es decir, la estructura de bandas del material a escala mesoscópica difiere a la de su estado de bloque o “bulk”. Así, para este tipo de estructuras donde dominan los efectos cuánticos, se han encontrado diferentes fenómenos fundamentales como la cuantización de la conductancia, el efecto hall cuántico, el efecto Aharonov-Bohm y el efecto de bloqueo de Coulomb(QB). [13]

Las estructuras anteriormente mencionadas se clasifican dependiendo del número de grados de libertad en el momentum del portador de carga del material, es decir, existe una reducción de su movimiento a un cierto número de dimensiones (reducción de dimensionalidad), así:

- **Sistemas 2D:** El portador de carga en este sistema tiene dos grados de libertad, y por lo tanto confinamiento en una dirección, su espectro energético es una combinación discreta y continua, donde la parte discreta está relacionada con el movimiento rápido en la dirección del confinamiento. A este tipo de sistemas pertenecen las películas delgadas, estructuras MOS y heteroestructuras simples (donde en la interfaz se crea un gas bidimensional de electrones), pozos cuánticos (QW), superredes, capas delta (delta-layers) y superredes *nipi*. Además, entre los distintos dispositivos que se realizan utilizando este tipo de sistemas están: láseres de pozo cuántico, moduladores ópticos, estructuras *nipi* fotosensitivas, fotodiodos de avalancha, entre otros.[16]
- **Sistemas 1D:** Tienen dos direcciones de confinamiento, lo que equivale a que los portadores de carga posean un sólo grado de libertad y por consiguiente su espectro de energía sigue siendo una mezcla continua y discreta, es así que el confinamiento en estas estructuras da lugar a fenómenos de transporte interesantes como la cuantización de la conductancia. Entre ejemplos de estos sistemas se tienen los nanohilos (QWW), superredes en nanohilos, nanotubos (NT), nanocintas(NRb), nanobarras(Nanorods) e incluso uniones P-N de nanohilos, donde cada uno de ellos puede tener diferentes propiedades dependiendo de la forma y del material del que estén fabricados [2, 17–20]; por otro lado, son amplias las aplicaciones en las que se usan estos sistemas, como por ejemplo: biosensores en medicina, optimización de celdas solares y transistores a base de nanotubos en microelectrónica.[21, 22]

2.2. NANOTUBOS

- **Sistemas 0D:** También llamados puntos cuánticos (QDs) o átomos artificiales, son sistemas donde los portadores de carga están confinados en las tres direcciones espaciales (no tienen grados de libertad) y de ahí que su espectro energético sea completamente discreto. Los QDs semiconductores gozan de la propiedad de que al ir disminuyendo su tamaño, la brecha de energía y la separación entre el estado base y los excitados que aparecen en el borde de las bandas, aumentan; lo cual tiene como consecuencia un cambio en las propiedades ópticas de éstos como la luminiscencia, en donde para los QDs que emiten en el visible, como los de CdSe y CdTe, se observa una transición del color rojo al azul al ir disminuyendo su tamaño [23, 24]; lo anterior propicia la construcción de nuevos diodos emisores de luz (LED). En contraste, muchas aplicaciones se han encontrado a este tipo de sistemas, como los son los láseres de QDs, detectores infrarrojos, marcadores biológicos, entre otros.[14]

Para la síntesis de nanoestructuras, existen dos tipos de aproximaciones: *bottom-up* y *top-down*; la primera es una nueva tecnología introducida por la nanociencia basada en el fenómeno de *self-assembly*, donde los átomos, moléculas o cadena de moléculas, se auto ensamblan durante un proceso de crecimiento para formar nanoestructuras; a este tipo pertenece el método de epitaxia, que consiste en el crecimiento organizado de una sustancia durante el proceso de condensación (desde la fase líquida o desde la fase de vapor) sobre un sustrato, el cual comienza generalmente con la nucleación de islas sobre éste que luego se unen entre sí para formar una película continua; así, uno de los métodos de crecimiento epitaxial es la epitaxia de haces moleculares (MBE) que se basa en la interacción de varios haces moleculares con un sustrato monocristalino calentado. Entre otros métodos de síntesis *bottom-up* se encuentran: la electrodeposición, métodos sol-gel, dispersión ultrasónica, etc. [15, 25]

Por otro lado, en el método *top-down*, los sistemas mesoscópicos son obtenidos tallando las estructuras en bloque o construidos electrostáticamente mediante electrodos metálicos; la técnica más representativa es la llamada nanolitografía, que se basa en un conjunto de procesos físico-químicos de formación capa por capa de los elementos de las nanoestructuras y a la cual pertenecen: la fotolitografía, la litografía por haz de electrones, litografía por nanoesferas, litografía de rayos x, entre otros. En cuanto a costos, los métodos *top-down* son relativamente lentos y no tan adecuados para la producción a gran escala en comparación que los *bottom-up* cuya fabricación es menos costosa.[13–15, 25]

2.2. Nanotubos

Estos sistemas unidimensionales pueden presentar características interesantes no sólo por tener dos dimensiones reducidas a escala nanométrica, sino también debido al tipo de material fabricado y a su forma. Como tal, cuando se habla de nanotubos, muchos refieren sus trabajos a aquellos fabricados a partir del Carbono en su forma de grafeno o

2.2. NANOTUBOS

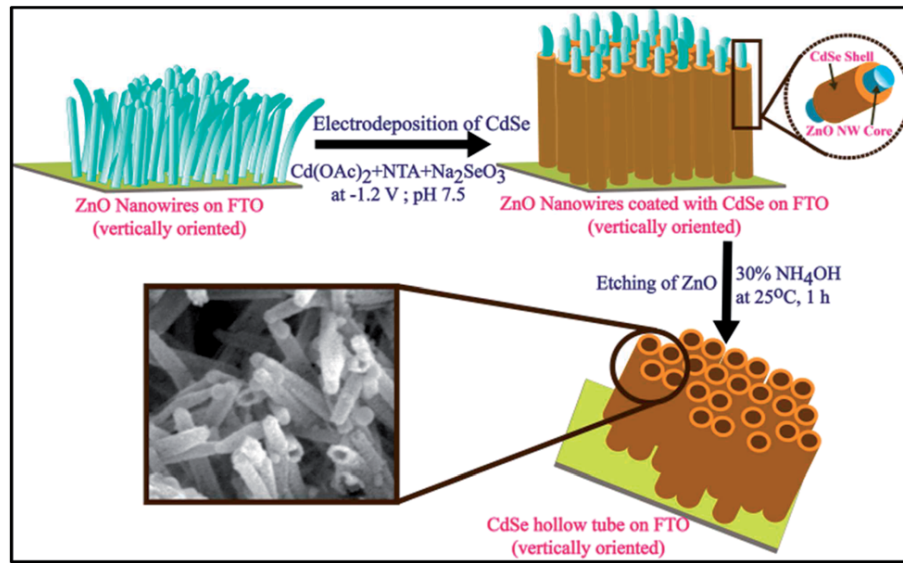


Figura 1. Pasos para la síntesis de nanotubos de *CdSe* vía electroquímica. Fuente: [1].

laminar; y es que los CNTs han gozado de especial interés durante la última década, tanto que actualmente se encuentra un gran volumen de trabajos teóricos y experimentales, lo que indica un basto conocimiento en sus propiedades.

Se puede pensar en un nanotubo de carbono como una lámina de grafito que es enrollada y unida en sus extremos por los enlaces que forma el elemento; sin embargo, su forma de fabricación puede distar un poco de esta imagen; por ejemplo, uno de los métodos de síntesis de esta nanoestructura se denomina evaporación láser y consiste en la aplicación de un haz láser sobre un blanco de grafito no puro (con catalizadores metálicos, generalmente Níquel y Cobalto) que se encuentra dentro de un tubo de cuarzo con Argón gaseoso y que son calentados por un horno a aproximadamente 1200°C ; el láser incrementa la temperatura del blanco más allá de la del horno y evapora el carbono, que por acción del Argón, se traslada de una zona de mayor temperatura a un colector de cobre enfriado con agua; produciendo principalmente nanotubos de una sola pared SWNT (single-wall nanotubes) con diámetros estrechos. Dentro de los otros métodos principales para la fabricación de estas estructuras, están los de deposición química de vapor y métodos de arco de carbono, donde para este último si no se utilizan catalizadores, el resultado son CNTs de pared múltiple (MWNT) o anidados uno dentro del otro. [10, 26]

Respecto a la formación de los CNTs, como resultado de los diferentes métodos de síntesis, se han propuesto modelos sobre el mecanismo de crecimiento de los SWNT y MWNT; Peter Harris en su trabajo “*Solid state growth mechanisms for carbon nanotubes*” [27] se refiere a la formación de estas estructuras no como un fenómeno de fase gaseosa, como se podría pensar observando a grandes rasgos los procesos de los métodos de fabricación y de los cuales varios modelos están basados, sino a uno que involucra una transformación de estado sólido; inclinándose por el modelo que describe la formación de éstas a partir

2.2. NANOTUBOS

de la nucleación del carbono en estructuras tipo fullereno, que luego se depositan sobre la superficie de partículas de metal y carbono, actuando así como “semillas” para el crecimiento de nanotubos; donde además la tasa de calentamiento influye en su formación, pues para calentamiento lento se ha observado la obtención de nanopartículas en vez de tubos, siendo éste en conclusión, un proceso cinético en lugar de termodinámico.

Gracias al conocimiento actual en las propiedades de los CNTs, como su buena conductividad térmica y eléctrica, propiedades ópticas sintonizables, resistencia y rigidez mecánica, se han encontrado diversas aplicaciones en diferentes campos, entre las cuales se pueden mencionar las celdas de combustible, sensores químicos, biosensores, sustratos flexibles, catalizadores, reforzamiento mecánico, entre otros. [10, 26]. A partir del éxito de la síntesis de nanotubos de carbono, aquellas estructuras tubulares realizadas con componentes inorgánicos como los semiconductores, comenzaron a recibir atención; donde el método más conocido para fabricar estas estructuras, de las cuales muchas de ellas no poseen forma laminar (como el seleniuro de Cadmio), es por medio de plantillas o moldes; sin embargo, se han producido también mediante otra técnica denominada sonoelectroquímica [3], que consiste en la aplicación de ultrasonido durante el proceso electroquímico; así, los resultados de este método se observan en la figura 2 c y d, donde se puede notar la diferencia de lo obtenido mediante moldes; no obstante, pese a que las estructuras no están alineadas ni son perfectamente tubulares, sino poseen cierto enrollamiento sobre sí, a su favor juega el hecho de la obtención de nanotubos de CdSe no policristalinos.

A continuación, se describe a grandes rasgos la síntesis de nanotubos de CdSe realizada por Debgupta et al. [1] (ver fig. 1). Primero, se sintetiza un arreglo de nanohilos de ZnO sobre un sustrato de vidrio recubierto con una película de Óxido de Estaño dopado con Flúor (FTO coated glass), depositando partículas de ZnO sobre éste, que luego es sumergido en una solución con ciertos químicos y posteriormente es sometido a tratamientos térmicos. Ya obtenidos los nanohilos, se electrodepositan nanopartículas de CdSe sobre estos, usando un sistema de tres electrodos: uno de referencia de Hg/HgO, un contraelectrodo o electrodo auxiliar de platino y un electrodo de trabajo que corresponde al sustrato de FTO con los nanohilos de ZnO; después, se remueven los nanohilos por medio de un baño químico, para finalmente obtener un arreglo como en se observa en la figura 2a, con nanotubos de superficie granular compuesta por nanopartículas de CdSe de tamaños entre 8 y 10 nm unidas por fuertes fuerzas cohesivas, como se puede ver en la figura 2b; la altura de los nanotubos resultantes es de $\sim 2,5\mu m$ y su punta tiene entre 40 y 50 nm de diámetro. Así mismo, esta investigación incluye la síntesis por aparte, de una película de Cu_2O electrodepositada sobre un sustrato de FTO, que luego es puesta en contacto con los NTs de CdSe, construyendo así un diodo p-n que por sus características, mostradas en los experimentos realizados por los autores, resulta ser un candidato prometedor para la preparación de celdas solares, fotodetectores y dispositivos optoelectrónicos.

2.2. NANOTUBOS

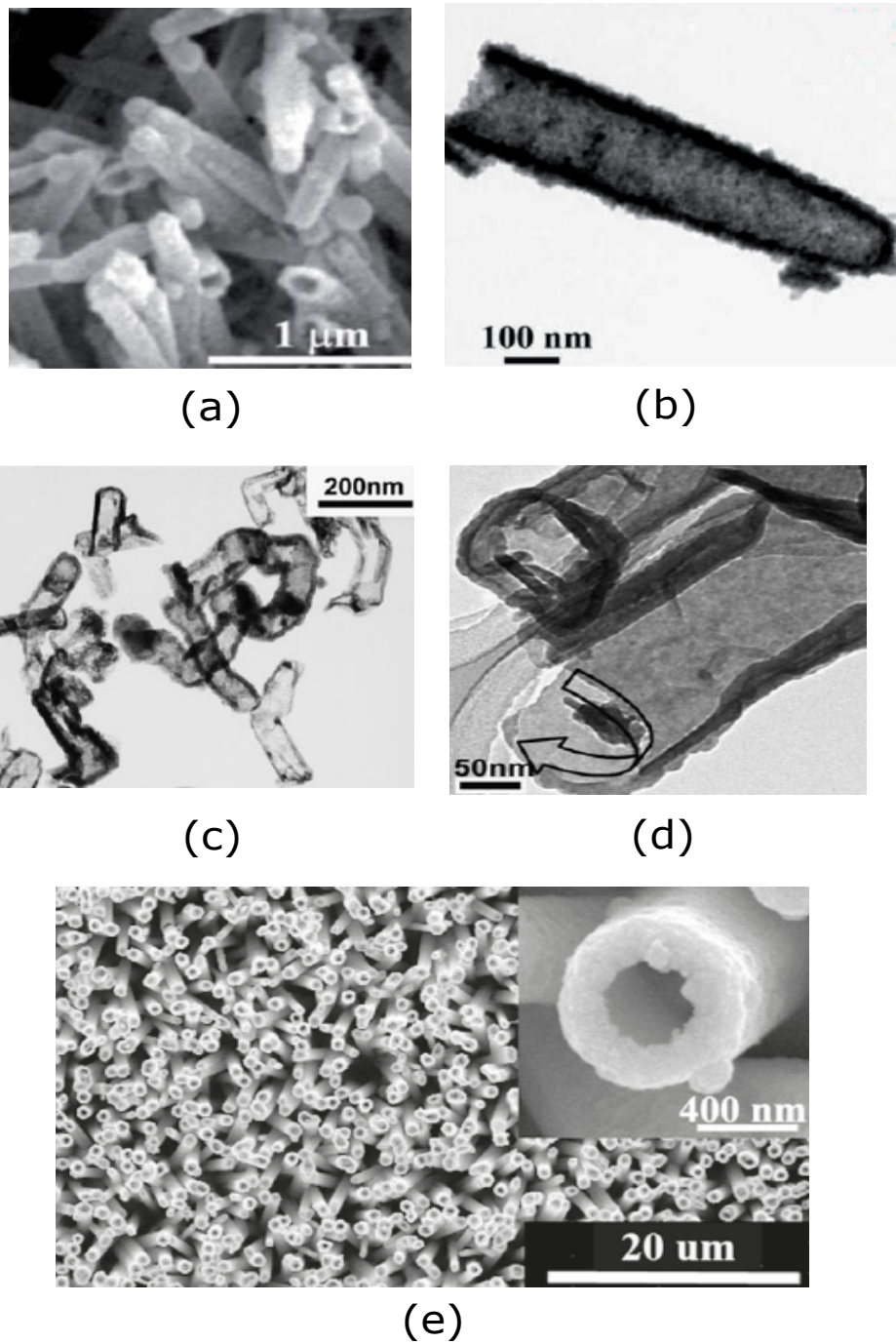


Figura 2. Imágenes tomadas por SEM y TEM de nanotubos de CdSe fabricados por: (a), (b) y (e) electrodeposición sobre plantillas de nanohilos de ZnO, y (c), (d) sonoelectroquímica. *Fuente: [1-3]*

2.2. NANOTUBOS

Respecto a lo anterior, Zhou en su trabajo [2], comenta que se han reportado síntesis de nanotubos de CdSe por el método de plantillas, donde nanohilos de selenio, estaño, cadmio, $Cd(OH)_2$ y AAO, han sido usados como materiales para los moldes. Ahora, para la fabricación del nanotubo cónico truncado del cual se basa este proyecto de investigación, se propone hacer uso de nanoconos o nanoconos truncados como plantillas, los cuales se pueden observar en la figura 3 para (a) Silicio y (b) $In_{0,53}Al_{0,22}Ga_{0,25}As$, siendo la altura de este último igual a 350 nm, a un ángulo de inclinación de 20° .

Por otro lado, se tiene que, relacionado con la forma de la nanoestructura a considerar en este proyecto, también se ha reportado en la literatura el crecimiento de nanotubos de otros materiales por técnicas electroquímicas, pues por ejemplo, en [6] Quin y Zhang sintetizaron estas estructuras del polímero conductor PANI, por medio de electropolimerización o polimerización electroquímica, sin el uso de plantillas, en donde sus resultados muestran cómo cambia la morfología de los nanotubos para diferentes potenciales, obteniéndose para un voltaje de 2.4[V] y un tiempo de 500 [s], nanoconos bien formados que se muestran en la figura 3c.

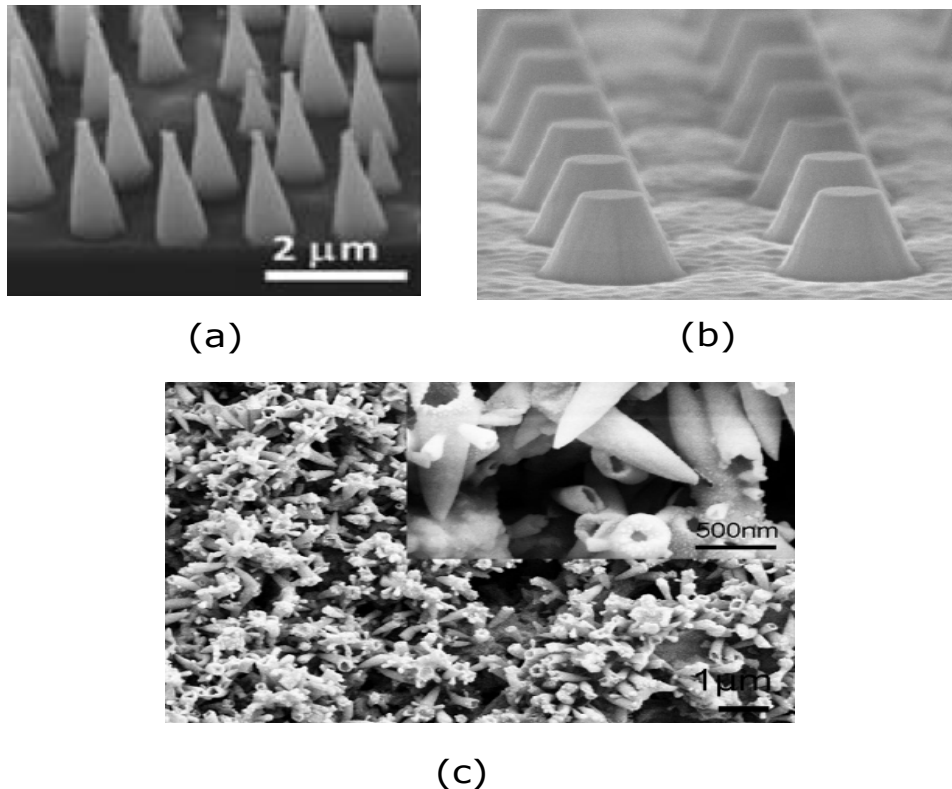


Figura 3. Tipos de plantilla para un nanotubo cónico: a) nanoconos y b) nanoconos truncados. (c) nanotubos cónicos de PANI realizados por electropolimerización sin plantillas. Imágenes tomadas por SEM. Fuente: [4-6]

2.3. Sistemas de pocas partículas en nanotubos

Desde mucho antes de la aparición de la nanociencia y poco después del apogeo de la mecánica cuántica, aumentó el interés sobre el comportamiento de partículas confinadas y sistemas de partículas; tanto es así que, diferentes tipos de potencial como los pozos de potencial finito, infinito y de otras formas, comenzaron a tomarse como ejemplos didácticos que pronto serían los modelos ideales para la descripción del comportamiento de portadores de carga dentro de estructuras fabricadas a escala nanométrica, como lo fue la síntesis de las superredes, consideradas como series de pozos de potenciales finitos.

Entre los sistemas descritos antes de la fabricación de nanoestructuras, se encuentra el estudio de la dinámica cuántica para una partícula obligada a moverse sobre superficies curvas, donde los resultados obtenidos han sido controversiales hasta el momento, pues para ello es necesario considerar la geometría Riemanniana al igual que en la teoría de la relatividad de Einstein; es así que, DeWitt en 1952 [28] aborda este tema en general, considerando que las ecuaciones mecano-cuánticas deben ser covariantes respecto a transformaciones puntuales; posteriormente H. Jensen y H. Kope en 1971 [29] y por su lado da Costa en 1981 [19], plantean desde diferentes puntos de vista, la forma de la ecuación de Schrödinger para una partícula en una superficie, encontrando un término adicional en ésta, denominado potencial geométrico, que depende del radio de curvatura de la estructura.

Por otro lado, respecto a los sistemas fermiónicos confinados, los cuales poseen propiedades macroscópicas que pueden ser descritas mediante la mecánica cuántica, se conoce que teóricamente, son complicados de modelar, ya que para ello se debe resolver una ecuación de autovalores en un espacio no homogéneo, anisotrópico y multidimensional; donde para tal fin se requieren métodos numéricos que conllevan a un gran tiempo de cómputo que incrementa con el aumento del número de partículas. Sin embargo, para facilitar la solución a dichas ecuaciones, es posible realizar aproximaciones como por ejemplo, tener en cuenta pocas partículas o considerar diferentes características del sistema, como la reducción de dimensionalidad para casos donde la morfología de estos es tal que permite obviar los parámetros asociados a alguna de sus dimensiones, aproximaciones en la estructura de bandas de la red cristalina, en los potenciales, en las perturbaciones, etc. Entre las estructuras mesoscópicas obtenidas actualmente y que guardan semejanza con los nanotubos están los anillos cuánticos (QRs) y las nanocintas; los primeros poseen la característica de no ser simplemente conexos al igual que los nanotubos y que se diferencian con éstos al poseer una altura despreciable; además, por tener menor volumen que todas las nanoestructuras, una aproximación de pocas partículas no estaría demasiado lejos de describir muy bien sus propiedades; en contraste, los estudios teóricos que existen sobre partículas ligadas a estas estructuras son variados, abarcan desde electrones y excitones [30, 31], hasta modelos bidimensionales con defectos topológicos [32], entre otros. La segunda estructura, la nanocinta, se podría pensar como un nanotubo abierto, con un largo grande comparado con su ancho y un grosor de unos pocos átomos; sobre este sistema

2.3. SISTEMAS DE POCAS PARTÍCULAS EN NANOTUBOS

se han reportado un número considerable de trabajos enfocados en las características y efectos de esta nanoestructura con forma de zigzag, como por ejemplo: el transporte de carga cuando se le aplica un potencial en forma de pulsos y variable en el tiempo [33], propiedades electrónicas y magnéticas mediante cálculos basados en la teoría del funcional de densidad (o DFT, por sus siglas en inglés, Density Functional Theory) [18], el efecto de enlaces superficiales sobre la elasticidad para una nanocinta de SiGe [17], y el estudio de los estados electrónicos para estas estructuras fabricadas en grafeno [34].

Por último, respecto a los nanotubos, para los cuales algunas de sus propiedades ya han sido mencionadas; se tiene que además de estas, también presentan algunas propiedades similares a las de los QRs favorecidas por su forma no simplemente conexas bajo campos magnéticos, como lo son las corrientes persistentes y el efecto Aharonov-Bohm, donde este último se traduce en oscilaciones en la energía y otras propiedades, al variar la intensidad del campo [35]; así mismo, en relación a sistemas de pocas partículas en nanotubos, se encuentran trabajos que describen los efectos de un campo magnético externo paralelo al eje de simetría sobre las energías de enlace de un excitón [36] y una donadora neutra fuera del eje de simetría [37], así como el efecto de un fonón óptico en un excitón [38]. Finalmente, cabe mencionar que para esta investigación, se tuvieron en cuenta los resultados del trabajo de L.F. García et al. [39], en el cual se estudian los efectos de la conicidad sobre las propiedades magnéticas y espectrales de un electrón en un nanotubo cónico, bajo campos eléctrico y magnético; constituyendo así la idea base del presente proyecto.

Modelo Matemático

En este capítulo, se hace el planteamiento del problema de la siguiente forma: Se caracteriza el sistema mediante sus parámetros geométricos y propiedades del material del que está compuesto, se muestra la ecuación de Schrödinger que describe al sistema y por último, se describe el caso particular de un electrón sobre una superficie cónica.

3.1. Geometría del Sistema y parámetros estructurales

En este trabajo, se considera un electrón confinado en un nanotubo en forma de cono truncado, bajo la influencia de barreras de potencial infinitas, ya que se trata de una estructura crecida de tal forma que sólo la envuelve aire (Free-standing nanostructure) [1, 2], adicionalmente a esto se aplican campos eléctrico y magnético externos en la dirección del eje de simetría (\hat{z}) con el fin de estudiar su espectro energético y el momento magnético dipolar en función del campo magnético. Así, de acuerdo con lo anterior, el potencial al cual se encuentra sometido el electrón está dado por:

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, & R_1(z) < r < R_2(z) \text{ y } 0 < z < H \\ \infty, & \text{En caso contrario} \end{cases} \quad (3.1)$$

El cual corresponde a un pozo de potencial infinito. Donde según los parámetros estructurales del nanotubo dados en la figura 4, se tiene que: $R_1(z) = \frac{(R_t - R_b) + (\omega_b - \omega_t)/2}{H}z + R_b - \frac{\omega_b}{2}$ y $R_2(z) = \frac{(R_t - R_b) + (\omega_t - \omega_b)/2}{H}z + R_b + \frac{\omega_b}{2}$.

3.1. GEOMETRÍA DEL SISTEMA Y PARÁMETROS ESTRUCTURALES

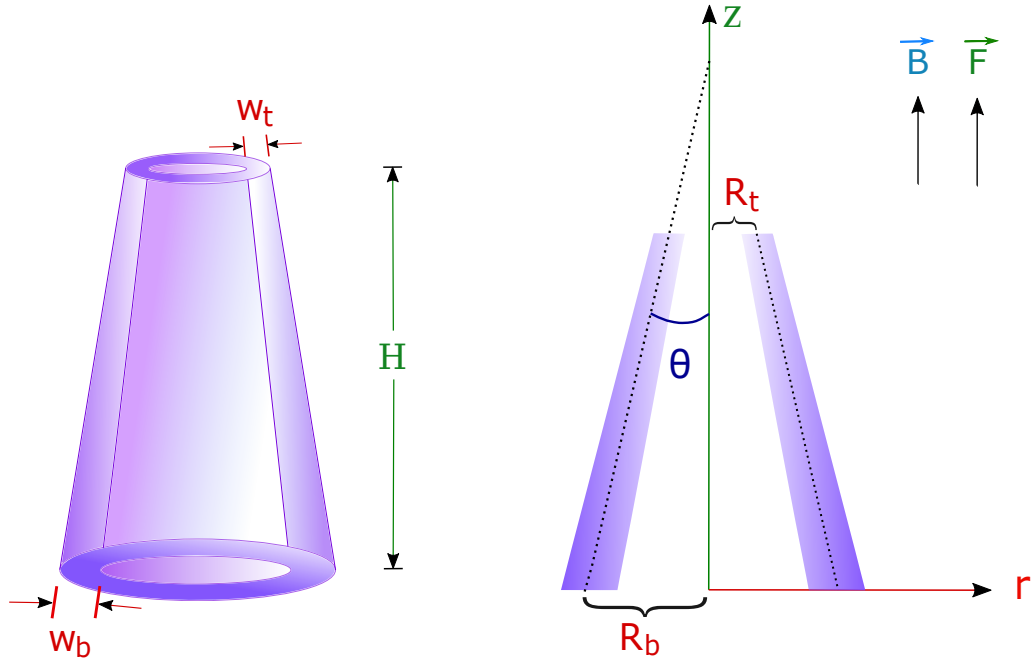


Figura 4. Parámetros geométricos del cono truncado. Representación tridimensional (Izquierda); sección transversal (Derecha)

Con respecto a estos parámetros mostrados en la figura 4 y que describen al nanotubo cónico, cabe mencionar que algunos de ellos son fijos durante el estudio (ver cap 5), como la altura $H = 300[nm]$ y el radio de la base $R_b = 75[nm]$; y otros varían dependiendo del comportamiento a analizar, como lo son el espesor del cono en la parte superior w_t y en la inferior w_b , y su radio superior R_t , que está relacionado con el grado de conicidad del sistema, descrito por el ángulo de apertura θ de la siguiente forma:

$$\tan \theta = \frac{R_t - R_b}{H} \quad (3.2)$$

Donde la variación de R_t y por consiguiente de la conicidad del nanotubo, permitió el estudio del efecto del confinamiento estructural sobre la densidad de probabilidad del estado base del electrón; destacando que los valores numéricos de los parámetros geométricos establecidos, se escogieron similares a lo obtenido experimentalmente en [1] y mostrado en la figura 2b.

Por otro lado, con referencia al material, el nanotubo cónico fue modelado bajo los parámetros del Seleniuro de Cadmio de acuerdo con la síntesis por electrodeposición de éste [1]. El $CdSe$ es uno de los semiconductores II-VI tipo n de banda prohibida directa; ha sido encontrado en tres tipos de estructuras cristalinas (ver figura. 5): wurtzita (hexagonal), esfalerita o también llamada zinc blenda (cúbica) y la “rock-salt” (cúbica). Generalmente la estructura zinc blenda es inestable por lo que se convierte en wurtzita bajo calentamiento

3.2. ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA UN ELECTRÓN EN UN NANOTUBO CÓNICO CON CAMPOS EXTERNOS

moderado; mientras la estructura “rock-salt” se ha visto sólo bajo altas presiones.[24] En contraste, se han sintetizado nanohilos de *CdSe* donde coexisten la estructura wurtzita y zinc blenda,[40] así como nanotubos con estructura cristalina totalmente wurtzita [41]. Por lo tanto, según lo anterior y siguiendo el trabajo experimental de Debgupta et al. [1] se consideró el *CdSe* con estructura hexagonal cuyos parámetros de red son: $a=0.43$ [nm] y $c=0.70$ [nm], y cuya base está conformada por átomos de *Se* en la posición $(1/3, 2/3, 0)$ y *Cd* en $(1/3, 2/3, 0.381)$ [42], donde para efectos de cálculo, se tuvo en cuenta la masa efectiva del electrón de éste a bajas temperaturas ($T \approx 0[K]$) como $m^* = 0,13m_e$.[43]

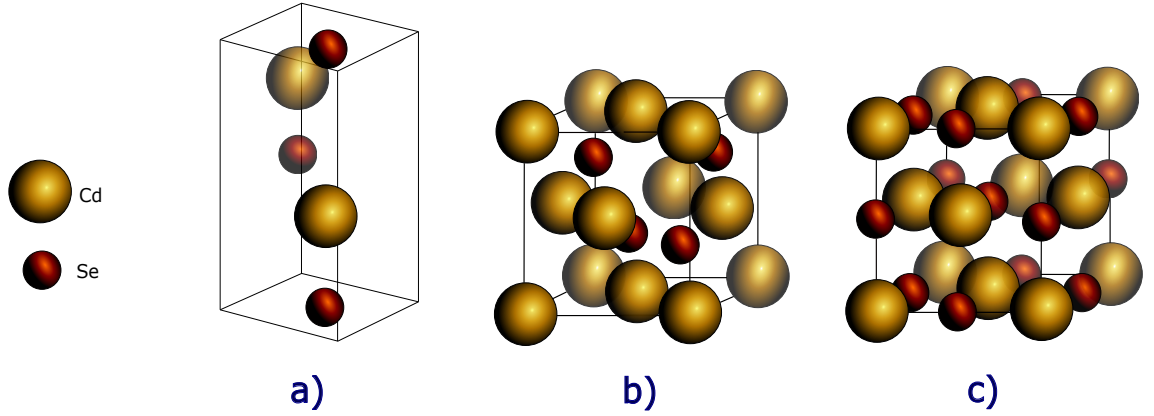


Figura 5. Estructuras del *CdSe*: a) Hexagonal (Wurtzita), b) cúbica (zinc blenda) y c) cúbica (‘Rock salt’)

3.2. Ecuación de Schrödinger para un electrón en un nanotubo cónico con campos externos

Para describir el comportamiento del electrón dentro del nanotubo cónico bajo campos eléctrico y magnético uniformes, se hizo uso de la ecuación de Schrödinger estacionaria bajo la aproximación de masa efectiva con la introducción de los potenciales: eléctrico $\Phi(\vec{r})$ y vectorial magnético \vec{A} (ver eq. 3.3), donde se ha tenido en cuenta que los potenciales son independientes del tiempo y que el *CdSe* cumple con la condición necesaria para realizar esta aproximación por ser de banda prohibida directa.

$$\left[\frac{1}{2m^*}(-i\hbar\nabla + e\vec{A})^2 + \Phi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (3.3)$$

Ahora, escribiendo el hamiltoniano (parte izquierda de la ecuación 3.3) en coordenadas cilíndricas (r, φ, z) , donde se expresa la función de onda del electrón como $\psi(r, \varphi, z) = \chi(r, z)e^{im_l\varphi}$ con $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ y teniendo en cuenta que el potencial eléctrico está dado por $\Phi = e\vec{F} \cdot \vec{r}$, se llega a la ecuación (3.4) en la cual se ha considerado la expresión

3.3. UN ELECTRÓN LIGADO A UNA SUPERFICIE CÓNICA

del campo magnético y el eléctrico como: $\vec{B} = B\hat{z}$ y $\vec{F} = F\hat{z}$ respectivamente; además de la elección de \vec{A} como el gauge de Coulomb: $\vec{A} = \frac{\vec{B} \times \vec{r}}{2}$, $\nabla \cdot \vec{A} = 0$.

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \chi(r, z) + \left[\frac{\hbar^2}{2m^* r^2} m_l^2 + \frac{e\hbar B}{2m^*} m_l + \frac{e^2 B^2}{8m^*} r^2 \right] \chi(r, z) + [eFz + V(r, z)] \chi(r, z) = E \chi(r, z) \quad (3.4)$$

Donde el potencial $V(r, z)$ corresponde al de la ecuación (3.1) y por ende la condición de frontera que sigue la función de onda para la parte radial y axial, es la de Dirichlet: $\chi(r, z)|_{\partial\Omega} = 0$. Siendo $\partial\Omega$, la frontera del NT.

3.3. Un electrón ligado a una superficie cónica

La dinámica de una partícula cuántica sobre una superficie ha sido descrita desde hace décadas, incluso se podría decir que antecedió la consolidación de la nanotecnología como campo específico [29]. Con relación a esto, R.C.T. da Costa, en su tan referenciado trabajo [19], describe la dinámica de una partícula ligada a una superficie desde una visión newtoniana de la ecuación de Schrödinger expresada en forma tensorial para coordenadas generalizadas; R.C.T. da Costa menciona un tipo de potencial que aparece del laplaciano y que está relacionado con la curvatura de la superficie, a lo cual se le denomina potencial geométrico (GP), esto conlleva a la diferencia en propiedades cuánticas para superficies isométricas.

Más recientemente, se han estudiado los estados ligados de un electrón en una superficie de un cono truncado [7]; donde se encuentra la expresión explícita para el GP de esta superficie de revolución en función de la generatriz, así:

$$U = \frac{-\hbar^2 (1 + f_z^2 + f f_{zz}^2)^2}{2m 4f^2(1 + f_z^2)^3} \quad (3.5)$$

Siendo f la función generatriz, f_z y $f f_{zz}$ la primera y segunda derivada de f respectivamente. Esta función generatriz, que en el caso del cono truncado es: $f = \rho + \lambda z$, actúa como un tipo de ligadura entre las coordenadas radial r y la axial z , permitiendo expresar la ecuación de Schrödinger en función de sólo la coordenada z , así:

$$\partial_z^2 Z + \frac{\lambda}{\rho + \lambda z} \partial_z Z + \left[\frac{1}{(\rho + \lambda z)^2} \left(\frac{1}{4} - \eta^2(1 + \lambda^2) \right) + 2m\omega(1 + \lambda^2) \right] Z = 0 \quad (3.6)$$

Donde ρ corresponde al radio del círculo menor del cono y $\lambda = \tan\beta$ la pendiente del cono, siendo β el ángulo de la función f y el eje z .

3.3. UN ELECTRÓN LIGADO A UNA SUPERFICIE CÓNICA

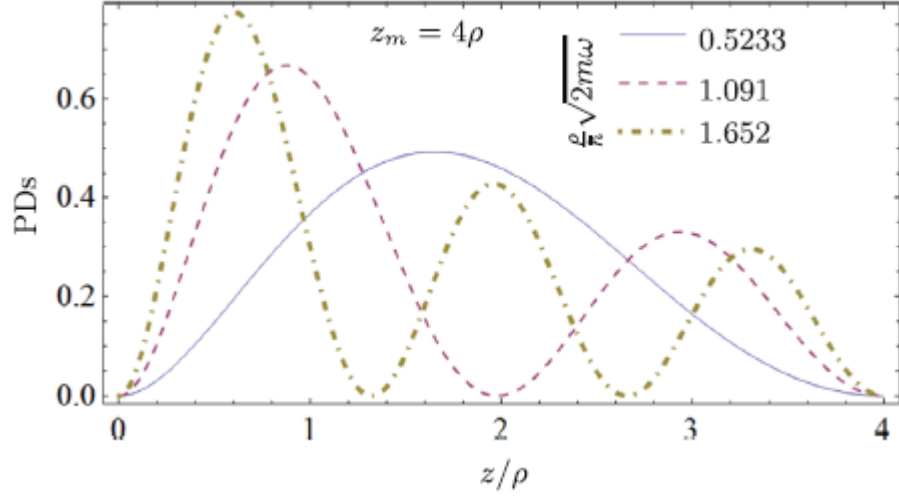


Figura 6. Densidad de probabilidad de los estados $Z_0(z), Z_1(z), Z_2(z)$ para $z_{max} = 4\rho$, con $\eta = 0, \lambda = 1$. Fuente: [7].

Cabe destacar que sólo se ha mostrado la ecuación de Schrödinger para la parte axial, ya que al tratarse de una superficie de revolución, donde el potencial sólo depende de la forma de éste, la función de onda del electrón tangente a la superficie es $\psi_T(\theta, z, t) = Z(z)e^{i\eta\theta}e^{-i\omega t/\hbar}$ con $\eta = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ y donde ω representa la energía de la partícula cuántica.

Ahora, acomodando la ecuación (3.6), ésta toma la forma de una ecuación de Bessel cuya solución está dada por:

$$Z_n(z) = A \left\{ J_\delta \left[\alpha c_n \left(1 + \lambda \frac{z}{\rho} \right) \right] - \frac{J_\delta(\alpha c_n)}{Y_\delta(\alpha c_n)} Y_\delta \left[\alpha c_n \left(1 + \lambda \frac{z}{\rho} \right) \right] \right\} \quad (3.7)$$

Donde $\alpha = \sqrt{\frac{1+\lambda^2}{\lambda^2}}$, A es el coeficiente de normalización, $\delta = \lambda^{-1} \sqrt{\eta^2(1+\lambda)^2 - 1/4}$ y $c_n = \frac{\rho \sqrt{2m\omega_n}}{\hbar}$ son las soluciones de la siguiente ecuación algebraica, que permite encontrar los eigenvalores de energía ω_n :

$$Y_\delta(\alpha c) J_\delta \left(\alpha c \left[1 + \frac{z_m}{\rho} \lambda \right] \right) - J_\delta(\alpha c) Y_\delta \left(\alpha c \left[1 + \frac{z_m}{\rho} \lambda \right] \right) = 0 \quad (3.8)$$

De esta forma, los autores de [7] encuentran las funciones de onda y los valores de energía correspondientes para el caso de la superficie del cono truncado, de lo cual se puede corroborar lo propuesto por [19, 29] de la atracción de la partícula hacia lugares de mayor curvatura por acción del GP, como se observa para las gráficas de densidad de probabilidad realizadas por ellos (ver fig. 6), en donde se puede ver que en el estado base la partícula tiene mayor probabilidad de encontrarse ya no en el centro del cono, sino en

3.3. UN ELECTRÓN LIGADO A UNA SUPERFICIE CÓNICA

lugares cercanos a este; además, este efecto es más notorio para el primer y el segundo estado excitado, donde el pico de densidad de probabilidad es más prominente en los lugares cercanos al círculo de menor radio, es decir mayor curvatura, según la generatriz $f(z=0) = \rho$.

Ahora, con respecto al comportamiento de una partícula cuántica sin spin en una superficie curva cuando sobre ella actúa un campo magnético externo cualquiera; queda la inquietud de si el potencial vectorial magnético de alguna forma está ligado con la curvatura de la superficie; y es acerca de este tema que existe una discusión sobre si es posible desacoplar la dinámica de la partícula, en un movimiento tangencial a la superficie y otro transversal. Entonces, recientemente M.S.Shikakhwaa y N.Chairabajo en su trabajo[44], discuten sobre las soluciones contradictorias en este tema, mostrando que se puede expresar un hamiltoniano puramente de superficie, es decir, que no dependa de una relación entre la componente transversal del campo vectorial magnético \vec{A} y la curvatura de la superficie; evidenciando así el desacople de los movimientos tangencial y transversal, donde considerando la aproximación de capa delgada y una transformación de gauge $A_3 \rightarrow A'_3 = 0$, es posible despreciar el movimiento transversal y expresar un campo magnético sobre la superficie $\vec{B}' = \nabla \times \vec{A}'|_{q_3=cte=a}$, con $\vec{A}' = (A_1, A_2)$. Entonces, el hamiltoniano superficial toma la siguiente forma:

$$\hat{H}_{surf} = -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{D}' \cdot \vec{D}') - \frac{\hbar^2}{2m} (M^2 - 2K) + V \quad (3.9)$$

Con $D'_k = \left(\frac{1}{\hbar} \partial_k - \frac{iq}{\hbar} A_k \right)$, para $k = 1, 2$. Finalmente, los autores dan a conocer el hamiltoniano (3.9) para tres geometrías en particular: las superficies cilíndrica, esférica y toroidal; donde para el caso cilíndrico se expresa como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\hat{\theta} D_\theta + \hat{z} D_z \right)^2 - \frac{\hbar^2}{8ma^2} \quad (3.10)$$

Donde a es el radio del cilindro, $D_\theta = \left(\frac{1}{a} \partial_\theta - \frac{iq}{\hbar} A_\theta \right)$, $D_z = \left(\partial_z - \frac{iq}{\hbar} A_z \right)$ y el último término corresponde al GP.

Modelado y Simulación

Las ecuaciones diferenciales parciales (PDEs) son una representación usual del comportamiento de propiedades de sistemas físicos; sin embargo, estas PDEs no siempre pueden ser resueltas por métodos analíticos; En lugar, se suele buscar una aproximación a ellas mediante diferentes métodos numéricos de discretización entre los cuales se encuentran: el método de diferencias finitas (FDM), método de volumen finito (FVM), método de elementos de frontera (BEM) y método de elementos finitos (FEM).

En esta investigación, se hizo uso del FEM para resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria (3.4), para un electrón confinado en un nanocono truncado de $CdSe$, bajo campos eléctrico y magnético. A continuación se presenta una breve descripción del software utilizado, así como ciertas características del método y la validación de este para la resolución del problema en cuestión.

4.1. Acerca del Software

COMSOL Multiphysics[®] es un entorno de simulación usado para resolver y modelar diferentes problemas de la ciencia e ingeniería, que van desde la biociencia y la electroquímica hasta la mecánica estructural y fenómenos de transporte; así mismo, se denomina multifísica, ya que con esta herramienta es posible modelar situaciones más reales en las que intervienen fenómenos físicos simultáneos, como por ejemplo el flujo de fluido compresible donde se tiene en cuenta la transferencia de calor, entre otros; estos tipos

4.1. ACERCA DEL SOFTWARE

de problemas se representan por sistemas acoplados de PDEs que suelen resolverse mediante el uso de uno o dos de los métodos de discretización mencionados anteriormente, dependiendo del comportamiento matemático de éstas.[45]

Dado que muchas ecuaciones diferenciales parciales en física y otros campos, contienen derivadas hasta de segundo orden en el tiempo y el espacio, no mixtas; en COMSOL es posible definir una PDE de este estilo sólo especificando el valor de los coeficientes que acompañan cada una de las derivadas, lo que resulta en una PDE en forma de coeficientes; es así que debido a la forma de la ecuación de Schrödinger (3.4), por comodidad se usó ésta formulación, como sigue:

$$e_a \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + d_a \frac{\partial u}{\partial t} + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f \quad (4.1)$$

Ahora bien, la ecuación a resolver corresponde a un problema de valores propios, por tal motivo, simplemente se debe añadir el estudio de eigenvalores en el programa y éste por defecto asume que las variables dependientes varían con el tiempo de la forma:

$$u(t) = u_0 e^{-\lambda t} \quad (4.2)$$

Donde u_0 es una amplitud compleja y λ el eigenvalor. Por lo tanto usando (4.1) y (4.2), se llega a la expresión general para el problema de valores propios con la forma de coeficientes:

$$\lambda^2 e_a u - \lambda d_a u + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f \quad (4.3)$$

De acuerdo con el modelo 2D axisimétrico (coordenadas cilíndricas) que se escogió para el cono, se tiene que $\nabla = [\frac{\partial}{\partial r}, \frac{\partial}{\partial z}]$ y en consecuencia, los valores de los coeficientes en la ecuación (4.3), para (3.4), son:

$$\begin{cases} e_a = 0 \\ d_a = 1 \\ c = \frac{\hbar^2}{2em^*} \\ \alpha = [0, 0] \\ \gamma = [0, 0] \\ \beta = [-\frac{\hbar^2}{2em^* r}, 0] \\ a = \frac{m_l^2 \hbar^2}{2em^* r^2} + \frac{m_l \hbar B}{2m^*} + \frac{eB^2 r^2}{8m^*} + Fz \\ f = 0 \end{cases} \quad (4.4)$$

Donde se puede observar que para cada coeficiente en comparación con la ecuación (3.4) (con $V(r, z) = 0$), sus valores han sido divididos por el de la unidad de carga eléctrica

4.2. MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

e , con el fin de expresar la energía en eV ; lo cual quiere decir que las unidades correspondientes a los parámetros físicos son las del SI. Aunado a esto, vale la pena señalar que la adimensionalización de la ecuación (3.4), para su posterior solución es realizada internamente por el software y por tal motivo, como todo programa, sus resultados deben ser validados para asegurarse de que está trabajando correctamente; lo cual se mostrará en la sección 4.3.

Por otra parte, es necesario señalar que el problema a resolver, incluye la solución de la ecuación (4.3) con los parámetros de (4.4) teniendo en cuenta las condiciones de frontera de Dirichlet, que dentro del software se imponen simplemente seleccionando las fronteras del modelo geométrico (Dominio) donde se desean.

En contraste, el software para solucionar el problema de valores propios bajo el FEM (ver sección 4.2), utiliza un código basado en una variante del algoritmo de Arnoldi llamado método de Arnoldi implícitamente reiniciado, en inglés “the implicitly restarted Arnoldi method”, que incorpora las rutinas ARPACK FORTRAN para problemas de eigenvalores a gran escala; dichas rutinas, en su ejecución, son acompañadas de solucionadores de sistemas de ecuaciones lineales, ya sean directos como aquellos basados en la factorización LU, o iterativos. [46]

Por último, cabe resaltar que para el procesamiento de datos se modificó un script de python el cual lee cada uno de los documentos de texto que se exportan desde COMSOL, y organiza los datos en listas, que luego se usan para graficar y analizar el comportamiento de las cantidades físicas que se estudiaron.

4.2. Método de elementos finitos

La idea básica de cualquier método numérico para la solución de ecuaciones diferenciales parciales es la discretización del problema con infinitos grados de libertad, a uno descrito por un sistema de ecuaciones con un número finito de incógnitas; donde precisamente la forma de discretización es el factor que diferencia cada método; siendo así que el FDM obtiene el problema discreto reemplazando las derivadas por cocientes diferenciales que involucran los valores de las incógnitas en ciertos puntos (nodos); el cual se diferencia significativamente al proceso realizado por el FEM, que en general convierte la PDE en un problema en forma matricial mediante métodos variacionales, donde las incógnitas se hallan para un número finito de puntos, que luego interpola con funciones base o funciones de forma, para expresar la solución en todo el dominio. [47]

Así, el procedimiento general de solución de una ecuación diferencial por el método de elementos finitos, se da mediante la aplicación de los siguientes pasos [48]:

- **Reformulación del problema inicial a uno variacional equivalente:** La formulación débil, es usualmente una forma integral que requiere una continuidad más

4.2. MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS

“débil” en las variables de campo; esta formulación es la más ampliamente usada por el FEM y generalmente produce un conjunto de ecuaciones discretizadas del sistema que da resultados estables y precisos, especialmente para problemas de geometría compleja.[49]

La forma final de la ecuación diferencial bajo la formulación variacional, incluye la aproximación de la función incógnita inicial mediante una función de prueba así:

$$u_b = \sum_{p=1}^{\tilde{n}} \sum_{e=1}^l u_{b_p} N_p^e \quad (4.5)$$

Donde \tilde{n} es el número total de nodos, l el número total de elementos, N_p^e la función de forma y u_{b_p} es el coeficiente de las funciones que aproximan u con u_b en el nodo p . [50]

- **Discretización del continuo:** Se aproxima el dominio por la unión de pequeños dominios más simples a los cuales se le denominan elementos finitos; en cada elemento se pueden distinguir los puntos nodales o nodos, usualmente ubicados en los vértices, centroide o en la mitad de los lados de éstos, y que unidos forman una malla. En dos dimensiones, se definen dos geometrías o tipos de elementos básicos: los triangulares y los cuadrados (Ver figura 7); los cuales pueden ser lineales, cuadráticos, cúbicos, entre otros. Los elementos cuadráticos (fig. 7b) se diferencian de los lineales (fig. 7a) en que los bordes y superficies cercanos a la frontera del dominio son frecuentemente curvos; donde la familia de elementos Lagrangianos utilizan todos los nodos que aparecen en la imagen (negros, blancos y grises) [8]. Para más información, los diferentes tipos de familias de elementos se pueden encontrar en [51].
- **Selección de las funciones de interpolación o funciones de forma:** Usualmente son polinomios que como su nombre lo indica, interpolan las variables de campo sobre el elemento. Entre estos se encuentran: Los polinomios de Lagrange, Polinomios de Hermite, Polinomios de Legendre, entre otros.
- **Unión de las ecuaciones para los elementos:** Se combinan las ecuaciones para los elementos, donde sus conectividades (nodos compartidos) deben ser usadas en el proceso de ensamblaje, lo cual conlleva al establecimiento de un sistema de ecuaciones globales. Además, en este paso, son impuestas las condiciones de frontera, que en general, no están incluidas en las ecuaciones de los elementos.
- **Solución del sistema de ecuaciones globales:** Se encuentran los valores nodales de la solución incógnita mediante métodos directos o iterativos.

4.3. VALIDACIÓN DEL MÉTODO Y CONVERGENCIA

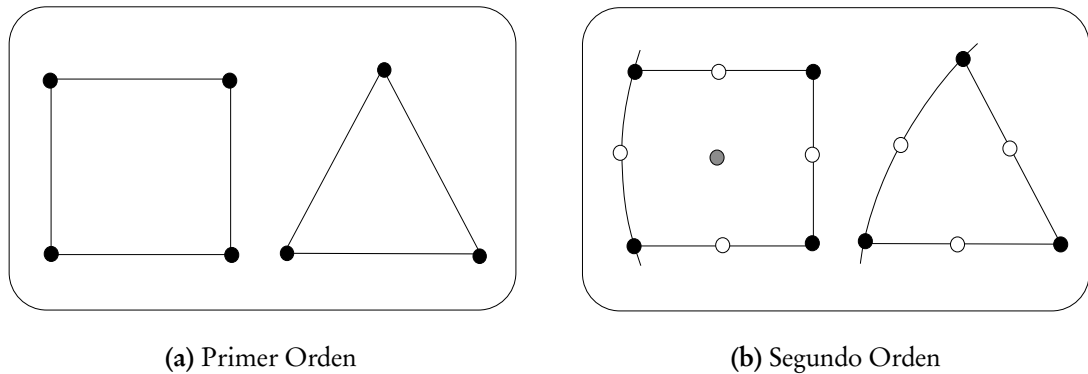


Figura 7. Elementos bidimensionales a) De primer orden o lineales y b) Cuadráticos o de segundo orden. *Adaptado de:[8]*

4.3. Validación del método y convergencia

En lo que concierne a los métodos numéricos y simulaciones, éstos han de ser comprobados para garantizar que los resultados que predicen son correctos; esta validación es generalmente representada por el error del método. Para modelos matemáticos donde se conoce un resultado analítico, es muy sencillo evaluar el error de aproximación; sin embargo, como se ha dicho anteriormente, muchos de los modelos matemáticos de fenómenos descritos por una PDE, son de difícil solución y por ende, no se puede comparar con un resultado analítico. Por ello, en esta sección, se mostrarán dos procedimientos realizados para garantizar la validez de los resultados de este proyecto.

Primero, se reprodujo el trabajo de Lent[9], donde se muestra el comportamiento de los estados energéticos de un electrón en un punto cuántico en forma de disco, bajo una aproximación bidimensional, donde éste toma forma circular. La única diferencia con el trabajo inicial, fue el modelado en el módulo 2D axisimétrico, donde se incluyó un grosor de 5[nm], y la escogencia de una malla triangular con elementos de segundo orden y función de forma de Lagrange; se le restó la energía del pozo debido al grosor del disco, de $E=0.301$ [eV], para así obtener la energía del electrón en la aproximación bidimensional; finalmente se realizó el escalamiento descrito en dicho trabajo y se obtuvo la gráfica que se observa en la figura 8.

De la gráfica es posible observar que para el estado base y algunos de los primeros estados excitados, los resultados se ajustan a lo publicado por Lent; Sin embargo, aquellos de mayor energía comparados con los reproducidos, poseen una pequeña diferencia en energía. En conclusión, el modelo funciona lo suficientemente bien, pues los valores están dentro de la escala esperada y se reproduce con buena exactitud la física del problema.

4.3. VALIDACIÓN DEL MÉTODO Y CONVERGENCIA

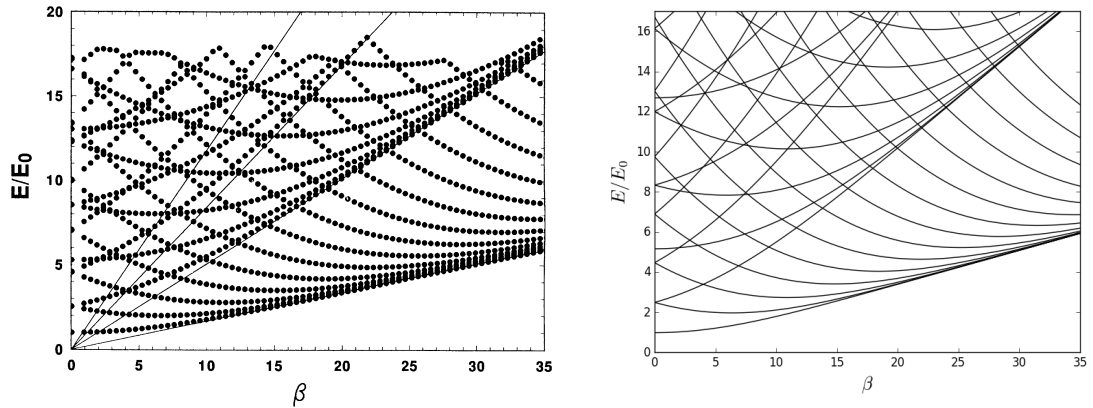


Figura 8. Comparación de los estados electrónicos de un QD circular, modelos 2D por Lent [9] (Izquierda) y modelo 2D axisimétrico en COMSOL. (Derecha)

Lo que sigue ahora, se trata del análisis de convergencia de malla para el modelo del nanotubo cónico. En este caso, como no se conoce la solución analítica del problema, se optó por comparar los valores de la energía del estado base del sistema para diferentes tipos de mallas con elementos Lagrangianos, con el fin de obtener una precisión de 7 cifras significativas en la energía, siguiendo un procedimiento similar a [52].

Partiendo de una malla inicial, se realizaron tres refinamientos repetitivos, donde se redujo progresivamente el tamaño máximo del elemento a la mitad en cada paso; se calcularon los valores de energía para una malla triangular, y se anotaron los tiempos de cómputo; posteriormente se varió el grado del elemento comenzando por uno de segundo orden hasta el de tercer orden, pues así lo requiere como mínimo la ecuación (3.4), y se realizó el mismo refinamiento de malla; obteniéndose así los cuadros 1a y 1b; siendo r el número de refinamiento, h la longitud máxima del elemento, E_0 la energía del estado base, t el tiempo de solución y p el grado del elemento. Para el cuadro 1b se incluyeron en el modelo, los campos eléctrico y magnético en el sentido positivo del eje de simetría; con el fin de observar la diferencia en la convergencia y los tiempos de cómputo, con el caso de ausencia de éstos.

A partir del cuadro 1, se puede concluir que el valor de la energía va convergiendo a medida que se realiza cada refinamiento de malla. Además, al disminuir el tamaño del elemento, aumenta el tiempo de cómputo pues deben resolverse un número mayor de ecuaciones; Sin embargo, se observa una convergencia más rápida para las 7 cifras significativas cuando se aumenta el orden de éste. Por otra lado, para el caso en el que se aplicaron campos eléctrico y magnético simultáneos, se observa el mismo comportamiento en la convergencia con el caso de ausencia de estos; debido a ello, se ha optado por realizar las simulaciones con elementos de tercer orden y tamaño igual al 16% del grosor w_t del tubo, que en el caso de la anchura uniforme del cono $w=5$ [nm] corresponde a $h=0.8$ [nm] (ver figura 9).

4.3. VALIDACIÓN DEL MÉTODO Y CONVERGENCIA

(I) $p = 2$				(I) $p = 2$			
r	h	E_0	$t [s]$	r	h	E_0	$t [s]$
0	1.6	0.1175761	2	0	1.6	0.1194161	2
1	0.8	0.1175203	4	1	0.8	0.1193601	4
2	0.4	0.1175166	9	2	0.4	0.1193565	12
3	0.2	0.1175164	30	3	0.2	0.1193562	27

(II) $p = 3$				(II) $p = 3$			
r	h	E_0	$t [s]$	r	h	E_0	$t [s]$
0	1.6	0.1175166	2	0	1.6	0.1193564	2
1	0.8	0.1175164	5	1	0.8	0.1193562	4
2	0.4	0.1175164	18	2	0.4	0.1193562	17
3	0.2	0.1175164	74	3	0.2	0.1193562	55

(a) $B=0, E=0$ (b) $B=1.2, E=0.1$

Cuadro 1. Refinamiento de malla para elementos Lagrangianos de segundo (I) y tercer orden (II); con parámetros del tubo $w_t = w_b = 5 [nm]$ y $R_t = 0,5R_b$; para las intensidades de campo: (a) $B = 0 [T]$, $E = 0 [kV/cm]$ y (b) $B = 1,2 [T]$ y $E = 0,1 [kV/cm]$

Finalmente cabe resaltar que los tiempos obtenidos, corresponden a los simulados en un computador de 4 Gb de RAM, con procesador Intel(R) Core(TM) i3-3110M que consta de 2 núcleos a 2,4GHz.

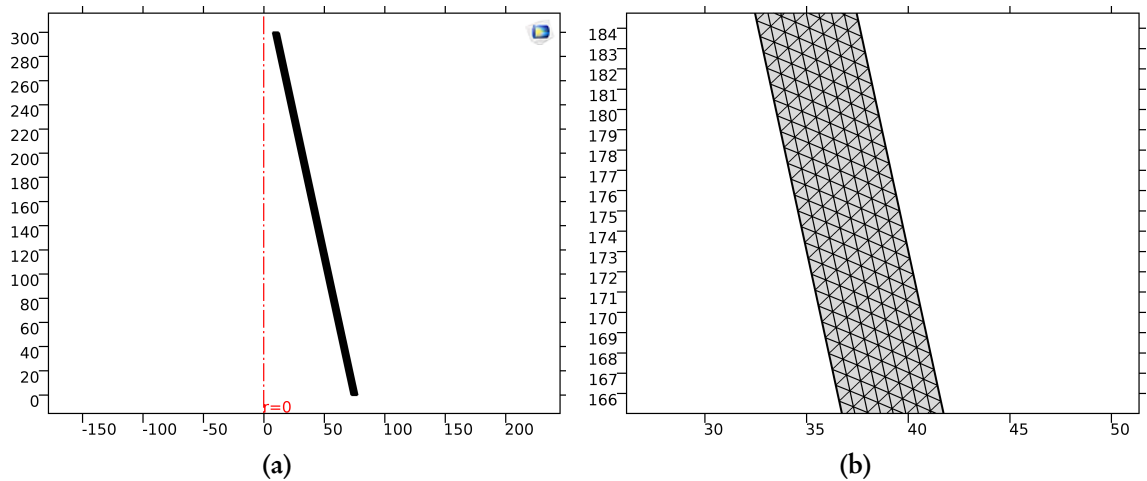


Figura 9. Modelo y malla del nanotubo cónico realizado en COMSOL; a la derecha se muestra un aumento de la figura izquierda, donde la longitud máxima del elemento es $h=0.8 [nm]$.

Análisis de Resultados

Para describir un sistema y su comportamiento respecto a una perturbación, es necesario plantearse una serie de preguntas referentes a su estado inicial y acerca de cómo se modifican sus propiedades al ser aplicada dicha perturbación; por ello en este capítulo, con el fin de estudiar el comportamiento de un electrón confinado en un nanotubo en forma de cono truncado al cual se le aplican campos externos, y exponer sus posibles aplicaciones, se darán respuestas a los siguientes interrogantes:

1. ¿Cómo es el potencial de confinamiento que percibe la partícula y qué efecto tiene sobre la energía total de la misma?
2. ¿Cómo es la densidad de probabilidad del electrón en ausencia y presencia de campos externos?
3. ¿Cómo se comporta la energía del electrón cuando es sometido a la influencia de un campo magnético externo a medida que se cambia algún parámetro de la estructura?
4. ¿En qué cambia el panorama de la pregunta 3, si simultáneo al campo magnético, se le aplica un campo eléctrico en la misma dirección?

En consecuencia, este capítulo se compone de cuatro secciones, donde la primera corresponde a la descripción del potencial geométrico del sistema en el que se encuentra la partícula y los tres siguientes abordan los estudios correspondientes al comportamiento de las propiedades del electrón como su energía, su densidad de probabilidad y momento

5.1. POTENCIAL DEBIDO A LA CURVATURA

dipolar magnético, cuando se varía el ancho y la conicidad del tubo, mientras se le aplican campos eléctrico y magnético uniformes en dirección del eje de simetría. Así mismo, cabe resaltar que para todo el análisis se tendrán como parámetros fijos del cono su altura $H = 300[\text{nm}]$ y el radio medio de su base $R_b = 75[\text{nm}]$, como se mencionó en la sección 3.1.

5.1. Potencial debido a la curvatura

El potencial de confinamiento estructural para un nanotubo cónico resulta ser altamente anisótropico debido a los diferentes efectos geométricos que se combinan, pues en dicha estructura tienen parte efectos de tamaño, como pueden ser los radios medios en los extremos del tubo, el espesor y la altura de este; y además efectos de forma como el grado de conicidad de la estructura.

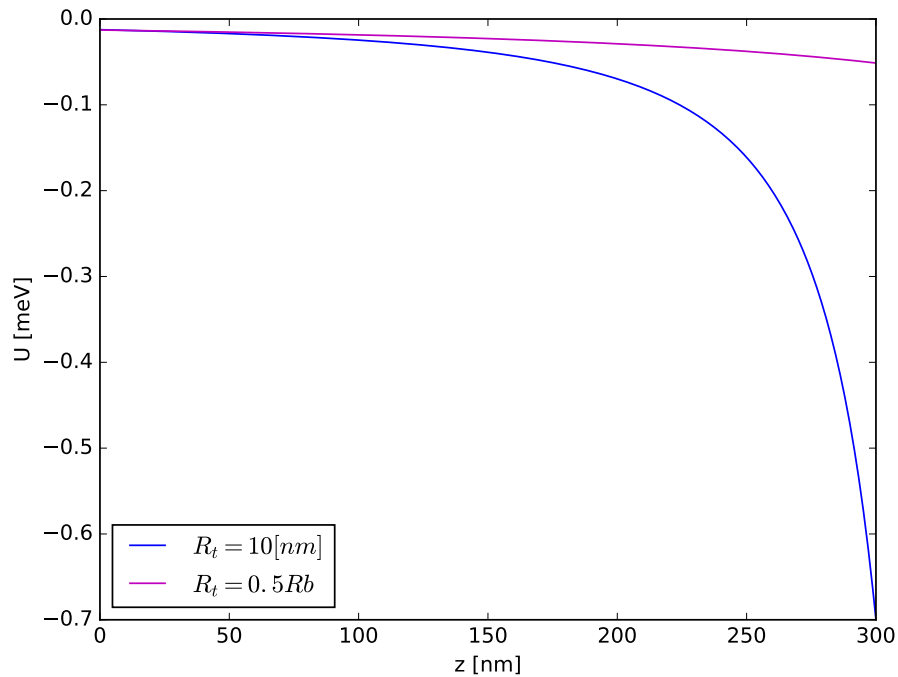


Figura 10. Potencial debido a la variación de la curvatura del nanotubo, para dos radios medios superiores: $R_t = 10[\text{nm}]$ (azul), $R_t = R_b/2$ (magenta).

Por otra parte, así como un tubo cilíndrico puede verse como una sucesión infinita de anillos idénticos de espesor infinitesimal apilados uno sobre otro, un tubo cónico podría considerarse de igual manera, pero teniendo en cuenta que el radio de los anillos varía linealmente a medida que se apilan. Esta característica resulta ser el punto clave al momento de analizar las diferencias entre las propiedades espectrales de un nanotubo

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

cónico respecto a uno cilíndrico; ya que como se mencionó en el capítulo 3, las regiones de mayor curvatura serán percibidas por el electrón como verdaderos pozos de potencial.

Respecto a lo anterior, el potencial debido a la curvatura de un nanotubo cónico de espesor despreciable, según la ecuación (3.5) toma la siguiente forma:

$$U = \frac{-\hbar^2}{8m^*f^2(1+f_z^2)} \quad (5.1)$$

Donde en este trabajo se tiene que, $m^* = 0,13m_e$, $f = \frac{R_t - R_b}{H}z + R_b$ y $f_z = \frac{R_t - R_b}{H}$, siendo los parámetros estructurales fijos $R_b = 75[nm]$ y $H = 300[nm]$. En la figura 10 se puede observar este potencial geométrico para dos valores diferentes del radio del extremo superior del nanotubo, es decir, para dos grados de conicidad diferentes. Para el caso de $R_t = 0,5R_b$ ($37,5[nm]$), se observa que al acercarse al borde superior del tubo, esto es cuando z se incrementa, tiene lugar un descenso suave y monótono del potencial como era de esperar, pues las regiones con mayor curvatura se traducen en términos de energía, como pozos de potencial para el portador. Ahora, para el caso de $R_t = 10[nm]$, es decir, un nanotubo con mayor grado de conicidad, se evidencia la formación de un pozo de potencial aproximadamente 14 veces más profundo que el anterior, lo cual corresponde con el hecho de que el radio en el extremo superior del tubo es 3,75 veces menor que para el primer caso, y como está expresado en la ecuación (5.1), el potencial depende inversamente con el cuadrado del radio de curvatura. Esta notable diferencia que se da en el potencial debido a la curvatura respecto al grado de conicidad de la estructura, tendrá un papel preponderante en las propiedades espectrales que exhiba el sistema, las cuales se analizarán en las siguientes secciones.

5.2. Modelo nanotubo cónico delgado

Durante esta sección, lo que se denomina nanotubo delgado corresponde a una estructura con grosor uniforme $w = 5[nm]$, es decir, aproximadamente el 6,67% del radio medio de la base.

Efecto del campo magnético

Dado que un nanotubo es una estructura con geometría no simplemente conica al igual que los anillos, resulta de gran interés analizar el efecto de un campo magnético aplicado en dirección axial, puesto que tienen lugar oscilaciones Aharonov-Bohm en el espectro energético y por ende en todas las propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas del sistema. En este sentido, se ha calculado el espectro de energía en función de la intensidad de un campo magnético uniforme aplicado en dirección axial para diferentes configuraciones de nanotubos.

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

En primer lugar se tiene el caso de un nanotubo cilíndrico, en donde el radio medio superior coincide con el radio medio de su base $R_b = R_t = 75[nm]$. El electrón confinado en esta estructura bajo el efecto del campo magnético exhibe un espectro energético análogo al que se obtiene cuando se encuentra en un anillo cuántico delgado de igual radio medio, donde la energía del estado base oscila respecto a la intensidad del campo con un periodo $\Delta B = \frac{h}{e\pi R^2} = 0,23[T]$, y tiene lugar la aparición de una secuencia de mínimos idénticos que corresponden a diferentes valores del momentum angular, como se observa en la figura 11a, lo cual se traduce en la aparición de las llamadas corrientes persistentes.

Las figuras 11b, 11c y 11d corresponden a dos configuraciones de nanotubos cónicos, el primero con un bajo grado de conicidad, $\lambda_1 = \tan\theta_1 = 0,125$, mientras el segundo presenta un grado de conicidad mayor, $\lambda_2 = \tan\theta_2 = 0,217$; un primer rasgo que se aprecia en estas figuras es el hecho de que en los casos que el nanotubo presenta menor radio medio en su extremo superior, los valores de energía son mayores, al igual que la separación entre niveles; lo cual es consecuencia del mayor confinamiento que imponen al electrón los tubos con mayor conicidad, tal como se analizó en la sección anterior. Así, la fuerte atracción que experimenta el electrón hacia la parte superior de la estructura lo obliga a estar más confinado en dicha región, lo cual se evidencia claramente en las curvas de densidad de probabilidad electrónica que aparecen en la primera fila de la figura 12 y que corresponden al caso de campo magnético nulo. Por otra parte, cabe resaltar que los grupos de estados que han sido discriminados por un color diferente en la figura 11, corresponden a los niveles de energía de los estados rotacionales asociados con cada uno de los niveles que surgen del confinamiento radial y longitudinal.

Un aspecto interesante que aparece en las curvas de energía en función del campo magnético, cuando el nanotubo presenta algún grado de conicidad, es el hecho de que la secuencia de mínimos en la energía están acotados por una función envolvente lineal y creciente, cuya pendiente está relacionada con el grado de conicidad de la estructura. Este comportamiento puede entenderse si se analizan todos los términos de confinamiento, tanto los estructurales, como los que se deben al campo magnético; los cuales están representados en las ecuaciones (3.4) y (5.1). En primer lugar se tiene un potencial centrifugal ($\sim m^2/r^2$) debido a la rotación del electrón alrededor el eje de la estructura, este potencial trata de llevar los estados electrónicos hacia la base del tubo cuando se incrementa el momento angular, ya que crece con el cuadrado del número cuántico m y decrece con el inverso del cuadrado de la variable radial; por otra parte, gracias a la conicidad, se tiene el potencial de curvatura ($\sim -1/r^2$), analizado en la sección 5.1, el cual decrece con el cuadrado de la variable radial al igual que el centrifugal, pero contrario a este, pues es atractivo, lo cual hace que dichos estados traten de ubicarse en el extremo superior. La interacción del electrón con el campo magnético genera un par de términos, el término diamagnético ($\sim B^2 r^2$) y el paramagnético ($\sim mB$). El término diamagnético tiene un efecto de confinamiento central de tipo parabólico respecto a la intensidad del campo y a la variable radial, mientras el paramagnético presenta una dependencia lineal tanto del

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

campo magnético, como del momento angular del electrón, por lo que este término es el que rompe el degeneramiento en la energía respecto al número cuántico magnético m .

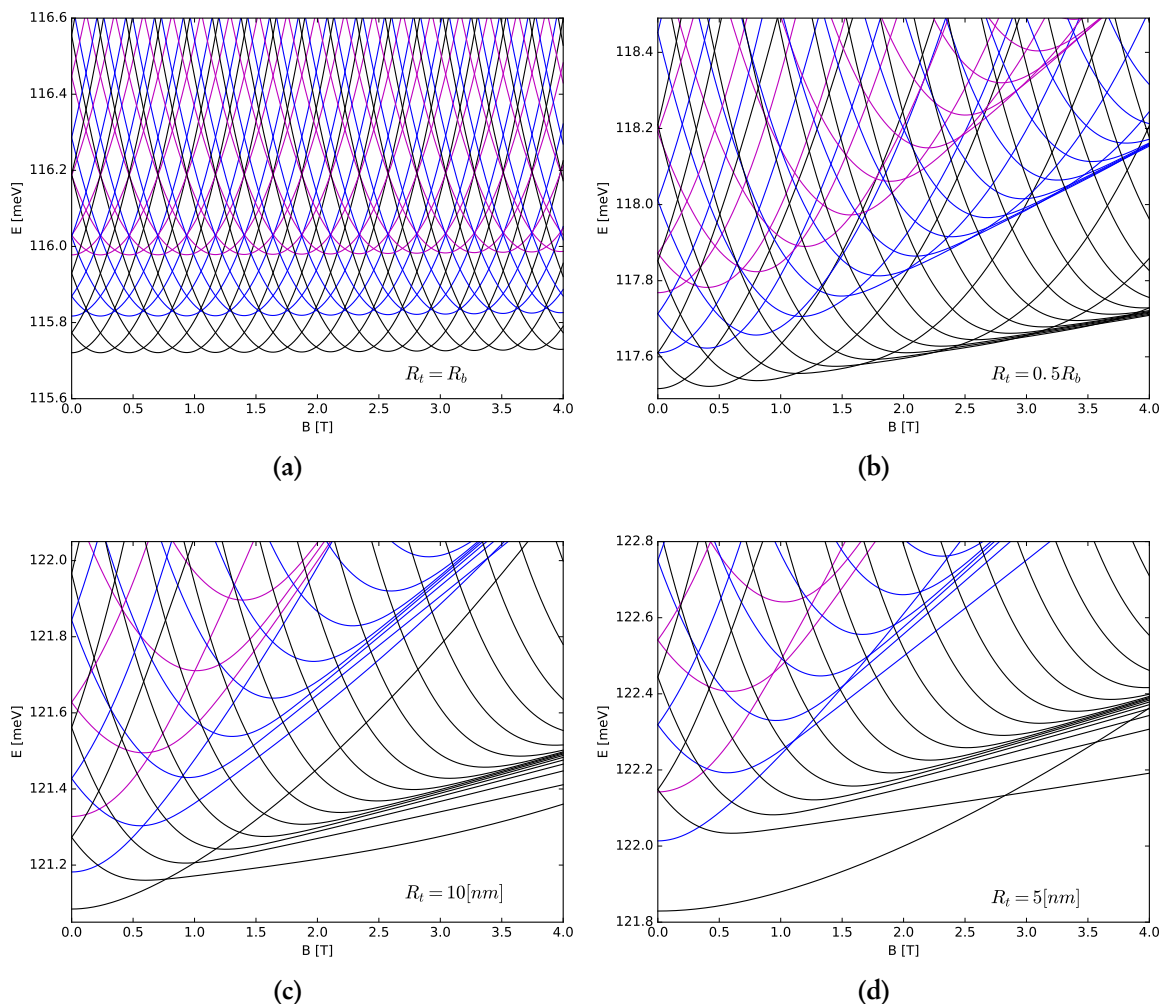


Figura 11. Energías de un electrón en un nanotubo cónico delgado, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para cuatro valores de radio medio superior R_t .

A pesar de tener una compleja superposición de efectos de confinamiento, se puede observar lo siguiente: cuando el electrón se encuentra en un estado con un número cuántico $m < 0$, al comenzar a aplicar el campo magnético, ocurre un descenso en la energía debido al efecto paramagnético que domina inicialmente; a medida que la intensidad de campo se incrementa, el término diamagnético crece hasta que llega a ser igual al paramagnético, donde a partir de ese punto la energía comienza a aumentar. Para el caso del tubo cilíndrico estos mínimos en la energía, tienen todos el mismo valor, dado que el radio no tiene opción de variar y por lo tanto no existe pozo de potencial debido a

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

la curvatura. Ahora para el caso de un nanotubo cónico se tiene que el radio de giro del electrón puede variar si este se desplaza a lo largo del tubo, dando lugar a la existencia del potencial de curvatura que atraerá al portador de carga hacia el borde superior de la estructura, donde el radio de giro es menor, generando un incremento en la energía cinética rotacional; entonces, gracias al efecto de estos potenciales que dependen del radio, cuando se incremente la intensidad de campo magnético, el mínimo en la energía para un $m < 0$ dado estará por encima del mínimo del estado con número cuántico orbital anterior, esto es $m + 1$. Así mismo, dado que el término diamagnético varía con el cuadrado de la variable radial, en este caso, al verse reducido el valor del radio de giro del electrón, se requerirá un campo magnético mayor para obtener la misma energía diamagnética que permita alcanzar el mínimo en la curva de energía correspondiente a cada m , tal como se aprecia en el gráfico 11b; de igual manera, se observa una pérdida de periodicidad, pues en este caso la separación entre los puntos de transición de momentum angular se va incrementando gradualmente a medida que la intensidad del campo crece, lo cual es consecuencia del arrastre, debido al término diamagnético, que sufre el electrón hacia la parte superior del cono para lo cual puede verse en las curvas de densidad de probabilidad electrónica en la figura 12.

Un hecho notable en la curva de energía correspondiente al estado base de la figura 11b es la desaparición casi total del comportamiento oscilante en la energía para valores de $m < -3$. Se observa cómo para valores de campo magnético superiores a $1,5[T]$, la energía del estado base crece monótonamente y casi de forma lineal. Este rasgo está ligado a la morfología cónica del tubo, pues para el caso de la estructura cilíndrica, al igual que para anillos cuánticos, tal comportamiento no tiene lugar. Respecto a lo anterior puede decirse que el efecto atractivo de la curvatura sumado al efecto de confinamiento diamagnético para $B \geq 1,5[T]$ logran retener al electrón muy cerca del borde superior de la estructura, y cuando ocurre una transición en el momentum angular, esto se reflejará en el término centrífugo como un aumento en la energía cinética, ya que el radio de giro no sufrirá un incremento notable debido al fuerte confinamiento central; en otras palabras, la acción del término centrífugo no es tan fuerte como para campos bajos y por ende, el máximo de densidad de probabilidad electrónica en términos espaciales, no presenta un corrimiento tan notablemente como sí lo hace para valores de campo menores a $1,5[T]$. Por otro lado, en esta misma figura, llama la atención que al incrementarse la intensidad del campo magnético se observa la formación de niveles de tipo Landau para los diferentes grupos de niveles de energía, donde la transición de momento angular está acompañada por una débil división entre los estados rotacionales, de tal forma que se encuentran cuasi degenerados, siendo así que las envolventes de los estados más bajos para cada grupo, además de tener un comportamiento lineal y estar separadas cierta distancia, presentan pendientes que dependen proporcionalmente de los valores de las energías de los movimientos vibracionales longitudinal y radial, lo cual muestra el dominio del confinamiento magnético sobre el confinamiento estructural.

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

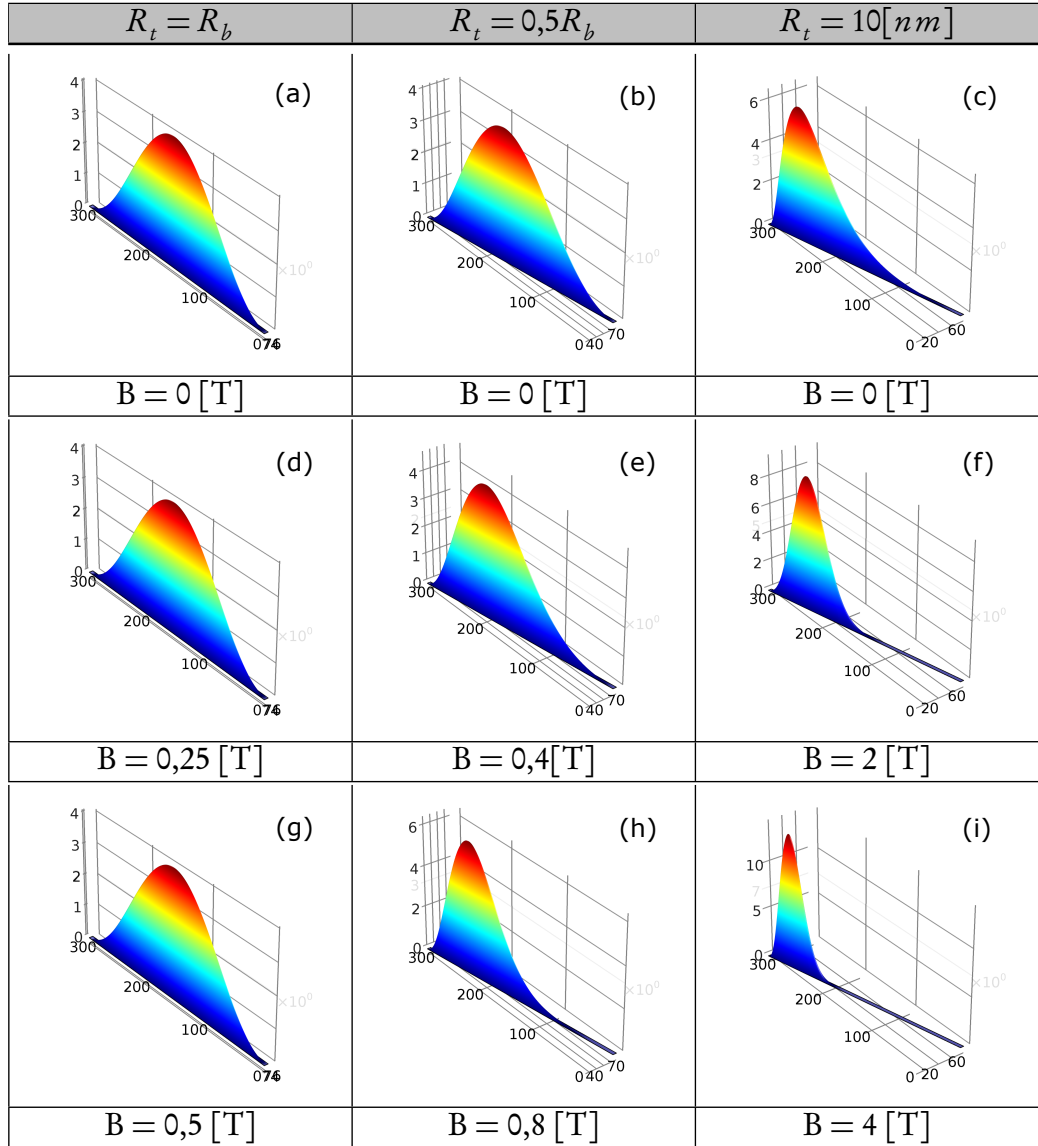


Figura 12. Densidad de probabilidad electrónica del estado base para diferentes valores de radio medio superior R_t y campo magnético B .

Para el caso de un nanotubo con $R_t = 10[nm]$ para el estado base, la figura 11c evidencia un desacople entre dos modos rotacionales, uno para campos magnéticos débiles, esto es $B < 1[T]$, en el cual el valor máximo de la probabilidad electrónica se encuentra entre radios de 20 y 30 [nm], como se observa en los gráficos (c) y (f) de la figura 12. De la misma forma, la figura 11c refleja esto en el hecho de que el campo magnético necesario para tener la primera transición del momentum angular de $m = 0$ a $m = -1$ es de $B \approx 0,77[T]$, lo cual corresponde al caso de un electrón confinado en un anillo delgado de radio medio $\sim 30[nm]$. Para campos magnéticos superiores a $1[T]$, se observa que las transiciones del momentum angular se distancian notablemente respecto al caso

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

de campos magnéticos débiles y pareciera que los conjuntos de estados de diferentes colores tienden a degenerarse en estados que crecen linealmente con el campo, tal como para el caso de $R_t = 0,5R_b$, nuevamente se observa la tendencia a formarse estados tipo Landau, lo cual puede asociarse con la aparición de una simetría oculta inducida por el campo magnético sobre la estructura cónica. Este cambio en el comportamiento de la estructura espectral se debe al efecto de confinamiento centrípeto que impone el término diamagnético, el cual lleva al electrón a estar rotando muy cerca del borde superior del nanotubo, como si estuviera en un anillo cuántico muy delgado de radio medio cercano a los $10[nm]$, tal como lo confirma la densidad de probabilidad electrónica en la gráfica (i) de la figura 12.

Por último se tiene el caso de un tubo con $R_t = 5[nm]$ en la gráfica 11d, en la cual se ve cómo el espectro de energía muestra un comportamiento muy similar al caso anterior, con la principal diferencia de necesitarse campos magnéticos mayores para observar las transiciones del momentum angular en la energía del estado base, lo cual es consecuencia del fuerte confinamiento geométrico que mantiene al electrón muy cerca del borde superior de la estructura.

Cabe resaltar que para las gráficas de las densidades de probabilidad electrónica mostradas en la figura 12, se observa también que la transición de estados con diferentes números cuánticos m , conllevan a un corrimiento en la densidad de probabilidad del electrón, de un punto bastante arriba del nanotubo a uno cercano a la base; por ejemplo, comparando la figura 12c para $m = 0$, con la figura 12f para $m = -1$, se observa que la densidad de probabilidad para $m = -1$ se encuentra un poco más abajo que para $m = 0$, inclusive si estas dos pertenecen al estado base del electrón en el nanotubo cónico; esto se puede explicar si se tiene en cuenta el efecto debido a la existencia del potencial centrifugal que actúa sobre el electrón cuando $m \neq 0$, pues éste lo ubica inicialmente cerca a la base, y luego, para ese m fijo, por efecto del potencial centrípeto ($\sim B^2 r^2$), al aumentar el campo magnético, la densidad de probabilidad del electrón sube por el nanotubo; como se observa en las figuras 12f y 12i; así, el efecto neto sobre el estado base es un movimiento similar al oscilatorio de la densidad de probabilidad, con respecto a la variación del número cuántico m .

Por otro lado, respecto a los dos primeros estados excitados representados por las curvas de color en la figura 11, se observa que estos presentan un comportamiento congruente con el estado base (negro), pero con mínimos de parábola más pronunciados, es decir, el comportamiento lineal se observa para valores de m mayores; donde además, comparando el comportamiento de los estados del electrón para $B = 0[T]$, se tiene que a medida que aumenta la conicidad del tubo, los estados representados por color, van acercándose más al valor de energía del estado base; siendo así que para el caso de $R_t = 5[nm]$ mostrado en la figura 11d, el estado correspondiente al tercer autovalor de $m = 0$ (color magenta), se encontrará entre los cuatro primeros estados de este sistema.

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

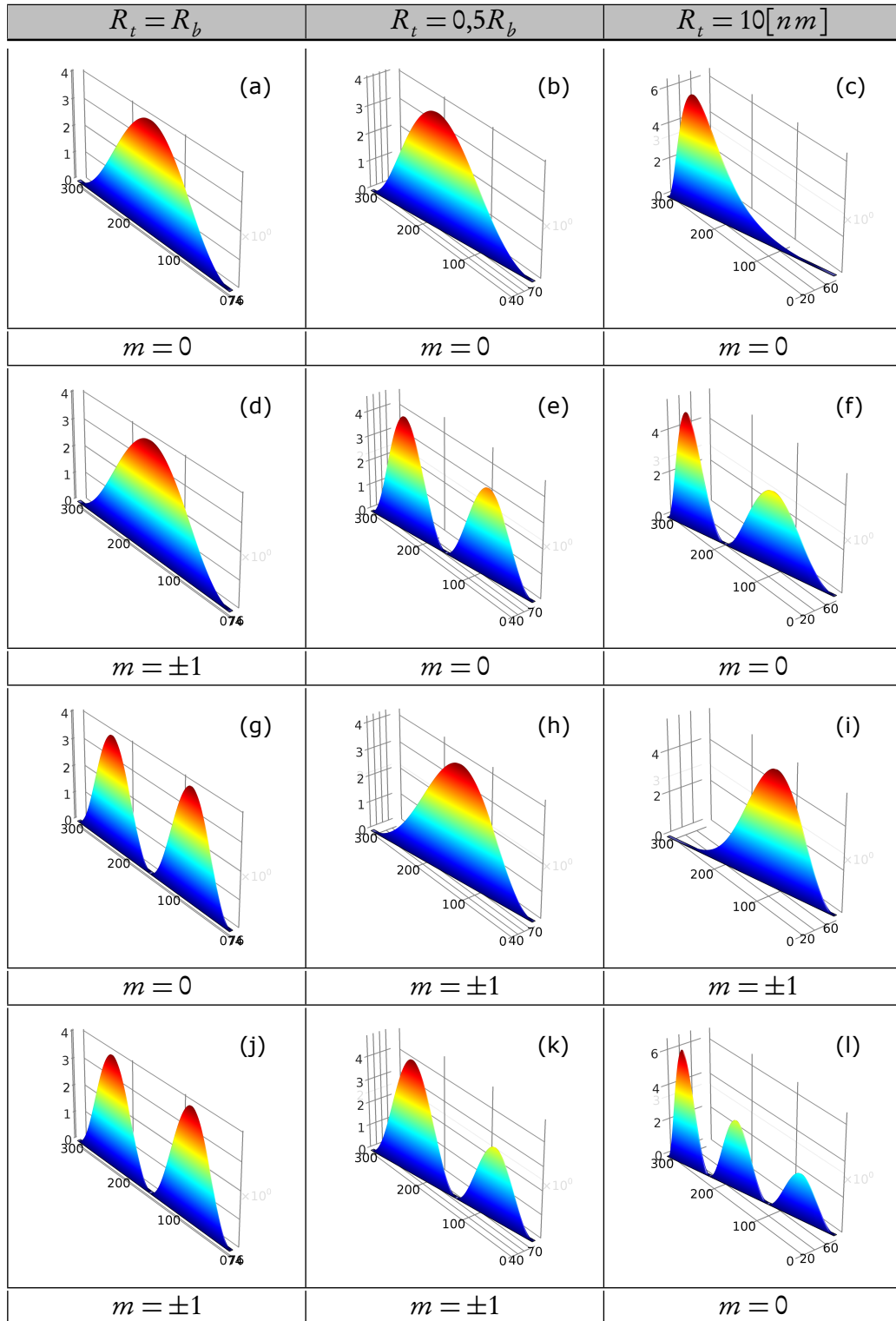


Figura 13. Densidades de probabilidad electrónica de los primeros estados de tres valores de radio medio superior R_t , para campo magnético $B = 0[T]$.

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

En la figura 13, se representan las densidades de probabilidad para los primeros estados electrónicos de nanotubos con diferente conicidad y con campo magnético $B = 0[T]$, en donde se ilustra el comportamiento anteriormente mencionado y además, se observa que los segundos y terceros eigenvalores de cada número cuántico m poseen dos y tres máximos respectivamente; a partir de ello, se puede comparar lo obtenido en este trabajo, con la gráfica 6 de las densidades de probabilidad para un electrón en una superficie de un cono truncado, que corresponde a un resultado analítico; la cual muestra los tres primeros estados para un mismo valor de m y evidencia un aumento del número de máximos, para los cuales se tiene que el máximo global siempre se encuentra cerca a la parte superior del tubo y que en comparación con el estado base, el máximo global de los otros estará por encima, como se observa también en las gráficas c,f y l de la figura 13.

Otro aspecto interesante de los nanotubos cónicos, es que así como su grado de conicidad produce cambios significativos en sus propiedades electrónicas, del mismo modo genera una variación sobre las propiedades magnéticas de esta estructura. De esta forma, con el propósito de analizar el efecto del grado de conicidad de la nanoestructura sobre la magnetización, se calculó el momento magnético dipolar del estado base respecto a la intensidad del campo magnético aplicado, para los casos mostrados en la figura 11, mediante la expresión: $M = \frac{dE_0}{dB}$, donde E_0 es la energía del estado base del sistema.

En la figura 14a se muestra la dependencia del momento magnético dipolar respecto a la intensidad del campo magnético aplicado para el caso de un nanotubo cilíndrico de radio medio igual a $75[nm]$; dicha dependencia es oscilatoria y periódica debido a las oscilaciones Aharonov-Bohm que presenta el estado base de la energía. Para el caso de un nanotubo cónico, en las figuras 14b, 14c y 14d se observa cómo el momento dipolar magnético exhibe un comportamiento muy diferente, pues aunque para valores bajos de campo magnético se alcanzan a tener oscilaciones cuando $R_t = 0,5R_b$, cierto es que terminan extinguiéndose y el momento dipolar tiende a estabilizarse en un valor, que está relacionado con la pendiente de la línea recta envolvente del estado base; mientras que para el caso cuando $R_t = 10[nm]$ y $R_t = 5[nm]$, no se tienen oscilaciones. Estos dos últimos casos, se observan en las figuras 14c y 14d y puede concluirse que a mayor conicidad del tubo, el momento magnético exhibe un comportamiento bastante peculiar, ya que inicialmente crece junto con el campo magnético, hasta que para un valor de campo dado, que llamaremos “campo magnético de caída”, el momento dipolar magnético cae abruptamente, aproximadamente dos terceras partes de su valor máximo alcanzado. Es de resaltar que el valor del campo magnético de caída es mayor para estructuras con mayor grado de conicidad, esto es $B_c \approx 0,8[T]$ para $R_t = 10[nm]$ y $B_c \approx 2,7[T]$ para $R_t = 5[nm]$. Dado que el momento dipolar magnético está relacionado directamente con las llamadas corrientes persistentes y con la magnetización, entonces este comportamiento puede resultar de gran interés para el diseño de algún dispositivo electrónico, como por ejemplo un nanotransistor controlado no por campos eléctricos sino magnéticos, o en el diseño de nuevos materiales con propiedades magnéticas no observadas en la naturaleza.

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

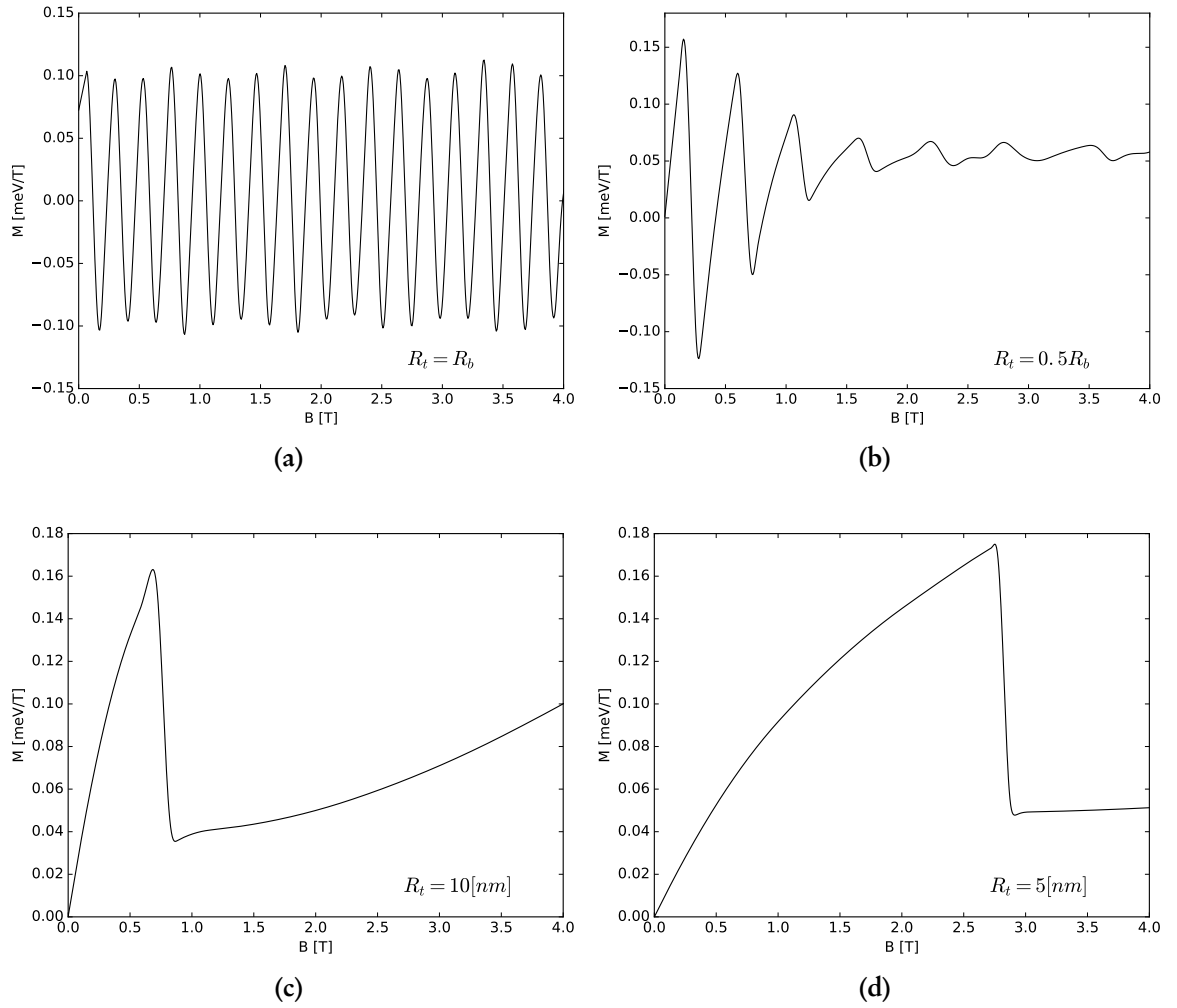


Figura 14. Momento magnético dipolar M en función del campo magnético externo B para nanotubos con cuatro radios superiores R_t .

Efecto del campo eléctrico

Con el ánimo de comprender el efecto que tiene un campo eléctrico, aplicado simultáneamente con el campo magnético, sobre algunas propiedades de un nanotubo cónico, se graficó el espectro energético del sistema para el caso de $R_t = 10[nm]$, para cuatro valores diferentes de campo eléctrico, dos aplicados en el mismo sentido que el campo magnético y dos en sentido contrario (ver figura 15).

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

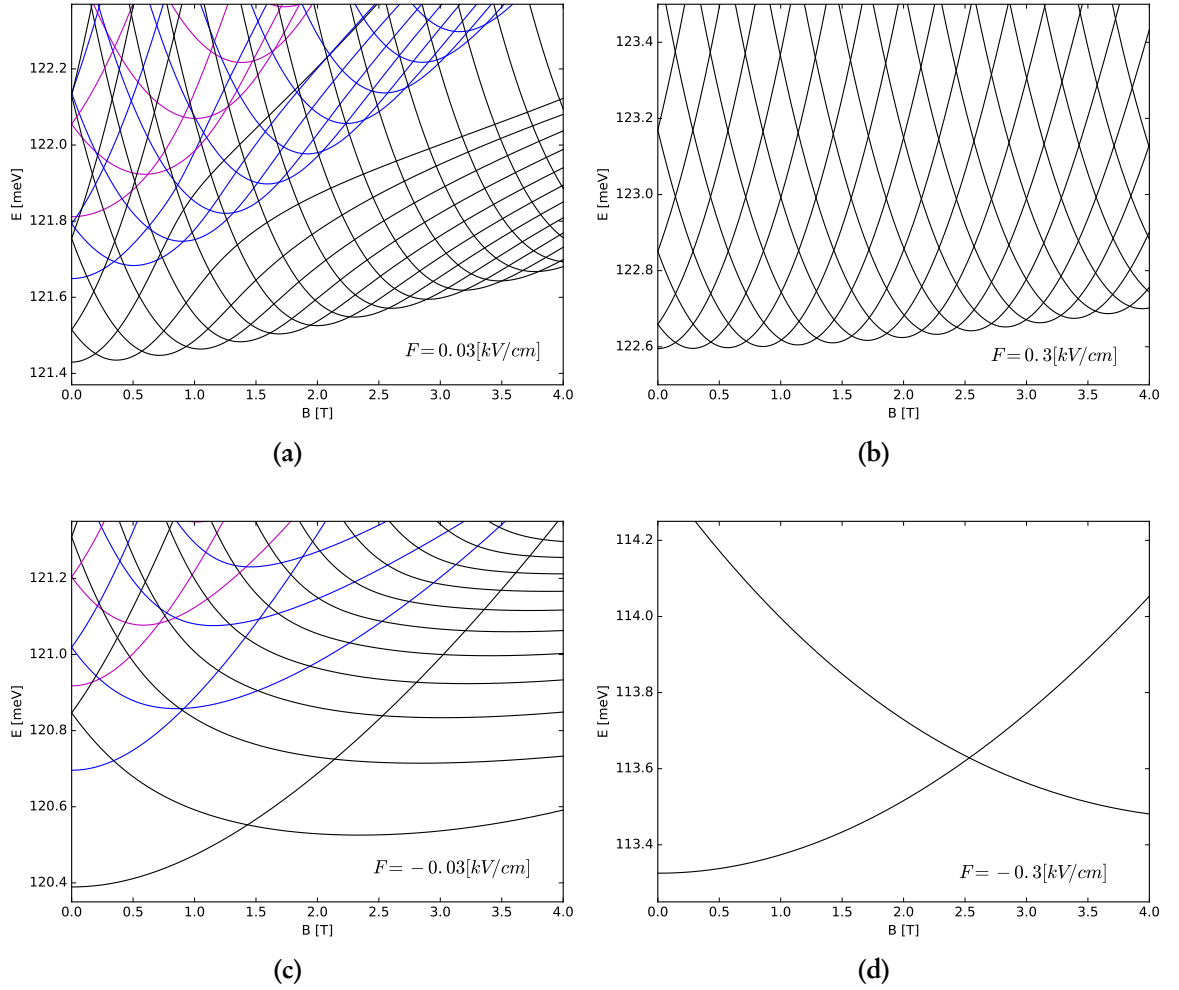


Figura 15. Energías de un electrón en un nanotubo cónico con radio superior $R_t = 10$ [nm], en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para dos valores diferentes de campo eléctrico F en el mismo sentido de B a), b) y en sentido opuesto c), d).

La aplicación de un campo eléctrico en la dirección positiva del eje z produce un incremento en el confinamiento longitudinal, lo cual dependiendo de su intensidad hará que el electrón posea una mayor probabilidad de localizarse en mayor o menor grado cerca del extremo inferior del nanotubo, como se observa en las figuras 16a y 16d. Este confinamiento eléctrico adicional reestructura completamente el espectro de energía, lo cual es evidente cuando se compara los gráficos 15a y 15b con el gráfico 11c. Estos gráficos ponen al descubierto que el electrón se ubica fuertemente en la cercanía de la base de la estructura, pues reaparecen las oscilaciones en la energía del estado base, las cuales se asemejan a las del nanotubo cilíndrico de la figura 11a. Se observa cómo para el caso de mayor intensidad de campo eléctrico en la figura 15b, la semejanza es casi completa, lo cual era de esperarse pues el portador en este caso se encuentra localizado fuertemente

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

en una región anular de radio medio muy cercano a R_b . Una diferencia que vale la pena mencionar es el hecho de que en este caso, a diferencia del caso del tubo cilíndrico, no se observan los grupos de estados que están asociados con niveles de estados transversales superiores, pues debido al confinamiento eléctrico, estos niveles han sido desplazados por encima del rango de la gráfica.

Otro comportamiento interesante que aparece, es la reducción del distanciamiento entre las transiciones de niveles de energía con momentum angular diferente a medida que se incrementa la intensidad del campo magnético. Esto es contrario a lo que se observó en ausencia de campo eléctrico, pues en ese caso la tendencia fue a aumentar el distanciamiento entre transiciones con diferente momentum angular. La explicación a este peculiar hecho viene de lo siguiente: al estar el electrón en la vecindad de la base del tubo por efecto del campo eléctrico, entonces para pequeños incrementos en el campo magnético tienen lugar saltos en el momentum angular. Si bien el incremento del campo magnético produce un aumento en el confinamiento hacia el centro de la estructura debido al efecto diamagnético, también se tiene que estos saltos en el momentum angular incrementarán la energía centrífuga y por lo tanto el electrón será empujado hacia la base; de la lucha entre estos dos efectos resulta dominante el último, pues las transiciones del momentum angular se dan con incrementos tan pequeños del campo magnético ($\Delta B \approx 0,3[T]$) que para $B = 4[T]$ se tiene $m = -14$, lo que representa un incremento en la energía centrífuga de casi 200 veces frente a la diamagnética de aproximadamente 16 veces. En las densidades de probabilidad electrónica mostradas en las figuras 16b, 16c, 16e y 16f se evidencia claramente este comportamiento.

Ahora para el caso cuando se aplica un campo eléctrico en dirección negativa del eje z, las curvas de las gráficas 15c y 15d en correspondencia con las funciones de densidad de probabilidad (ver figura 16 de la g a la l) muestran que electrón ahora posee mayor probabilidad de ubicarse en el tope superior del tubo y al incrementarse la intensidad del campo eléctrico, se observa una transformación del espectro típico del nanotubo cónico al espectro de un nanoanillo de radio cercano a R_t .

Con el objeto de observar mejor el comportamiento del electrón bajo campos eléctrico y magnético, se muestra en la figura 17 el momento dipolar magnético en función de la intensidad de campo magnético, para una temperatura de $0[K]$, esto es considerando sólo el aporte del estado base.

5.2. MODELO NANOTUBO CÓNICO DELGADO

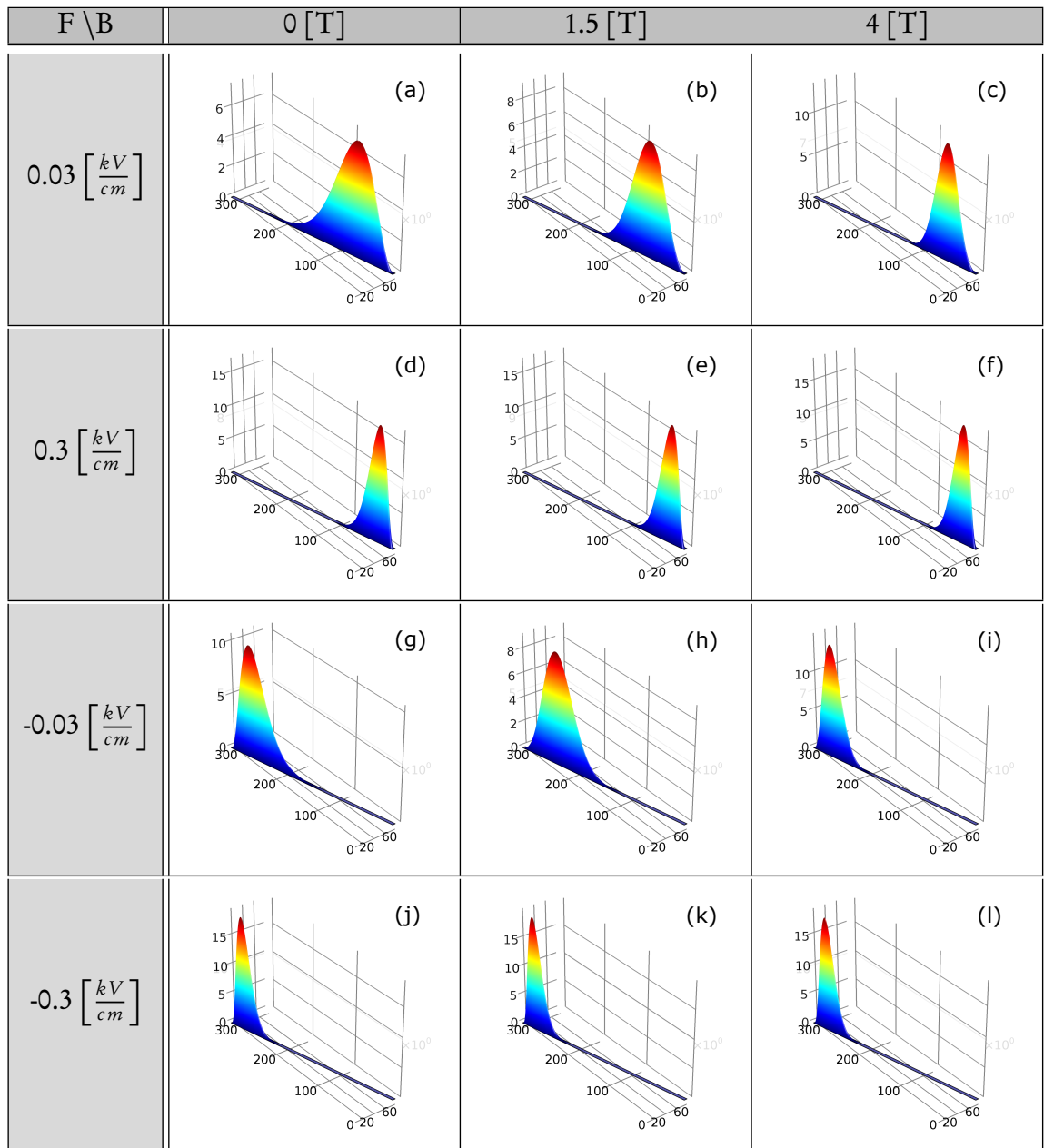


Figura 16. Densidad de probabilidad para el estado más bajo y diferentes valores de radio superior R_t , campo magnético B y campo eléctrico F, para el nanotubo delgado.

En estos gráficos se observa cómo con la aplicación del campo eléctrico se transforma el carácter no oscilatorio del momento dipolar magnético del nanotubo cónico en un modo oscilatorio de tipo diente de sierra, el cual corresponde con el exhibido por anillos cuánticos perfectamente circulares y delgados. Este hecho resulta sumamente importante, ya que deja al descubierto que en nanotubos cónicos es posible obtener una reestructuración de las propiedades magnéticas mediante la aplicación de campos eléctricos, lo cual es

5.3. MODELO NANOTUBO CÓNICO DE ESPESOR UNIFORME

evidencia de un efecto de tipo magnetoeléctrico.

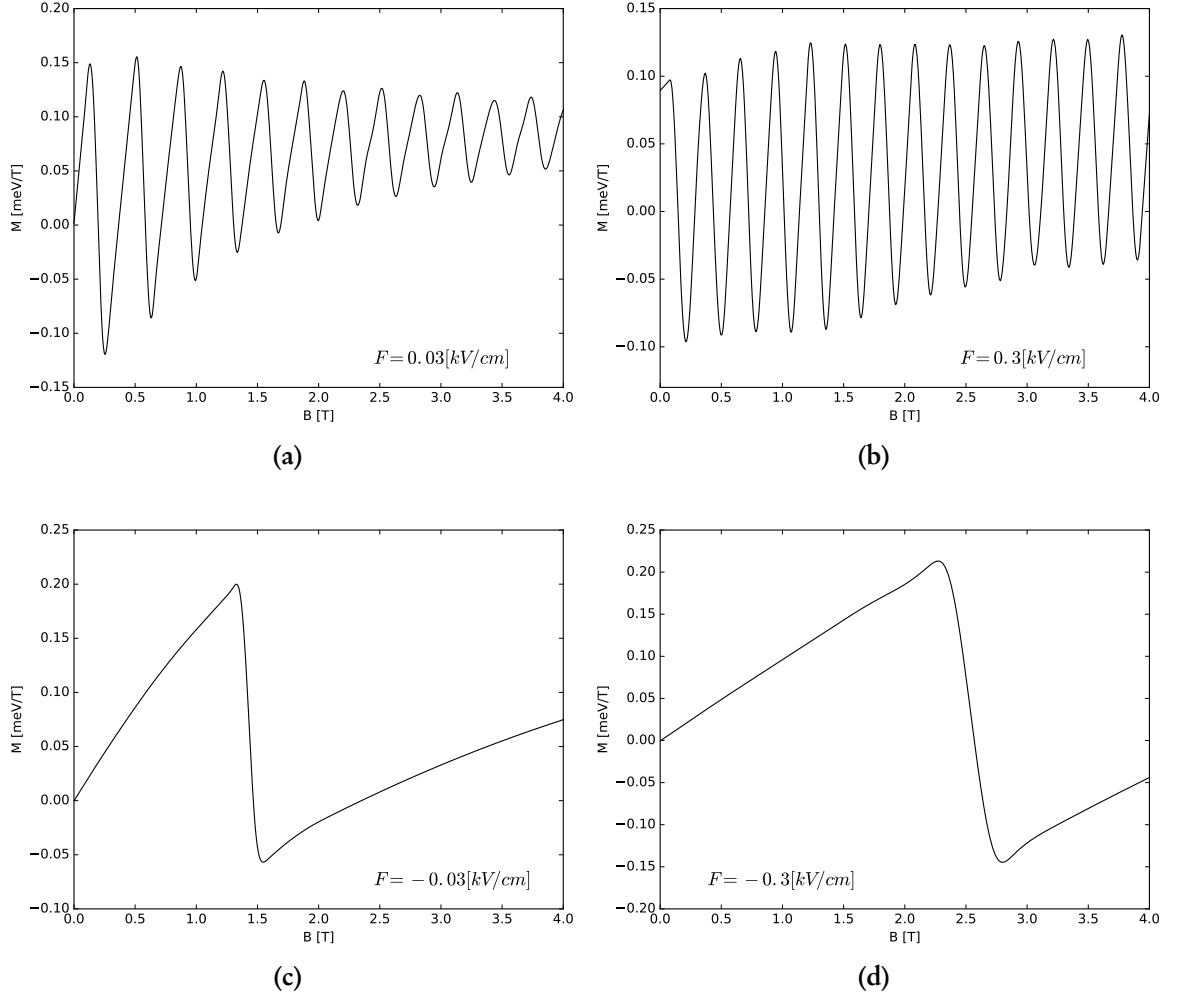


Figura 17. Momento magnético dipolar M , de un nanotubo con $R_t = 10 [nm]$, en función del campo magnético externo B para dos valores diferentes de campo eléctrico F en el mismo sentido de B a), b) y en sentido opuesto c), d).

5.3. Modelo nanotubo cónico de espesor uniforme

Contrario a la sección anterior, se ha denominado nanotubo de ancho uniforme a aquel con grosor $w_t = w_b = w > 5 [nm]$; para este modelo, se optó por considerar el radio superior medio del nanotubo como $R_t = 0,5R_b$. En la figura 18 se muestra el espectro energético del estado base en función del campo magnético, para dos anchos del tubo cónico siendo el mayor grosor un 26,7% del radio medio de la base. Se observa en esta figura, que en comparación con el espectro para el nanotubo delgado; al doblar el tamaño

5.4. MODELO NANOTUBO CÓNICO DE ESPESOR NO UNIFORME

del ancho, las energías del electrón son aproximadamente cuatro veces menor; lo que quiere decir que siguen una proporcionalidad inversa con el cuadrado del grosor del tubo.

Otra particularidad de este caso radica en el aumento de la pendiente de la recta del estado base, pues para un ancho de 20 [nm], se tiene una pendiente ligeramente mayor que para lo que se observa en la figura 11b con $w = 5$ [nm].

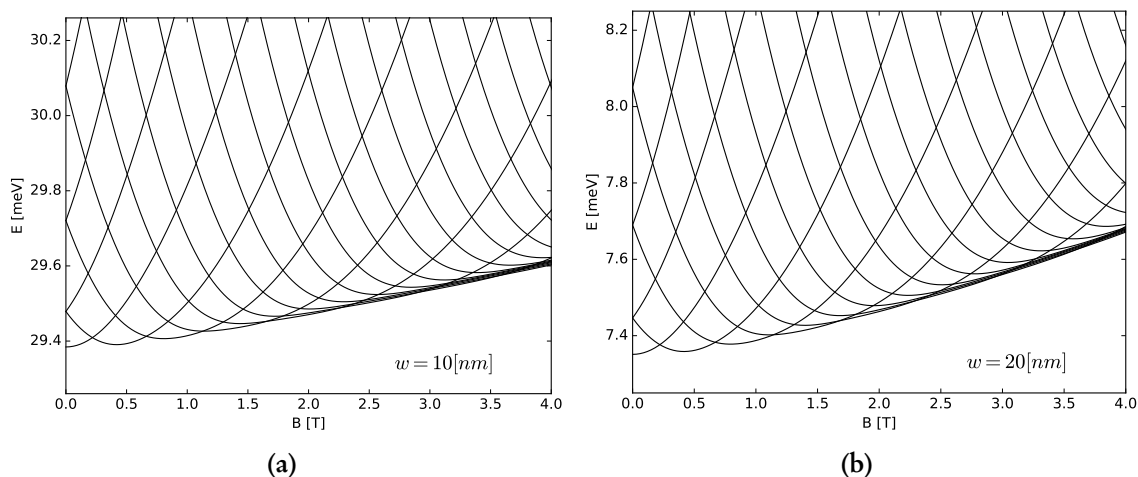


Figura 18. Energías de un electrón en un nanotubo cónico de ancho uniforme w con radio superior $R_t = 0,5R_b$ en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para dos valores de ancho.

5.4. Modelo nanotubo cónico de espesor no uniforme

Para esta sección final, se quiso investigar los cambios en el espectro energético del electrón para un nanotubo cónico de espesor no uniforme ($w_b \neq w_t$); donde el ancho del nanotubo es tal que el espesor de la base w_b es mayor que el de la parte superior del tubo w_t , siendo este último constante durante el análisis y con un valor de $w_t = 5$ [nm].

Efecto del campo magnético

Primero se estudió el caso de sólo campo magnético, para un radio medio superior $R_t = 0,5R_b$. Se obtuvieron las gráficas correspondientes a dos anchos de la base w_b , como se observa en la figura 19, en estas se tiene que el comportamiento de la pendiente aumenta con el incremento del grosor, como en el caso de nanotubo de ancho uniforme, pues la causa de que la envolvente del estado base para el nanotubo de mayor grosor w_b muestre un crecimiento con el incremento del campo magnético, el cual no es lineal como para el tubo delgado, se debe a que al incrementarse el confinamiento diamagnético el electrón será confinado más hacia la pared interna de la estructura, tal como ocurre para anillos

5.4. MODELO NANOTUBO CÓNICO DE ESPESOR NO UNIFORME

cuánticos de ancho considerable; de esta forma manteniéndose siempre muy cerca de la base, así el espectro observado corresponde al de anillos con radio medio de $72,5[nm]$ y $71,2[nm]$ para las figuras 19a y 19b respectivamente.

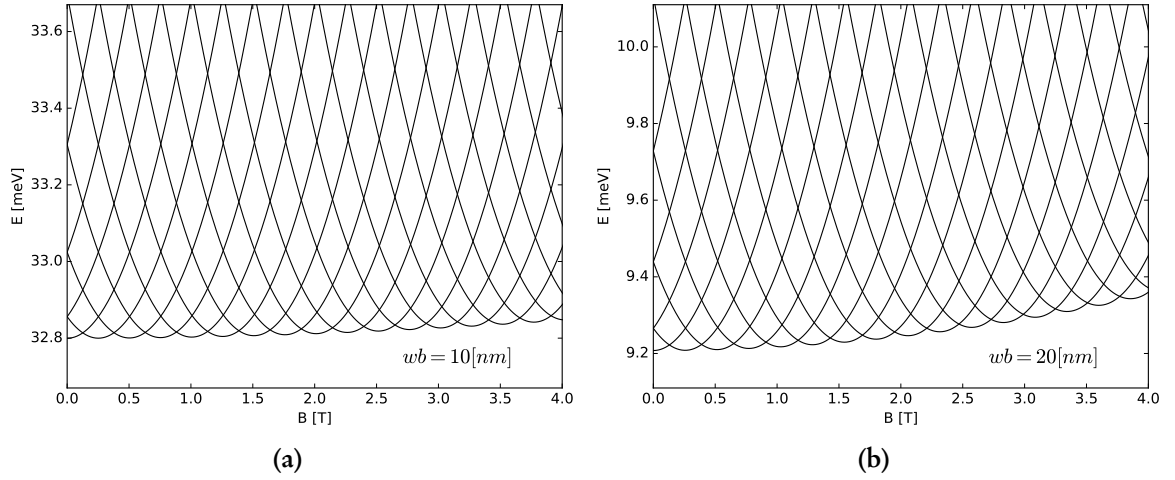


Figura 19. Energías de un electrón en un nanotubo cónico con $R_t = 0,5R_b$ y $w_t = 5[nm]$, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para dos valores de ancho de la base w_b .

Efecto del campo eléctrico

Por último, se estudió el efecto del campo eléctrico sobre el espectro de energías del electrón; principalmente para campos eléctricos que llevaran el máximo de la densidad de probabilidad del electrón hacia el centro de la estructura, teniendo en cuenta la conicidad del nanotubo y el ancho de la base de éste.

Primero, se graficó el espectro energético para dos valores de radio superior R_t con igual ancho de la base $w_b = 10[nm]$. En las gráficas 20a y 20b se observa que entre mayor conicidad, es necesario un campo eléctrico un poco mayor para que la densidad de probabilidad del electrón se encuentre en el centro de la estructura; de la misma forma se tiene que la separación entre los mínimos así como la pendiente del estado base, aumenta para el caso de mayor conicidad.

Luego, para un grosor mayor y un $R_t = 0,5R_b$ fijo, se realizaron dos gráficas con campos eléctricos de la misma magnitud y en direcciones contrarias (figuras 20c y 20d). En este caso, el valor del campo eléctrico negativo utilizado, proporcionó que el pico de la densidad de probabilidad se encontrara a una altura de $z = 140[nm]$, es decir un radio medio de $57,5[nm]$, y el campo eléctrico positivo, lo ubicó muy cercano a la base, a un radio medio aproximadamente de $72,5[nm]$; lo cual, conlleva a la existencia de un número mayor de oscilaciones del estado base para el caso de campo eléctrico positivo además de una pendiente un poco mayor pues el ancho aumenta cerca a la base del nanotubo.

5.4. MODELO NANOTUBO CÓNICO DE ESPESOR NO UNIFORME

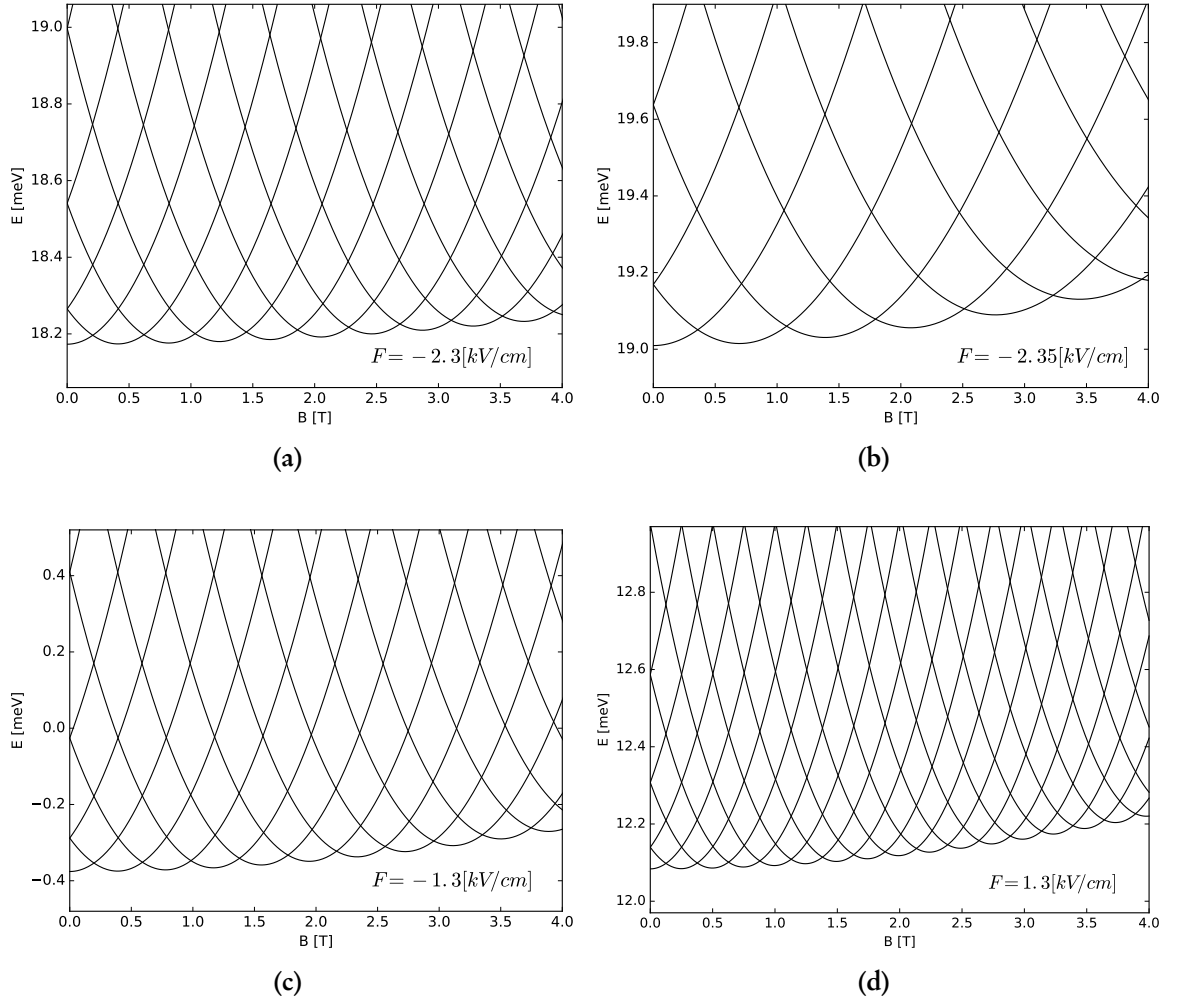


Figura 20. Energías de un electrón en un nanotubo cónico con $w_t = 5[nm]$, en función de un campo magnético B en la dirección de crecimiento, para valores diferentes de campo eléctrico F en sentido contrario de B . Con a) $w_b = 10[nm]$ y $R_t = 0,5R_b$, b) $w_b = 10[nm]$ y $R_t = 10[nm]$ y c), d) $w_b = 20[nm]$ y $R_t = 0,5R_b$.

Finalmente, comparando las figuras 20a y 20c, para el valor del campo eléctrico negativo $F = -1,3[kV/cm]$ con un ancho igual a la primera figura mencionada, se obtiene que el electrón se encuentra a una altura de $z = 60[nm]$, lo cual es casi la mitad de la altura obtenida para el doble del ancho $w_b = 20[nm]$. Además se observa que las energías en el caso de mayor ancho, no sólo toma valores positivos como en todos los casos vistos hasta ahora, sino también negativos, lo que quiere decir que el potencial de confinamiento ha sido modificado notablemente por ambos efectos (el ancho de la base y el campo eléctrico negativo).

Conclusiones

En este trabajo de investigación se hizo uso del método de elementos finitos para resolver la ecuación de Schrödinger estacionaria bajo la aproximación de masa efectiva, que describe el comportamiento de un electrón ligado a un nanotubo cónico con espesor finito y que se encuentra bajo la acción de campos eléctrico y magnético. En general, se estudiaron los efectos de la introducción de dichos campos y del confinamiento estructural, sobre el espectro energético y el momento dipolar magnético del electrón.

Gracias a la capacidad de este método numérico para modelar ecuaciones diferenciales de sistemas con geometría compleja, se logró obtener resultados acordes con los antecedentes teóricos relacionados a la existencia de un potencial que depende de la curvatura de la superficie en la cual se encuentra ligada la partícula cuántica; esto sin necesidad de la introducción en forma explícita de dicho potencial, sino como consecuencia de la aplicación de las condiciones de frontera que tienen en cuenta la geometría del sistema.

Se encontró que las oscilaciones del estado base dependen fuertemente de la conicidad del nanotubo, convirtiéndolas en no periódicas y con tendencia lineal; además de dar lugar a la aparición de niveles de tipo Landau que muestran el dominio del confinamiento magnético sobre el estructural. Así mismo, al estudiar la densidad de probabilidad electrónica, se encontró que debido a la superposición de los efectos de confinamiento magnético y estructural, existe un movimiento del electrón a lo largo del tubo, donde para un sólo estado rotacional (número cuántico m fijo), dicho movimiento se traduce

en un corrimiento hacia la parte superior del tubo cónico a medida que aumenta el campo magnético, mientras que para el estado base, donde se observan transiciones de momentum angular, ocurre un comportamiento de la densidad de probabilidad de tipo oscilatorio.

Al mismo tiempo, se obtuvo que en nanotubos cónicos, la introducción de un campo eléctrico en dirección del campo magnético aplicado, conlleva a una reestructuración de las propiedades magnéticas.

Por otro lado, se observó que estas estructuras cónicas de hasta un ancho de aproximadamente el 26.7% del radio medio de la base, muestran el mismo comportamiento en las oscilaciones del estado base obtenidas para nanotubos cónicos delgados, con la diferencia de un aumento en la pendiente debido al espesor del tubo. En contraste, para nanotubos cónicos no uniformes, se observaron oscilaciones típicas de anillos cuánticos de espesor considerable.

Las evidencias anteriores del comportamiento general oscilatorio observado para el espectro energético y el momento dipolar magnético, ponen de manifiesto la potencial aplicación de estas estructuras cónicas en la industria electrónica, para la construcción de dispositivos como nanotransistores controlados por campo magnético en lugar de eléctrico, o en el diseño de nuevos materiales con propiedades magnetoeléctricas.

Bibliografía

- [1] J. Debgupta, R. Devarapalli, S. Rahman, M. V. Shelke, and V. K. Pillai, “Electrochemical preparation of vertically aligned, hollow CdSe nanotubes and their p–n junction hybrids with electrodeposited cu_2o ,” *Nanoscale*, vol. 6, p. 9148, jun 2014.
- [2] M. Zhou, H. Zhu, X. Wang, Y. Xu, Y. Tao, S. Hark, X. Xiao, and Q. Li, “CdSe nanotube arrays on ITO via aligned ZnO nanorods templating,” *Chemistry of Materials*, vol. 22, pp. 64–69, jan 2010.
- [3] Q. Shen, L. Jiang, J. Miao, W. Hou, and J.-J. Zhu, “Sonochemical synthesis of CdSe nanotubes,” *Chemical Communications*, no. 14, p. 1683, 2008.
- [4] H. Lin, H.-Y. Cheung, F. Xiu, F. Wang, S. Yip, N. Han, T. Hung, J. Zhou, J. C. Ho, and C.-Y. Wong, “Developing controllable anisotropic wet etching to achieve silicon nanorods, nanopencils and nanocones for efficient photon trapping,” *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 1, no. 34, p. 9942, 2013.
- [5] I. Suemune, H. Nakajima, X. Liu, S. Odashima, T. Asano, H. Iijima, J.-H. Huh, Y. Idutsu, H. Sasakura, and H. Kumano, “Metal-coated semiconductor nanostructures and simulation of photon extraction and coupling to optical fibers for a solid-state single-photon source,” *Nanotechnology*, vol. 24, p. 455205, oct 2013.
- [6] Q. Qin and R. Zhang, “A novel conical structure of polyaniline nanotubes synthesized on ITO-PET conducting substrate by electrochemical method,” *Electrochimica Acta*, vol. 89, pp. 726–731, feb 2013.
- [7] L. Du, Y.-L. Wang, G.-H. Liang, G.-Z. Kang, X.-J. Liu, and H.-S. Zong, “Curvature-induced bound states and coherent electron transport on the surface of a truncated cone,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 76, pp. 28–34, feb 2016.
- [8] COMSOL Inc., “The finite element method (fem).” En Línea. URL: <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>.
- [9] C. S. Lent, “Edge states in a circular quantum dot,” *Physical Review B*, vol. 43, pp. 4179–4186, feb 1991.
- [10] F. J. Owens and C. P. Poole, *Introducción a la nanotecnología*. Editorial Reverté, S.A., 2007.
- [11] S. Martin, “Nanostructures in nature.” En línea. URL: <http://www.nmin.org/news-events/spotlights/nanostructures-nature>.

BIBLIOGRAFÍA

- [12] M. Barberoglou, “Laser structuring of water-repellent biomimetic surfaces,” *SPIE Newsroom*, 2009.
- [13] T. Ihn, *Semiconductor Nanostructures*. Oxford University Press, 2009.
- [14] T. Steiner, ed., *Semiconductor Nanostructures for Optoelectronic Applications (Artech House Semiconductor Materials and Devices Library)*. Artech House Publishers, 2004.
- [15] V. V. Mitin, D. I. Sementsov, and N. Z. Vagidov, *Quantum Mechanics for Nanostructures*. Cambridge University Press, 2010.
- [16] A. Shik, *Quantum Wells: Physics and Electronics of Two-Dimensional Systems*. WORLD SCIENTIFIC PUB CO INC, 1998.
- [17] Y. Zhang, M. Yu, D. E. Savage, M. G. Lagally, R. H. Blick, and F. Liu, “Effect of surface bonding on semiconductor nanoribbon wiggling structure,” *Applied Physics Letters*, vol. 96, p. 111904, mar 2010.
- [18] G. Yu, L. Chen, and X. Ye, “Electronic and magnetic properties of CdSe nanoribbon: First-principles calculations,” *Physics Letters A*, vol. 379, pp. 41–46, jan 2015.
- [19] R. C. T. da Costa, “Quantum mechanics of a constrained particle,” *Phys. Rev. A*, vol. 23, pp. 1982–1987, Apr 1981.
- [20] L. Du, Y.-L. Wang, G.-H. Liang, G.-Z. Kang, X.-J. Liu, and H.-S. Zong, “Curvature-induced bound states and coherent electron transport on the surface of a truncated cone,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 76, pp. 28–34, feb 2016.
- [21] Q. X. J Arbiol, *Semiconductor Nanowires: Materials, Synthesis, Characterization and Applications*. Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials, Woodhead Publishing, 1 ed., 2015.
- [22] Y. Alivov, H. Funke, and P. Nagpal, “Air-gating and chemical-gating in transistors and sensing devices made from hollow TiO_2 semiconductor nanotubes,” *Nanotechnology*, vol. 26, no. 29, 2015.
- [23] R. Koole, E. Groeneveld, D. Vanmaekelbergh, A. Meijerink, and C. de Mello Donegá, “Size effects on semiconductor nanoparticles,” in *Nanoparticles*, pp. 13–51, Springer Nature, 2014.
- [24] L. Zhao, L. Hu, and X. Fang, “Growth and device application of CdSe nanostructures,” *Advanced Functional Materials*, vol. 22, pp. 1551–1566, feb 2012.
- [25] Tallinn University of Technology, “Techniques for synthesis of nanomaterials (i).” En línea. URL: https://www.ttu.ee/public/m/Mehaanikateaduskond/Instituudid/Materjalitehnika_instituut/MTX9100/Lecture11_Synthesis.pdf.

BIBLIOGRAFÍA

- [26] H.-S. P. Wong, *Carbon Nanotube and Graphene Device Physics*. Cambridge University Press, 2010.
- [27] P. J. Harris, “Solid state growth mechanisms for carbon nanotubes,” *Carbon*, vol. 45, pp. 229–239, feb 2007.
- [28] B. S. DeWitt, “Point transformations in quantum mechanics,” *Physical Review*, vol. 85, pp. 653–661, feb 1952.
- [29] H. Jensen and H. Koppe, “Quantum mechanics with constraints,” *Annals of Physics*, vol. 63, pp. 586–591, apr 1971.
- [30] B. Szafran and F. M. Peeters, “Few-electron eigenstates of concentric double quantum rings,” *Physical Review B*, vol. 72, oct 2005.
- [31] J. H. Marín, W. Gutiérrez, and I. D. Mikhailov, “An exciton trapped by an arbitrary shaped nanoring in a magnetic field,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 210, p. 012045, feb 2010.
- [32] L. Dantas, C. Furtado, and A. S. Netto, “Quantum ring in a rotating frame in the presence of a topological defect,” *Physics Letters A*, vol. 379, pp. 11–15, jan 2015.
- [33] D. Babajanov, D. U. Matrasulov, and R. Egger, “Particle transport in graphene nanoribbon driven by ultrashort pulses,” *The European Physical Journal B*, vol. 87, nov 2014.
- [34] K. Wakabayashi, K. ichi Sasaki, T. Nakanishi, and T. Enoki, “Electronic states of graphene nanoribbons and analytical solutions,” *Science and Technology of Advanced Materials*, vol. 11, p. 054504, oct 2010.
- [35] H. Chen, E. Zhang, K. Zhang, and S. Zhang, “The aharonov–bohm effect in the carbon nanotube ring,” *RSC Adv.*, vol. 5, no. 56, pp. 45551–45557, 2015.
- [36] L. F. G. Russi, H. P. Gutiérrez, Y. F. Santos, and I. D. Mikhailov, “Magnetoexciton in nanotube under external electric field,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 743, p. 012008, aug 2016.
- [37] E. A. Orozco, J. D. Gonzalez, O. S. Duarte, and I. D. Mikhailov, “Effect of magnetic field on off-axis donor binding energy in a nanotube,” *physica status solidi (b)*, vol. 243, pp. 1263–1268, may 2006.
- [38] R. Escorcía, C. Riva, and I. Mikhailov, “Polaronic exciton in quantum wells wires and nanotubes,” *Solid State Communications*, vol. 131, pp. 365–370, aug 2004.
- [39] L. F. Garcia, W. Gutiérrez, and I. D. Mikhailov, “One-electron conical nanotube in external electric and magnetic fields,” *Journal of Nanomaterials*, vol. 2017, pp. 1–12, 2017.

BIBLIOGRAFÍA

- [40] K. Yu-Zhang, D. Z. Guo, J. Mallet, M. Molinari, A. Loualiche, and M. Troyon, “Electrodeposition and detailed characterization of semiconductor nanowires,” in *Nanophotonics for Communication: Materials, Devices, and Systems III* (M. Gerken, N. K. Dhar, A. K. Dutta, and M. S. Islam, eds.), SPIE-Intl Soc Optical Eng, oct 2006.
- [41] J. Q. Hu, Y. Bando, J. H. Zhan, M. Y. Liao, D. Golberg, X. L. Yuan, and T. Sekiguchi, “Single-crystalline nanotubes of IIB-VI semiconductors,” *Applied Physics Letters*, vol. 87, p. 113107, sep 2005.
- [42] P. Villars and K. Cenzual, “ α -cdse (cdse rt hex) crystal structure: Datasheet from "pauling file multinationals edition – 2012" in springer materials.” En línea. Copyright 2016 Springer-Verlag Berlin Heidelberg & Material Phases Data System (MPDS), Switzerland & National Institute for Materials Science (NIMS), Japan. URL: http://materials.springer.com/isp/crystallographic/docs/sd_0533786.
- [43] P. Villars and F. Hulliger, “Cdse rt hex effective mass: Datasheet from "pauling file multinationals edition – 2012" in springer materials.” En línea. Copyright 2016 Springer-Verlag Berlin Heidelberg & Material Phases Data System (MPDS), Switzerland & National Institute for Materials Science (NIMS), Japan. URL: http://materials.springer.com/isp/physical-property/docs/ppp_037719.
- [44] M. Shikakhwa and N. Chair, “Hamiltonian for a particle in a magnetic field on a curved surface in orthogonal curvilinear coordinates,” *Physics Letters A*, vol. 380, pp. 2876–2880, aug 2016.
- [45] COMSOL Inc., “Comsol multiphysics[®] the platform for physics-based modeling and simulation.” En línea. URL: <https://www.comsol.com/comsol-multiphysics>.
- [46] COMSOL Inc., *COMSOL Multiphysics Reference Manual 5.2*, 2015.
- [47] C. Johnson, *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method (Dover Books on Mathematics)*. Dover Publications, 2009.
- [48] G. Nikishkov, “Introduction to the finite element method.” En línea, 2004. Lecture Notes. University of Aizu, Aizu-Wakamatsu 965-8580, Japan. URL: <http://homepages.cae.wisc.edu/~suresh/ME964Website/M964Notes/Notes/introfem.pdf>.
- [49] G. R. Liu and S. S. Quek, *The Finite Element Method*. Elsevier Science & Technology, 2013.
- [50] D. H. Norrie and G. de Vries, *Finite Element Method: Fundamentals and Applications*. Academic Press Inc, 1973.

BIBLIOGRAFÍA

- [51] A. Logg, K.-A. Mardal, and G. Wells, eds., *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- [52] D. W. Trott and M. K. Gobbert, “Finite Element Convergence Studies Using COMSOL 4.0a and LiveLink for MATLAB.” En línea, 2010. Department of Mathematics and Statistics, University of Maryland, Baltimore County. URL: <http://userpages.umbc.edu/~gobbert/papers/TrottGobbertTR2010.pdf>.