

# ESTADOS ENERGÉTICOS DE UN $D_2^+$ CONFINADO EN UN ANILLO CUÁNTICO SEMICONDUCTOR<sup>a</sup>

## $D_2^+$ IMPURITY ENERGY STATES IN SEMICONDUCTOR QUANTUM RING

YEISON MONTES<sup>b</sup>, YODER SUAZA<sup>b</sup>, MARLON RINCÓN FULLA<sup>c</sup>, JAIRO MARÍN<sup>b</sup>

Recibido 13-10-2015, aceptado 05-12-2015, versión final 28-12-2015.

Artículo Investigación

**RESUMEN:** Un modelo simple basado en la aproximación adiabática, se ha implementado para estudiar el espectro energético de una molécula  $D_2^+$  confinada en un anillo cuántico muy estrecho. El sistema completo se encuentra bajo la influencia de campos externos: magnético y de presión hidrostática. Los resultados muestran la posibilidad de obtener moléculas artificiales cuyos parámetros característicos: longitud de equilibrio, energía de disociación y punto de retorno, pueden ser seleccionadas de antemano al cambiar los factores geométricos del anillo y las intensidades de los campos externos, hecho que contrasta con los valores que registra los valores inmodificables que impone la naturaleza a la molécula natural de hidrógeno.

**PALABRAS CLAVE:** Anillo cuántico, complejo bi-hidrogenoide, presión hidrostática, punto de retorno

**ABSTRACT:** A simple model based on adiabatic approximation is implemented in order to study the energy structure of a  $D_2^+$  molecule confined into the very narrow quantum ribbon. The full system is under the influence fields: magnetic and hydrostatic pressure. The results show the possibility of obtaining artificial molecules whose characteristic features: equilibrium length, dissociation energy, and turning point can be beforehand chosen by changing the quantum ring geometrical parameters the external field strengths, which contrast with the unchanged values of the actual hydrogen molecule which are determined by the nature.

**KEYWORDS:** Hydrostatic pressure, quantum ring, two-hydrogenic complex, turning point.

## 1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años ha habido un gran interés en el crecimiento de nano-estructuras semiconductoras de baja dimensionalidad denominadas puntos cuánticos (QD)(Bimberg, 2008). Esto se debe

---

<sup>a</sup>Montes, Y.; Suaza, Y.; Rincón, F. M. & Marín, J. (2015). Estados energéticos de un  $D_2^+$  confinado en un anillo cuántico semiconductor. *Revista de la Facultad de Ciencias*, 4 (2), 137–149. DOI: <https://doi.org/10.15446/rev.fac.cienc.v4n2.50637>

<sup>b</sup>Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia, A. A. 3840, Medellín, Colombia.

ymontesv@unal.edu.co

<sup>c</sup>Institución Universitaria Pascual Bravo, AA 6564 Medellín, Colombia.

a que con estas nano-estructuras se podrían construir novedosos sistemas opto-electrónicos de alto rendimiento y ordenadores cuánticos sobre la base de bloques llamados qubits (Skinner *et al.*, 2003). De entre la gran variedad de QDs que se pueden obtener experimentalmente, es indudable que aquellos en forma de anillo (Fomin, 2014) son los que mayor atención han captado, ya que la singular topología de los anillos, asociada con la existencia de una cavidad central, permite la aparición de interesantes efectos de interferencia cuántica imposibles de obtener en QDs con otras morfologías. Por ejemplo, cuando un electrón es obligado a moverse dentro de un anillo cuántico muy estrecho, bajo la influencia de un campo magnético uniforme aplicado en la dirección de crecimiento y en ausencia de todo tipo de dispersión inelástica, resulta posible la observación de las llamadas corrientes persistentes (Timp *et al.*, 1987) y de las oscilaciones Aharonov-Bohm (AB) (Timp *et al.*, 1987). La periodicidad de estas oscilaciones es fuertemente dependiente del radio medio del anillo (Marín *et al.*, 2011). No obstante, si el anillo se torna de forma elíptica, no se tiene un periodo definido (Bruno-Alfonso & Latgé, 2005) y en consecuencia tienden a aparecer estados localizados, los cuales son más evidentes cuando se modifica la homogeneidad de la sección transversa del anillo (Marín *et al.*, 2011) o incluso cuando la altura es variable, como es el caso de cintas cuánticas perfectamente cilíndricas pero de altura no uniforme (Suaza *et al.*, 2015).

De otro lado, es bien conocido que dopaje de las nano-estructuras semiconductoras con impurezas del tipo aceptor o donador, modifican notoriamente las propiedades electro-ópticas y cinéticas de los portadores de carga confinados dentro de estos sistemas de baja dimensionalidad. En concreto, se sabe que la presencia de impurezas hidrogenoides en estos sistemas, incrementa la conductividad eléctrica en varios órdenes de magnitud. Por esta razón, muchas investigaciones se han centrado en el estudio del espectro energético de diferentes tipos de estos sistemas hidrogenoides en QDs. En particular, el sistema bi-hidrogenoide  $D_2^+$  (Shuai *et al.*, 2008; Gutiérrez *et al.*, 2010), compuesto por dos donadoras (centros de carga fija de naturaleza positiva) que se ligan entre sí a través de un electrón, se ha venido estudiando en los últimos años, ya que a través de una manipulación conveniente de sus propiedades moleculares, permitiría la obtención de un sistema de dos niveles de energía: “enlace” y “anti-enlace”. Con estos dos niveles se podría codificar información cuántica, bien sea a través del espín electrónico o a través del control de los grados de libertad del electrón.

La mayoría de trabajos teóricos tendientes a analizar el espectro energético de las impurezas  $D_2^+$ , se han realizado asumiendo que éste sistema está confinado en un QD de forma esférica, pero muy pocos se han realizado asumiendo que el sistema está confinado en un anillo cuántico. Esto a pesar de que los anillos ofrecen un mayor confinamiento cuántico, lo que se traduce en un mayor incremento en las diferencias energéticas entre los estados enlace y anti-enlace y una mayor localización electrónica, siendo estas propiedades más aptas para la codificación de información cuántica a través de la obtención de qubits. Lo anterior sin mencionar que la posibilidad de obtener experimentalmente puntos cuánticos semiconductores en forma esférica, está lejos de ser una

realidad, hecho completamente diferente a lo que ocurre con los anillos, cuya rutina experimental está completamente definida y comprobada. Estimulados por los hechos teórico-experimentales que se acaban de mencionar, en este trabajo se hará un cálculo del espectro energético de un  $D_2^+$  en un anillo cuántico con donadoras descentradas y asumiendo que todo el sistema se encuentra bajo la influencia de campos de presión hidrostática y magnético, este último orientado a lo largo del eje de simetría. De acuerdo con las mediciones estructurales realizadas sobre anillos (Lorke *et al.*, 2000), éstos se caracterizan por tener una altura más pequeña que su radio medio, de esta forma es posible realizar cálculos del espectro energético  $D_2^+$ , suponiendo que los anillos tienen una sección transversa muy estrecha, lo que permitirá implementar un modelo basado en la aproximación adiabática. Este modelo, en comparación con el mismo sistema confinado en puntos de diferente morfología y el uso de otros modelos de análisis, permite simplificar sustancialmente los cálculos matemáticos y los esfuerzos computacionales. De este modo será posible abordar en detalle los efectos de los campos externos sobre las propiedades características del complejo molecular  $D_2^+$ : longitud de equilibrio, energía de disociación y muy especialmente, permitirá establecer que factores inciden más notoriamente sobre el punto de retorno, el cual define el punto en el cual la energía total del sistema se hace cero.

## 2. MODELO TEÓRICO

En la figura 1 se muestra una imagen tridimensional esquemática de un anillo cuántico de altura  $h$  y espesor  $W$ , la cual es igual a la diferencia entre el radio exterior  $R_o$  y el radio interior  $R_i$ . Las dos impurezas donadoras se localizan en la base del anillo, la cual se hace coincidir con el plano  $x - y$ , a las distancias  $R_{i1}$  y  $R_{i2}$  del eje de simetría  $z$ .

Las dos impurezas interactúan eléctricamente con un electrón que está obligado a moverse dentro de un anillo y del cual no puede escapar debido a que las barreras de potencial que se asumen ser de naturaleza infinita.

En la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano del sistema  $D_2^+$  en coordenadas cilíndricas, bajo los efectos de presión hidrostática ( $P$ ) y de campo magnético  $\vec{B}$  paralelo al eje  $z$ , se puede escribir como:

$$H\Psi(\rho, \varphi, z) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \left[ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \frac{ie\hbar B}{2m^*(P)} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m^*(P)} + V_c(\rho, \varphi, z) \right. \\ \left. - \sum_{j=1}^2 \frac{e^2}{\varepsilon_1(P) |\vec{r} - R_{ij}|} + \frac{\eta e^2}{\varepsilon_2(P) |R_{i2} - R_{i1}|} \right\} \Psi(\rho, \varphi, z) = E^{(\eta)} \Psi(\rho, \varphi, z) \quad (1)$$

donde:

$$|\vec{r} - R_{ij}| = \sqrt{\rho^2 + R_{ij}^2 - 2\rho R_{ij} \cos(\varphi - \varphi_j) + z^2} \text{ y } |R_{i2} - R_{i1}| = \sqrt{R_{i1}^2 + R_{i2}^2 - 2R_{i1}R_{i2} \cos(\varphi_2 - \varphi_1)}$$

representan las distancias entre las impurezas y el electrón y la distancia entre donadoras, respectivamente. El potencial de confinamiento  $V_c(\rho, \varphi, z)$  se asume ser cero dentro del anillo e

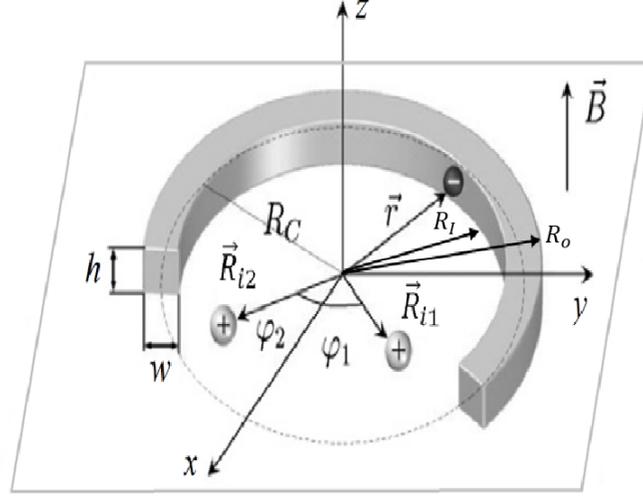


Figura 1: Complejo molecular  $D_2^+$  en un anillo cuántico. Fuente: Elaboración propia

infinito por fuera de éste.

Los efectos de la presión hidrostática sobre el anillo cuántico, de acuerdo al modelo implementado por Reyes *et al.* (2008) y Marín *et al.* (2011), se han incluido a través de la dependencia que exhiben los factores geométricos característicos del anillo, altura, radio interior y exterior y posiciones radiales de las impurezas, así como la masa efectiva y permitividad eléctrica con esta cantidad.

Teniendo presente que la presencia del término de interacción Coulombiana entre los donadores y el electrón, no permite llevar a cabo una separación de variables de modo que se obtenga una solución analítica para el espectro de energía del  $D_2^+$ , se propone implementar un método aproximado que además tenga en cuenta las mediciones experimentales realizadas sobre estos sistemas confinados, donde (Lorke *et al.*, 2000), muestran que los anillos cuánticos de InGaAs se caracterizan porque la razón entre su altura y el radio medio del anillo es muy pequeña  $[h/(0,5(R_1 + R_0))] = L/R_c \ll 1$ . En consecuencia, este hecho experimental permite el uso de la aproximación adiabática (Marín *et al.*, 2011) con el fin de desacoplar el movimiento rápido del electrón en dirección  $z$  del movimiento lento en plano  $x - y$ . Por lo tanto, la función de onda para la ecuación de Schrödinger con Hamiltoniano (1) puede escribirse como:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = f_z(\rho, z)\Theta(\rho\varphi)/\sqrt{\rho} \quad (2)$$

Donde la cantidad  $\rho$  en  $f_z(\rho, z)$  se comporta como una constante. Este hecho permite que esta

función satisfaga la ecuación de Schrödinger uni-dimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \frac{\partial^2}{\partial z^2} f_z(\rho, z) + V_c(\rho, z) f_z(\rho, z) = E_z(\rho, P) f_z(\rho, z) \quad (3)$$

Donde un cálculo simple muestra que:

$$f_z(\rho, z) \sqrt{2/L(P)} \sin[\pi z/L(P)], E_z(\rho, P) = \pi^2 \hbar^2 / [2m^*(P)L^2(\rho P)] \quad (4)$$

Una vez determinada la función  $f_z(\rho, z)$  se puede determinar la función bi-dimensional  $\Theta(\rho, \varphi)$  mediante el principio variacional de Schrödinger ( $F[\Theta] = \langle \Psi | H - E | \Psi \rangle \rightarrow \min$ ). La derivada funcional respecto de  $\Theta^*(\rho, \varphi)$ , permite encontrar la ecuación diferencial que satisface  $\Theta(\rho, \varphi)$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + U(\rho) + \frac{i\hbar B}{2m^*(P)} \frac{\partial}{\partial \varphi} - \sum_{j=1}^2 \bar{V}_j(\rho, \varphi, P) + \frac{\eta e^2}{\varepsilon_2(P) |R_{i2} - R_{i1}|} \right] \Theta(\rho, \varphi) = E \Theta(\rho, \varphi) \quad (5)$$

donde  $U(\rho)$  representa el potencial efectivo bi-dimensional y  $\bar{V}_j(\rho, \varphi, P)$  es un potencial renormalizado que describe la interacción Coulombiana entre las impurezas y el electrón y cuyas expresiones son las siguientes:

$$U(\rho) = -\frac{\hbar^2}{8m^*(P)} \frac{1}{\rho^2} + \frac{e^2 B^2 \rho^2}{8m^*(P)} + \pi^2 \hbar^2 / 2m^*(P) L^2(P) \quad (6)$$

$$\bar{V}_j(\rho, \varphi, P) = \int_0^{L(P)} \frac{f_z^2(\rho, z) dz}{\varepsilon_1(P) \sqrt{\rho^2 + R_{ij}^2 - 2\rho R_{ij} \cos(\varphi - \varphi_j)} + z^2} \quad (7)$$

Con el propósito de resolver la ecuación de Schrödinger bi-dimensional (5), se asume que el anillo cuántico es muy estrecho:  $[R_0 - R_1]/(0,5(R_0 + R_1)) = W/R_c \ll 1$ . Esta asunción unida a la sustitución  $\rho = R_c + \tilde{\rho}$ , donde  $\tilde{\rho}$  toma valores entre  $-W/2$  y  $W/2$ , permite establecer que el movimiento electrónico en dirección radial es mucho mayor que el movimiento de rotación alrededor del eje  $z$ . En consecuencia, se puede implementar nuevamente la aproximación adiabática para separar estos dos movimientos. Un congelamiento temporal de la variable angular  $\varphi$  y haciendo  $\Theta(\rho, \varphi) = g(\tilde{\rho}, \varphi) \Phi(\varphi)$ , permite encontrar la ecuación que involucra la variable renormalizada  $\tilde{\rho}$  y la cual puede expresarse como:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} \right) + U(\tilde{\rho}) - \sum_{j=1}^2 \bar{V}_j(\tilde{\rho}, \varphi, P) + \frac{\eta e^2}{\varepsilon_2(P) |R_{i2} - R_{i1}|} \right] g(\tilde{\rho}, \varphi) = E_R^\eta(\varphi) g(\tilde{\rho}, \varphi) \quad (8)$$

En esta ecuación  $E_R^\eta$  representa una energía renormalizada y ella describe los efectos vibracionales de la molécula en el anillo con potencial efectivo  $-\frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \left( \frac{\partial^2}{\partial \tilde{\rho}^2} \right) + U(\tilde{\rho}) - \sum_{j=1}^2 \bar{V}_j(\tilde{\rho}, \varphi, P)$ . Debido a que la variable angular se comporta como un parámetro en la ecuación (8), entonces esta ecuación

puede resolverse numéricamente a fin de obtener  $E_R^\eta(\varphi)$  y  $g(\tilde{\rho}, \varphi)$ . En consecuencia sólo faltaría por determinar la función  $\Phi(\varphi)$ , la cual describe la rotación del electrón alrededor del eje  $z$  y debe satisfacer las condiciones de frontera  $\Phi(\pi) = \Phi(-\pi)$ . Esta función puede obtenerse usando el principio variacional de Schrödinger:

$$F[\Phi] = \int_{-W/2}^{W/2} d\tilde{\rho} \left[ \int_{-\pi}^{\pi} g(\tilde{\rho}, \varphi) \Phi^*(\varphi) [\tilde{H}(\tilde{\rho}, \varphi) - E_R^\eta] g(\tilde{\rho}, \varphi) \Phi(\varphi) d\varphi \right] \rightarrow \min \quad (9)$$

La condición de que la integral tenga un valor estacionario, permite obtener la ecuación diferencial que satisface la función  $\Phi(\varphi)$ :

$$\frac{d}{d\varphi} \left( A(\varphi, P) \frac{d\Phi(\varphi)}{d\varphi} \right) - \frac{ie\hbar B}{2m^*(P)} \frac{\partial \Phi(\varphi)}{\partial \varphi} + E_R^\eta \Phi(\varphi) = E \Phi(\varphi) \quad (10)$$

$$A(\varphi, P) = \frac{\hbar^2}{2m^*(P)} \int_{-W/2}^{W/2} \frac{g^2(\tilde{\rho}, \varphi) d\tilde{\rho}}{(R_c + \tilde{\rho})^2} \quad (11)$$

Esta ecuación uni-dimensional con potencial azimutal efectivo  $E_R^\eta(\varphi)$ , describe los efectos rotacionales del complejo molecular  $D_2^+$  y se puede resolver usando una expansión en series de Fourier:

$$\Phi(\varphi) = \sum_{m=-N}^N c_m e^{im\varphi} \quad (12)$$

El reemplazo de esta función en la ecuación (11) permite obtener una ecuación secular de orden  $N$  para una solución no-trivial:

$$\det \| E \delta_{m', m} - D_{m', m} \| = 0, \quad m', m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N \quad (13)$$

$$D_{m'-m} = m', m b_{m'-m} + v_{m'-m} + \gamma m \delta_{m'-m}$$

con:

$$b_{m'-m} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} A(\varphi P) e^{-i(m'-m)\varphi} d\varphi; \quad v_{m'-m} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} E_R^\eta e^{-i(m'-m)\varphi} d\varphi \quad (14)$$

La solución secular de la ecuación secular (13) permite obtener los auto-valores  $E$  de la energía.

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

El interés fundamental que se tiene al analizar este complejo molecular  $D_2^+$  cuando está fuertemente confinado en un anillo cuántico, es el de establecer como se afectan sus rasgos característicos: longitud de equilibrio y energía de disociación, cuando se cambian los factores geométricos y la intensidad de los campos externos. Pero adicionalmente, se desea tratar un aspecto poco estudiado en la literatura con relación a este complejo molecular y es establecer qué factores pueden llegar a afectar el punto de retorno de este sistema en condiciones de confinamiento cuántico. De acuerdo con Chuu & Hsieh (2000), este punto corresponde al valor del radio del anillo para el cual un estado de energía ligado cambia de positivo a negativo o también, en este caso particular, donde la

separación entre impurezas produce un cambio de signo en la energía total del sistema. En ambos casos la energía total del sistema tiene que hacerse cero en algún punto, el cual justamente define el punto de retorno.

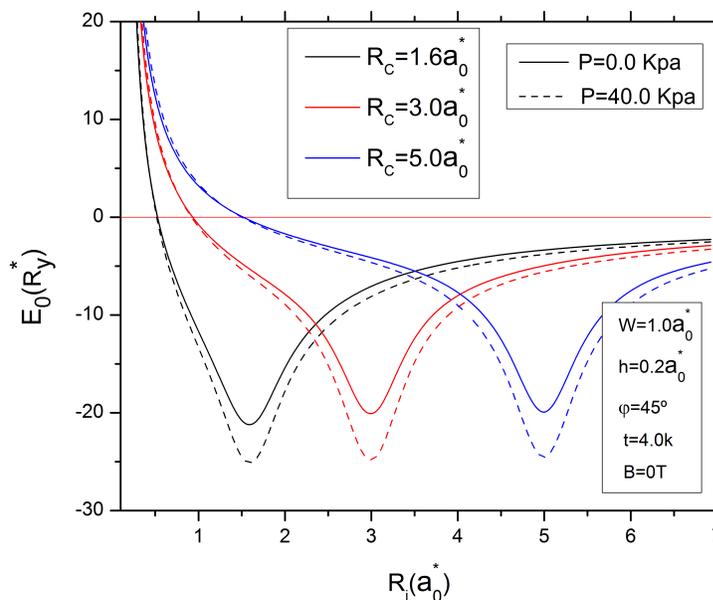


Figura 2: Evolución de la energía total del complejo molecular  $D_2^+$  con la separación entre impurezas. Fuente: Elaboración propia

En la figura 2 se muestra la evolución de la energía total del sistema  $D_2^+$  como función de la separación entre las impurezas para tres valores diferentes del radio medio del anillo  $R_c = 1,6\text{Å}$ ,  $3,0\text{Å}$  y  $5,0\text{Å}$  sin presión (curvas continuas) y con presión de 40 kpa (línea punteada). Independientemente de los valores del radio y de la presión, todas las curvas exhiben un comportamiento análogo al del su equivalente molecular tridimensional  $H_2^+$ , es decir poseen un mínimo para un cierto valor de separación entre impurezas, el cual define la longitud equilibrio y el valor que tome la energía en ese mínimo está asociada con la energía de disociación. Se puede ver como la energía de disociación es independiente del tamaño del anillo, ya que en los tres casos la profundidad del mínimo es el mismo. No obstante, su profundidad si se ve afectada por la aplicación del campo de presión de 40 kpa, ya que éste produce un desplazamiento hacia abajo del mínimo en casi un 20% en comparación con las curvas obtenidas sin presión hidrostática. Esto significa que la aplicación de la presión permite obtener moléculas más estables frente a la disociación. La razón de este incremento se encuentra en la disminución total de las dimensiones de la estructura en la reducción en la constante dieléctrica con la presión. Ambos efectos tienden a favorecer el incremento de la interacción electrón donador, ya que el electrón tiende a estar más cerca de las donadoras haciendo que la energía sea más

negativa. Un aspecto importante que se puede observar de estas curvas, es el asociado con la forma como el incremento del tamaño del anillo, produce un desplazamiento de las curvas hacia derecha. Este hecho se traduce en una modificación de los puntos de retorno, ya que la distancia promedio entre el electrón y las donadoras se incrementa al aumentar el tamaño del radio medio del anillo. Por ejemplo para los valores  $R_c = 1,6\text{Å}, 3,0\text{Å}$  y  $5,0\text{Å}$  los puntos de retorno se obtienen para separaciones entre impurezas de  $0,5\text{Å}, 0,9\text{Å}$  y  $1,5\text{Å}$ , respectivamente.

Con el propósito de analizar los efectos de confinamiento sobre las propiedades esenciales del complejo molecular  $D_2^+$ , es necesario cotejar los valores con los correspondientes para su análogo clásico tridimensional, representado en la molécula ionizada de hidrógeno  $H_2^+$ . Para esta molécula tridimensional se tiene que la longitud de equilibrio igual a  $2\text{Å}$  y su correspondiente energía de disociación igual a  $1,26R_y^*$  son únicas e inmodificables. No obstante, para el caso del complejo  $D_2^+$ , se puede observar que la energía de disociación es casi 15 veces mayor que la del  $H_2^+$ , lo cual prueba que el efecto del confinamiento es incrementar sustancialmente su estabilidad. Además se encuentra que la longitud de equilibrio es fuertemente dependiente del tamaño del anillo, ya que para los valores  $R_c = 1,6\text{Å}, 3,0\text{Å}$  y  $5,0\text{Å}$  se tienen longitudes de equilibrio de  $1,5\text{Å}, 3,0\text{Å}$  y  $5,0\text{Å}$ , respectivamente, lo cual contrasta con el valor rígido e invariable del complejo molecular clásico  $H_2^+$ . Este hecho deja abierta la posibilidad de obtener moléculas artificiales, donde sus factores esenciales: longitud de equilibrio, energía de disociación y punto de retorno, podrían predeterminarse de acuerdo a una potencial aplicación.

Unas curvas similares se obtienen al graficar la energía total del sistema en función del radio medio del anillo, para tres diferentes separaciones entre impurezas:  $R_i = 1,6\text{Å}, 3,0\text{Å}$  y  $5,0\text{Å}$ . Una vez más se ve que la longitud de equilibrio se desplaza hacia derecha cuando se aumenta la separación entre impurezas, manteniéndose prácticamente constante la energía de disociación. Un aspecto importante que se debe resaltar de estas curvas corresponde a la leve variación que experimenta el punto de retorno con el radio medio del anillo. Para ello fue necesario ampliar las imágenes en la vecindad de los puntos donde las diferentes curvas de energía se hacen cero, siendo esto justamente lo que se muestra en el recuadro de la figura 2. Como puede verse, al aumentar la separación entre donadoras, el término de energía repulsivo proveniente de la interacción donador-donador disminuye, lo que conlleva a que el punto de retorno esté más a la izquierda cuanto mayor es la separación entre donadores. En este orden de ideas se puede establecer que los valores del radio medio del anillo para los cuales se hace cero la energía con separaciones entre impurezas  $1,6\text{Å}, 3,0\text{Å}$  y  $5,0\text{Å}$  son iguales a  $0,5\text{Å}, 0,15\text{Å}$  y  $0,18\text{Å}$ , respectivamente, mientras que el punto retorno para la molécula  $H_2^+$  es del orden de  $0,530\text{Å}$ .

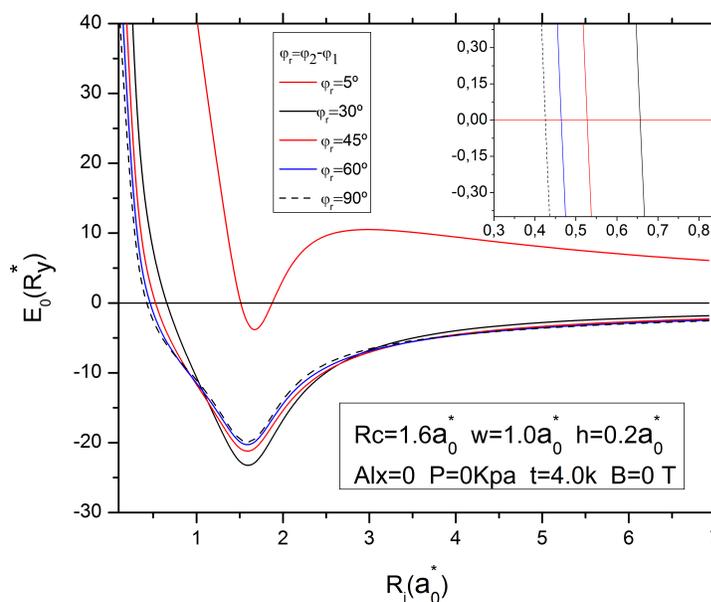


Figura 3: Evolución de la energía total del complejo molecular  $D_2^+$  con la separación entre impurezas para diferentes posiciones angulares de las impurezas. Fuente: Elaboración propia

No solo las distancias radiales a las que se encuentran las impurezas donadoras determinan las propiedades del complejo molecular  $D_2^+$  confinado en el anillo cuántico. En la figura 3 se muestra la evolución de la energía total del sistema en función de la posición de las impurezas para diferentes valores de la posición angular relativa entre donadoras  $\varphi_r = \varphi_2 - \varphi_1 = 5^\circ, 15^\circ, 22^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$  y  $90^\circ$ . En esta gráfica es posible observar que para un valor fijo de la separación entre donadoras, cuánto más pequeña sea la separación angular entre ellas, mayor es la energía total del sistema. Este hecho conlleva a que menor ángulo de separación, el término repulsivo de interacción Coulombiana entre donadoras tiene un aporte más significativo a la energía total, haciendo que para pequeñas separaciones entre donadoras, la contribución repulsiva de interacción Coulombiana entre ellas, se imponga sobre el término de interacción atractiva entre el electrón y las donadoras. Es por esta razón que a pequeños valores de la separación angular, el proceso de transformación de la energía desde valores positivos a valores negativos, al cambiar la separación entre impurezas, resulta ser más prolongado que en el caso de grandes separaciones angulares y por ello el punto de retorno está más a la derecha cuánto más pequeña sea la separación angular, así por ejemplo: para las separaciones angulares  $\varphi_r = \varphi_2 - \varphi_1 = 5^\circ, 15^\circ, 22^\circ, 30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$  y  $90^\circ$  son respectivamente: 1, 5, 0, 95, 0, 79, 0, 66, 0, 54, 0, 47 y 0, 44 Å. Este amplio abanico de valores muestra que mediante variaciones geométricas, no solo asociadas a cambios en los parámetros característicos del anillo sino en las posiciones angulares de las donadoras, es posible obtener complejos moleculares con rasgos característicos diferentes y distintos a los de la molécula natural  $H_2^+$  cuyo punto retorno

fijado por la naturaleza es de  $0,530\text{\AA}$ , para el estado base, ya que los estados excitados presentan diferentes valores del punto de retorno. Para demostrar esta afirmación, en la figura 4 se ha graficado la evolución de la energía total del sistema en función de la separación entre impurezas para tres estados diferentes, tanto con campo magnético 0 como con campo magnético de  $18,8T$  (curvas a tramos). Sin importar el estado se puede observar que el efecto del campo es producir un incremento de la energía del sistema.

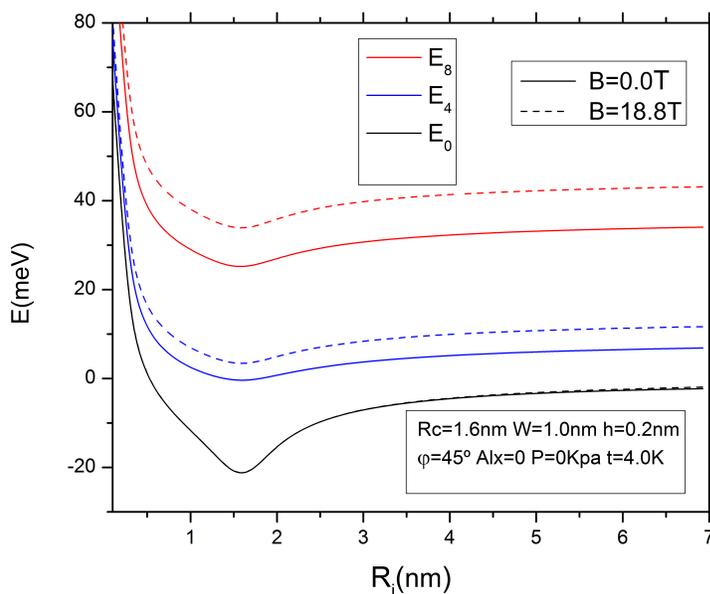


Figura 4: Evolución de la energía total del complejo molecular  $D_2^+$  con la separación entre impurezas para tres estados de energía diferentes: estado base y dos estados excitados. Fuente: Elaboración propia

No obstante, el efecto del campo es más evidente para los estados más excitados, donde la brecha energética entre la curva con y sin campo para el segundo estado excitado, es casi el doble de la que presenta el primer estado excitado. Sin embargo, el estado base casi no presenta cambio ante el incremento del campo. La razón de este resultado, parece estar asociado al hecho de que en los estados más profundos, el electrón está más fuertemente ligado a las donadoras y la energía proveniente del campo, no es suficiente para competir con la energía Coulombiana atractiva entre electrón y donadoras. No obstante, para los estados más externos, la distancia promedio entre el electrón y las donadoras se incrementa, lo que conlleva a que el electrón al estar menos ligado a las donadoras, pueda responder más fácilmente al campo magnético aumentando la energía cinética y por ende la energía total del sistema, lo cual se evidencia a partir del desplazamiento de la curva de energía hacia arriba, es decir, hacia valores de energía totales positivos. En este proceso se ve que para el segundo estado no existe un punto de retorno, ya que la energía total no cambia de signo,

en tanto que para el primer estado excitado el punto de retorno sin campo magnético corresponde a una separación de impurezas de  $1,3\text{\AA}$  y para el estado base es de  $0,530\text{\AA}$ .

Para hacer más evidente la modificación que sufre el espectro de energía con el campo magnético, en la figura 5 se muestra la evolución de diferentes estados de energía con el campo magnético aplicado ( $\gamma = 6,72T$ ).

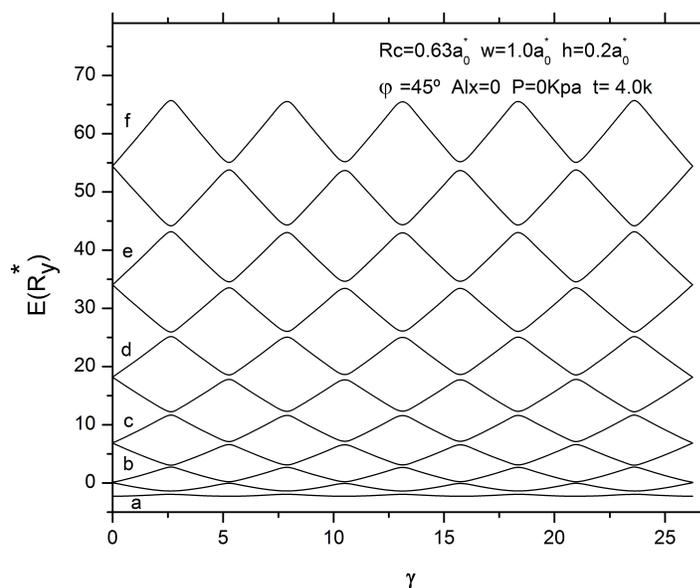


Figura 5: Evolución de la energía total del complejo molecular  $D_2^+$  con la separación entre impurezas para estados de energía diferentes con campo magnético. Fuente: Elaboración propia

Los diferentes estados y su notación corresponden a aquellos descritos por Marín *et al.* (2006). Para entender la notable evolución de las curvas de energía con el campo magnético, es necesario tener presente que estas curvas son el resultado de la competencia entre los términos presentes en el Hamiltoniano (1): El término paramagnético que es proporcional a la intensidad del campo magnético y al momentum angular  $M(0, \pm 1, \pm 2, \dots)$  y el término diamagnético que es proporcional al cuadrado del campo magnético. Para valores positivos de  $M$  y pequeños valores de campo magnético, todas las curvas inician con pendiente positiva y paulatinamente su comportamiento lineal se transforma en parabólico, siendo sus valores de energía siempre crecientes. No obstante, para valores negativos de  $M$ , la curva inicia siendo lineal pero de pendiente negativa cuando el valor del campo es muy pequeño, pero llega un momento donde el término diamagnético, que es de naturaleza cuadrática en el campo, se impone y el comportamiento decreciente de la curva lo torna creciente. En este caso la curva debe pasar por un mínimo para seguir aumentando. Al graficar los diferentes estados se muestra que la competencia entre el término diamagnético y paramagnético

con valores negativos de  $M$ , conlleva a una alternancia periódica del estado de mínima energía conocido como oscilaciones Aharonov-Bohm (Timp *et al.*, 1987).

## 4. CONCLUSIONES

En este trabajo se han estudiado las propiedades del espectro energético de un complejo molecular  $D_2^+$  confinado en un anillo cuántico de sección muy estrecha, razón por la cual fue posible implementar un modelo simple basado en la aproximación adiabática. Con base en este modelo, es posible demostrar, mediante cambios de los diferentes parámetros geométricos, que las características esenciales de la molécula, como son su longitud de equilibrio, energía de disociación y punto de retorno, pueden ser variadas experimentalmente mediante la variación de los radios interior y exterior del anillo, así como de su espesor y de las posiciones radiales y angulares de los centros de carga fija. Estas variaciones permiten obtener moléculas artificiales mucho más estables, cuyas propiedades esenciales difieren sustancialmente de su análogo tridimensional clásico, representado por la molécula de hidrógeno simplemente ionizada  $H_2^+$ . Adicionalmente, la estabilidad del complejo molecular puede incrementarse no sólo a través de variaciones geométricas sino en tiempo real a través de la aplicación de un campo de presión hidrostática o por el contrario, disminuirse al someter al sistema a la acción de un campo magnético orientado en la dirección de crecimiento.

## Referencias

- Bimberg D. (2008), Semiconductor Nanostructures, *Springer-Verlag Science & Business Media*, Berlin.
- Bruno-Alfonso A. & Latgé A. (2005), Aharonov-Bohm oscillations in a quantum ring: Eccentricity and electric-field effects, *Physical Review B* 71, 1253120-1253127
- Chuu, D. S., & Hsieh, C. Y. (2000), Donor states in a multi-layered quantum dot. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 12(40), 8641.
- Fomin, V. M. (2014), Quantum Ring: A Unique Playground for the Quantum-Mechanical Paradigm. In Physics of Quantum Rings. *Springer-Verlag*, Berlin Heidelberg. 1-24.
- Gutiérrez, W.; García, L. F., & Mikhailov, I. D. (2010), Coupled donors in quantum ring in a threading magnetic field. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 43(1), 559-566.
- Lorke, A.; Luyken, R. J.; Govorov, A. O.; Kotthaus, J. P.; García, J. M. & Petroff, P. M. (2000), Spectroscopy of nanoscopic semiconductor rings. *Physical review letters*, 84(10), 2223.
- Marín, J. H.; García, F. & Mikhailov, I. D. (2006), Two electrons in vertically coupled one-dimensional rings. *Brazilian journal of physics*, 36(3B), 940-943.

- Marín, J. H.; Fulla, M. R.; Rodríguez-Prada, F.; García, F. & Piña, J. C. (2011), Energy spectrum of an artificial molecular complex in toroidal quantum rings. *Superlattices and Microstructures*, 49(3), 258-263.
- Reyes-Gómez, E.; Raigoza, N. & Oliveira, L. E. (2008), Effects of hydrostatic pressure and aluminum concentration on the conduction-electron g factor in GaAs-(Ga, Al) As quantum wells under in-plane magnetic fields. *Physical Review B*, 77(11), 1153080-1153086.
- Shuai, K.; Yi-Ming, L. & Ting-Yun, S. (2008),  $H_2^+$ -Like Impurities Confined by Spherical Quantum Dots: a Candidate for Charge Qubits. *Communications in Theoretical Physics*, 50(3), 767.
- Skinner, A. J.; Davenport, M. E. & Kane, B. E. (2003), Hydrogenic spin quantum computing in silicon: a digital approach. *Physical review letters*, 90(8), 0879010-0879014.
- Suaza, Y. A.; Fulla, M. R.; Posada-Rudas, J. G. & Marín, J. H. (2015), Off-axis magneto-donor impurity in a non-uniform height quantum ribbon. *Superlattices and Microstructures*, 87, 64-70. Disponible en: <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2015.06.033>
- Timp, G.; Chang, A. M.; Cunningham, J. E.; Chang, T. Y.; Mankiewich, P.; Behringer, R. & Howard, R. E. (1987), Observation of the Aharonov-Bohm effect for  $\omega\tau_c > 1$ . *Physical review letters*, 58(26), 2814-2818.