



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA Y MATEMÁTICA

**MODELO HOOKEANO DE UN BIEXCITÓN EN PUNTOS
CUÁNTICOS LATERALES, CORRECCIÓN DE PRIMER ORDEN
Y CÁLCULO DEL ESPECTRO**

Tesis de grado previa a la obtención del título de:

BIOFÍSICO

AUTOR: CARTUCHE VACACELA MARCO ANTONIO

DIRECTOR: Dr. ROBERT CAZAR

RIOBAMBA-ECUADOR

2016

NOMBRE

FIRMA

FECHA

Dr. Robert Cazar.

.....

.....

DIRECTOR DE TESIS

Dr. Luis Cortez

.....

.....

MIEMBRO DEL TRIBUNAL

AGRADECIMIENTO

En primer lugar agradezco a mis padres por apoyarme en cada momento de mi preparación académica y personal ya que sin ellos hubiese sido muy difícil ver cumplido esta gran parte de mi vida y en segundo lugar un sincero y profundo agradecimiento ya que el presente trabajo de investigación se pudo llevar a cabo gracias al apoyo incondicional de los Doctores Dennis Cazar, Robert Cazar, Javier Torres, Eduardo Ludeña, Mat. Marcelo Cortez y al Grupo Ecuatoriano de Investigación Teórica de Nano Sistemas GETNano de la ESPOCH, por depositar en mi personal todo su confianza y la motivación necesaria para que cada obstáculo sea superado.

Este trabajo fue realizado gracias al financiamiento de CEDIA a través del concurso CEPRA III.

Agradezco infinitamente a Dr. Fredy Benalcázar, Dr. Richard Pachacama, Dra. Jenny Orbe entre otros ya que antes de considerarlos docentes son amigos y amigas que han sabido ser excelentes guías y tutores de vida.

DERECHOS DE AUTORÍA

Yo Marco Antonio Cartuche Vacacela declaro que el presente trabajo de tesis es de mi autoría y que los resultados del mismo son auténticos y originales. Los textos constantes en el documento que provienen de otra fuente están debidamente citados y referenciados.

Como autor, asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este trabajo de titulación

Riobamba, 8 de enero del 2016

MARCO ANTONIO CARTUCHE VACACELA

C.I: 1104700560

ÍNDICE DE ABREVIATURAS

QDs = Quantum Dots.

PE = Potencial efectivo.

m_e = Masa del electrón.

m_h = masa del hueco.

m_e^* = Masa efectiva del electrón.

m_h^* = Masa efectiva del hueco.

NBO = Non-Born-Oppenheimer.

σ = Razón de masa efectiva.

BO = Born Oppenheimer

ω = Letra griega omega.

BV = Banda de valencia.

BC = Banda de conducción.

NC = Nanocristales.

NC1 = Nanocristal uno.

NC2 = Nanocristal dos

QDM = Quantum Dots Moleculares.

MLs = Nano-capas.

CM = Centro de masa de un sistema.

μ = Masa reducida.

ABO = Aproximación Born Oppenheimer.

NBO = Non Born Oppenheimer.

\hbar = La constante de Planck reducida.

ψ = Letra griega Psi como función de onda.

φ = Letra griega Fi como función de onda.

hh = Sistema hueco-hueco.

ee = Sistema electrón-electrón.

c = Velocidad de la Luz.

ÍNDICE DE CONTENIDO

AGRADECIMIENTO	II
DERECHOS DE AUTORÍA	III
ÍNDICE DE ABREVIATURAS	IV
ÍNDICE DE CONTENIDO	VI
ÍNDICE DE FIGURAS	IX
ÍNDICE DE TABLAS	X
RESUMEN	XI
ABSTRACT	XIII
INTRODUCCIÓN	XIV
ANTECEDENTES	XVI
JUSTIFICACIÓN	XVII
OBJETIVOS	XIX
OBJETIVO GENERAL:	XIX
OBJETIVOS ESPECÍFICOS:	XIX
CAPÍTULO 1	1
1. MECÁNICA CUÁNTICA.	1
1.1. EL RETARDO ELECTRODINÁMICO DEL PROBLEMA DE DOS CUERPOS.....	1
1.2. INTERACCIÓN DE ELECTRONES CON CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS DENTRO DEL SEMICONDUCTOR.	2
1.3. NANO-CRISTAL.....	4
1.4. PUNTO CUÁNTICO LATERALES (LATERAL QUANTUM DOT).....	9
1.5. COORDENADAS RELATIVAS Y CENTROS DE MASA.....	10
1.6. COORDENADAS DE JACOBI.....	12
1.6.1. ALGORITMO PARA N CUERPOS	12
1.6.2. PROBLEMA DE CUATRO CUERPOS	13
1.7. MÉTODO DE JACOBI PARA MATRICES SIMÉTRICAS REALES	14
1.8. APROXIMACIÓN BORN OPPENHEIMER (ABO).....	14
1.9. DOS ELECTRONES EN POTENCIAL OSCILADOR EXTERNO.	16

Solución analítica particular del problema de correlación de Coulomb	16
1.10. SISTEMAS MODELO DE POCAS PARTÍCULAS PARA DESCRIBIR NANOESTRUCTURAS.....	20
1.10.1. QUANTUM DOT DE DOS ELECTRONES EN TRES DIMENSIONES	21
1.10.2. LA ECUACIÓN PARA EL MOVIMIENTO RELATIVO	22
CAPÍTULO 2.....	24
2. MÉTODOS Y TÉCNICAS.....	24
2.1. ANÁLISIS DEL MODELO HOOKEANO PARA UN BIEXCITÓN UTILIZANDO UN MATRIZ SIMÉTRICA DE TRANSFORMACIÓN	25
2.1.1. MODELO DE LA INTERACCIÓN EXCITÓN-EXCITON EN QUANTUM DOT.....	26
2.1.2. MATRIZ SIMÉTRICA DE TRANSFORMACIÓN PARA EL SISTEMA DE CUATRO PARTÍCULAS.....	27
2.1.3. SISTEMA BI-EXCITON.....	28
2.1.4. MODELO HOOKEANO PARA CUATRO PARTICULAS	29
2.1.5. SEPARACIÓN DEL SISTEMA DE CUATRO PARTICLAS	30
2.1.6. DESACOPLAMIENTO DEL SISTEMA	31
2.1.7. DESACOPLAMIENTO DE LA ENERGÍA CINÉTICA	33
2.1.8. DESACOPLAMIENTO DE LA ENERGÍA POTENCIAL.	33
2.1.9. SOLUCIONES	37
CAPÍTULO 3.....	44
3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN	44
3.1. ENERGÍA DE ORDEN-CERO (ENERGÍA ESTADO BASAL)	44
3.2. LA ENERGÍA DE ENLACE	53
CAPÍTULO 4.....	58
4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	58
4.1. CONCLUSIONES.....	58
4.2. RECOMENDACIONES	59
BIBLIOGRAFÍA	60
ANEXOS.....	62
Anexo A	62
Anexo B.	62
Anexo C	63
Anexo D	66

Anexo E.....	67
--------------	----

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1-1. El retardo electrodinámico del problema de dos cuerpos	2
Fig. 1-2 Banda de valencia completa y banda de conducción vacía, lo que corresponde a un estado aislante o no conductor.....	3
Fig. 1-3 Densidades en el plano XY de cuatro estados de la banda de conducción de NC (moléculas artificiales) con dots heterogéneos de CdS. El NC1 está situado en el lado izquierdo de las gráficas. (a) Los estados más bajos-s (2.6543 eV) localizados en NC1. (b) Uno de los dos estados polarizados tipo-p perpendicular para el eje del DQD (QDs dobles). (c) El orbital enlazado. (d) El orbital anti-enlace.	6
Fig. 1-4 Molécula artificial de dot homogéneos investigado. Los dos niveles más bajos de BC y BV de un dot simple (izquierda y derecha) y dot doble (mitad). La actividad de transiciones ópticamente más bajas es indicada por flechas.	7
Fig. 1-5 Imágenes de AFM. (a) crecimiento de QDs de InAs sobre una superficie compuesta de montículos intensificados formados por QDs de InAs cubiertos. (b) nano-huecos. (c) nano-huecos cubiertos con 1 ML de InAs, y (d) QDMs de InAs. Figuras de (e) hasta (h) son representaciones esquemáticas en la dirección del cristal.....	10
Fig. 1-6 Sistema de coordenadas relativas y centros de masas para dos partículas.....	11
Fig. 1-7 Un ejemplo de conjunto de coordenadas de Jacobi para el problema de los cuatro cuerpos; las coordenadas de Jacobi son r_1, r_2, r_3 y el centro de gravedad R , hay que aclarar que este sistema no representa ningún fenómeno estudiado o por estudiarse (Z., y otros, 1999).	13
Fig. 2-1 Sistema de cuatro partículas, donde dos son electrones con carga negativa y dos son huecos con carga contraria.	27
Fig. 3-1 Energía de estado fundamental del complejo bi-excitónico para $M=1$, donde los valores $\{0.9987, 6.094\}, \{0.0856, 36.97\}, \{0.3985, 9.782\}$ están en función del valor de m y su energía en tres puntos diferentes de la curva.....	48
Fig. 3-2 Energía de estado fundamental del complejo bi-excitónico para $m=1$, donde los valores $\{0.05816, 13.87\}, \{1.001, 5.998\}, \{0.3973, 7.365\}$ están en función del valor de M y su energía en tres puntos diferentes de la curva.	48
Fig. 3-3 Energía de orden-cero para valores de M y m , calculados utilizando la matriz de transformación.	50
Fig. 3-4 Energía de orden-cero donde las masas M y m llegan al límite cayendo repentinamente a cero, fenómeno determinado por la distancia de interacción.	51
Fig. 3-5 Las energías E_0 donde podemos visualizar la correspondencia entre sus curvas.	52
Fig. 3-6 Tendencia de la energía de enlace para m y M	54
Fig. 3-7 Muestras las cuervas de la energía de enlace para m y M calculados utilizando el tratamiento de 2011 y mediante el método presentado en este trabajo.	56

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1-1. Niveles de energía de la BC más bajas (eV) de los nano-cristales de CdS y los dots heterogéneos.	4
Tabla 1-2. Niveles de energía altos de la BV y más bajos de la BC (eV) de dos NC de ZnS/CdS y de dot dobles.	8
Tabla 1-3. Energías para $l = 0$ y $n \leq 11$	19
Tabla 3-1. Valores de M , m y las energías del estado fundamental en unidades de Hartree.	49
Tabla 3-2. Comparación de la energía E_0 en unidades de Hartree, mediante los dos tratamientos teóricos.	51
Tabla 3-3. Energía de enlace (B) en unidades de Hartree.	53
Tabla 3-4. Energía de enlace en unidades de Hartree para M y m comparativas con resultados dados en el modelo para un Bi-excitón en QDs Laterales.	55
Tabla 4-1 Valores aproximados de discrepancia.	58

RESUMEN

Se tratará la aproximación Non-Born-Oppenheimer de un Biexcitón tomando como soporte el estudio del Dr. Eduardo V Ludeña y colaboradores (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005), y el Modelo para este Bi-excítón Acoplado en Quantum Dots (QDs) Laterales basados en las soluciones exactas para la molécula Hookeana de H₂ (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011).

Estas soluciones comprenden la resolución de la ecuación de Schrödinger para un sistema de dos electrones y dos huecos con sus respectivas cargas y masas efectivas. Dado que el sistema requiere un Hamiltoniano este debe ser separado, para luego reducirlos a través de las coordenadas de Jacobi del movimiento relativo y centros de masas de las cuatro partículas.

Haciendo uso de las soluciones analíticas para el Hamiltoniano de partículas dados en (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005), se obtendrán las energías de orden cero sin tomar en cuenta los términos acoplados que se eliminarán con las respectivas condiciones que tomaremos, dejaremos para trabajos posteriores los cálculos de \hat{H}_1 y el Hamiltoniano exacto \hat{H} (Hamiltoniano que considera todas las interacciones de Coulomb entre todas las partículas); es decir de $\hat{H}_1 = \hat{H} - \hat{H}_0$, solo se calculará \hat{H}_0 , donde se mostrarán curvas de niveles de energía como resultado del modelo Hookeano para el complejo biexcitónico $X_2 = ee hh$ este ultimo de nuestro interés.

Procederemos también a obtener teóricamente la energía de enlace en base al modelo nuclear de capas (EISBERG, y otros, 1977) con algunas correcciones (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) que nos permitan el cálculo de las mismas, las transformaciones y los resultados de estos procedimientos son ejecutados directamente con el software Wolfram Mathematica teniendo como base los aspectos cuánticos en el complejo excitónico $X_2 = hhee$ (biexcitón).

Por último como resultado se muestran y analizan los gráficos obtenidos con el fin de establecer directa relación y concordancia que existe con los resultados obtenidos en estudios anteriores realizados en (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005) y (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011).

ABSTRACT

It will be studied the Non-Born-Oppenheimer approximation of an exciton taking to support the studio of Dr. Eduardo V. Ludeña and colleagues (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005) and the model for this is Biexciton Trailer Quantum Dots (QDs) based on exact solutions for molecule H₂ Hookean (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011).

These solutions include the resolution Schrodinger equation for a system of two electrons and the two holes with their respective changes and effective mases. Since this system requires a Hamiltonian must be separated and then reducing by Jacobi coordinates of relative movement and mases centers of the four particle.

Using analytical solutions for particle Hamiltonian given in (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005) the energies of zero order is obtained, regardless trailers terms they will be deleted with the respective conditions we will take, leave for next works \hat{H}_1 calculations and exact Hamiltonian \hat{H} (Hamiltonian which considers all Coulomb interactions between all particles); $\hat{H}_1 = \hat{H} - \hat{H}_0$, \hat{H}_0 only where curves energy levels as a result Hookean model for complex biexciton $X_2 = hhee$ latter show our interest is calculated.

Also theoretically we proceed to obtain the binding energy based on the nuclear shell model (EISBERG, y otros, 1977) with some corrections (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) that allow to calculate them, transformations and results of these procedures are executed directly with Wolfram Mathematica software on the basis of the quantum aspects in complex biexciton $X_2 = hhee$ (biexciton).

Finally results are show and analyzed graphs obtained in order to establish a direct relationship and agreement that exists with the results obtained in previous studies (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005) and (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011).

INTRODUCCIÓN

La tecnología del siglo XXI se basa específicamente en la forma y tamaño de las estructuras microscópicas; una de las más importantes aplicaciones son los semiconductores cuánticos en criptografía cuántica y sus diversos usos en puerto electrónicos cuánticos.

Se ha logrado fabricar y controlar las propiedades de los QDs (Quantum Dots) acoplados verticalmente (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011). Está demostrado experimentalmente que los QDs acoplados lateralmente son una base importante en el desarrollo de los computadores cuánticos por sus propiedades electrónicas. Lo que trataremos en el presente trabajo son los efectos de dividir el sistema de cuatro partículas en un bi-excitón en QDs laterales acoplados bajo la influencia de un campo eléctrico en un sistema de dos partículas para su resolución; Es decir la presencia de estados excitados en puntos cuánticos semiconductores puede ser explicada teóricamente a través de cálculos desarrollados en términos de su energía de enlace determinados por su altura y su longitud, por lo que en un acoplamiento lateral de QDs, las interacciones importantes son entre exciton-exciton, es decir el comportamiento físico de los dos electrones y los dos huecos, siendo un crucial aspecto la determinación de un potencial efectivo (PE) exciton-exciton que toma en cuenta el intercambio Fermiónico y la fuerza de Coulomb entre las mismas.

Debido a la participación de cuatro partículas que forman el biexcitón en QDs acoplados, es necesario determinar el Hamiltoniano que describa los dos electrones y los dos huecos con su respectivas masas efectiva m_e y m_h , y la interacción a través de un potencial efectivo de Coulomb. Para ello se considera un sistema cuántico de cuatro partículas, este se asemeja a una molécula de hidrogeno H_2 como en (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H2 Hookean molecule, 2005), a dicho sistema se añadirá un Hamiltoniano y el potencial armónico en términos de distancia entre los huecos y los electrones. Donde será posible definir un Hamiltoniano de orden cero, cuyas soluciones son precisamente las soluciones exactas Non-Born-Oppenheimer (NBO), para el modelo Hookeano de la molécula de Hidrogeno en (Non-Born-Oppenheimer

treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005), sin embargo este análisis requiere la introducción de un Hamiltoniano del tipo Hookeano general para un sistema bi-excitónico real donde cada electrón es atrapado en un potencial armónico centrado en cada hueco.

Por consiguiente, estableceremos el Hamiltoniano de masas efectivas de los electrones y los huecos, aclarando que debido a sus cargas las interacciones del tipo Coulomb de los huecos y los electrones; deben incluir constantes dieléctricas ϵ sin tener desacoplamiento, por lo tanto, no permite obtener soluciones analíticas en la forma de este Hamiltoniano, donde las partículas con cargas iguales interactúan a través de un potencial de Coulomb y los de carga diferente lo hacen a través de un potencial armónico con una constante de fuerza armónica k .

En el límite infinitamente pesado del hueco, es decir, en tratamiento Born-Oppenheimer (Aproximación Born-Oppenheimer) el sistema de cuatro partículas se simplifica a un problema de dos partículas, como la distancia entre los huecos se convierte solo en un parámetro el problema puede ser tratado de varias maneras, sin embargo nos centraremos en determinar la interacción de los excitones para diferentes valores de la razón de masa efectiva σ , definida $\sigma = \frac{m}{M}$, donde m es la masa de los electrones y M de los huecos respectivamente, por lo tanto, acudiremos al tratamiento Non-Born-Oppenheimer para la molécula de H₂ en (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule, 2005) teniendo como ventaja el poder lograr directamente soluciones analíticas para el sistema de cuatro partículas, dándonos información de primera mano sobre la naturaleza de la correlación inter-partículas.

Como último punto, se analiza gráficamente la energía de orden cero (estado basal o fundamental) y la energía de enlace de orden cero para el complejo bi-excitónico $X_2 = eehh$.

ANTECEDENTES

En los últimos años ha llamado mucho la atención el estudio teórico de sistemas mecánico cuánticos de muchos cuerpos, los cuales se presentan en estructuras llamadas Nanocristales, por ende se ha presentado muchas alternativas de soluciones teóricas empíricas, aproximaciones y soluciones exactas de la ecuación de Schrödinger para estos sistemas; utilizando diversos modelos y enfoques en diferentes contextos.

Concretamente el modelo para un Bi-excitón en Quantum Dots Laterales (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011), en el cual su enfoque teórico se basa en previos estudios de sistemas muy similares enfocados en el tratamiento Non Born Oppenheimer de la molécula de H_2 Hookeano, (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H_2 Hookean molecule, 2005) además anteriores estudios han tratado un modelo Hookeano de tres cuerpos con funciones de onda exactas Non Born Oppenheimer para masas arbitrarias (Exact non-Born-Oppenheimer wave functions for three-particle Hookean systems with arbitrary masses, 2006) entre muchos otros, brindando de esta forma una base sustentada para enfoques como los tratados en el presente trabajo para un sistema interactuante de $X_2 = eehh$ (Biexcitón).

Se aclara también que las nano-estructuras de materiales como CdS, CdTe, CdSe, Si, GaAs, ZnO y ZnS/CdS y otros, llaman la atención en la comunidad científica, por su capacidad de generar en su estructura complejos excitónicos, por lo tanto las características de comportamiento e interacción pueden ser analizadas experimentalmente en ellas, proporcionando información fiable sobre estudios teóricos enfocados a su análisis y comprensión para su posterior aplicación.

Particularmente, Eduardo V. Ludeña y su grupo han determinado satisfactoriamente mediante un estudio analítico-teórico la capacidad y/o aplicabilidad de sistemas excitónicos interactuantes en el diseño y construcción de tecnológica electrónica basada en Nanoestructuras, por lo tanto los fundamentos teóricos permiten el diseño de paquetes informáticos que a través del uso de esta teoría pueden producir modelos virtuales con el fin de optimizar los recursos para el análisis experimental.

JUSTIFICACIÓN

En el estudio de las nano-estructuras radica el enorme salto tecnológico que tiene como base la comprensión de las características físicas cualitativas y/o cuantitativas, lo que a futuro permitirá una gama muy amplia de aplicaciones dentro de los campos de procesamiento de información, aplicaciones mecánicas en dimensiones nanométricas, etc. sin embargo, hoy en día se ha visto, que la comprensión de la teoría de fenómenos físicos cuánticos del tipo biexcitónico son puestos a prueba en campo de la criptografía cuántica y dispositivos electrónicos cuánticos a través del uso de puertos cuánticos.

En el Ecuador la investigación de nuevas tecnologías basadas en teoría cuántica de avanzada es limitada, debido a la falta del uso y/o manufacturación tecnológica en este campo de la investigación científica; dentro del contexto nacional, por lo tanto es fundamental iniciar trabajos relacionados o enfocados a esta temática dentro de las instituciones de educación superior con programas de investigación científica que permitan de forma integral llevar a cabo o crear una pauta con el propósito de aumentar la competitividad y desarrollo tecnología del país.

El enfoque del modelo Hookeano de un Biexcitón en QDs laterales permite de manera general un análisis teórico del comportamiento mecano-cuántico a través de aspectos matemáticos comprensibles y sujeto a análisis sin necesidad de infraestructura compleja e instrumentación de última generación para su estudio, además proporciona un enfoque sencillo que con el uso de herramientas básicas que se obtienen dentro de los niveles de educación superior pueden ser ajustados o expandidos con el propósito de ampliar el conocimiento dentro de esta rama de la física tan importante hoy en día para un avance tecnológico de vanguardia.

Con los fines propuestos dentro de este trabajo se realiza un análisis teórico, donde la capacidad de crear moléculas artificiales actualmente es el punto de inflexión que establece la necesidad de su estudio, como por ejemplo CdS, en los cuales se pueden generar estructuras conocidas como biexcitones, actualmente estudiadas ampliamente, por lo tanto con base en el estudio de una molécula Hookeana Non-Born-Oppenheimer del H_2 se presentará como resultado un análisis de variables como la energía de orden

cero, la energía de enlace y su comportamiento bajo ciertas condiciones establecidas para estas estructuras.

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL:

Estudiar el modelo Hookeano de un biexcitón en puntos cuánticos acoplados lateralmente, a través de una matriz de transformación.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- Calcular la energía de orden cero a partir de las soluciones analíticas Non-Bohr-Oppenheimer del modelo Hookeano de puntos cuánticos acoplados lateralmente utilizando una matriz simétrica de transformación a través del método de Jacobi.
- Analizar en este contexto el comportamiento de la energía del complejo biexcitónico $X_2(eehh)$ con los tratados en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) con respecto a la masa efectiva m_e y m_h de los electrones y de los huecos.
- Determinar la estabilidad del sistema $X_2(eehh)$ haciendo una comparación entre el enfoque (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) y los cálculos obtenidos en el presente trabajo.

CAPÍTULO 1

En el presente capítulo se describe, las herramientas básicas, iniciando por el origen físico cuántico de los átomos y moléculas, además los materiales utilizados en el análisis comparativo de los conceptos teóricos versus el comportamiento real en condiciones de laboratorio (Artificial Molecules, 2002). Seguidamente detallaremos brevemente el método de Jacobi utilizado en el presente enfoque teórico. Todos los conceptos teóricos presentados en este capítulo serán aplicados de forma integral en las secciones siguientes.

1. MECÁNICA CUÁNTICA.

El inicio del estudio del átomo de hidrogeno, asumiendo que las dos partículas (electrón y protón) están rotando rígidamente en un orbital circular alrededor de un centro de masa común, una fuerza que varía inversamente al cuadrado de la distancia, donde la distancia de retardo es la distancia entre la posición actual del electrón y la posición del protón visto por última vez, para examinar las leyes que gobiernan el movimiento con un retardo y hallar una simple solución de la ecuación diferencial funcional; establecen las definiciones y condiciones modernas de la mecánica cuántica y el estudio de sistemas cuánticos para un número arbitrario de partículas que interactúan entre sí, sin embargo dentro de los muchos enfoques sobre sistemas cuánticos, para el presente trabajo se ha considerado casos específicos con el enfoque Born Oppenheimer (BO) y fundamentalmente el tratamiento NOB.

1.1. EL RETARDO ELECTRODINÁMICO DEL PROBLEMA DE DOS CUERPOS

Considerando dos partículas que interactúan a través del inverso cuadrado de una fuerza de retardo, la fuerza del tipo Coulomb sobre el electrón ejercida por el protón es dado por; (On the origin of quantum mechanics, 2006).

$$F = K \frac{e^2}{r^3} r \quad (1.1)$$

Asumiendo que las dos partículas están en una rotación rígida con una velocidad angular constante ω , observado la figura 1 tenemos el vector r , representa la fuerza

actuante resultante, el análisis de este sistema es la base teórica del átomo del hidrogeno que establece la base de la mecánica cuántica moderna.

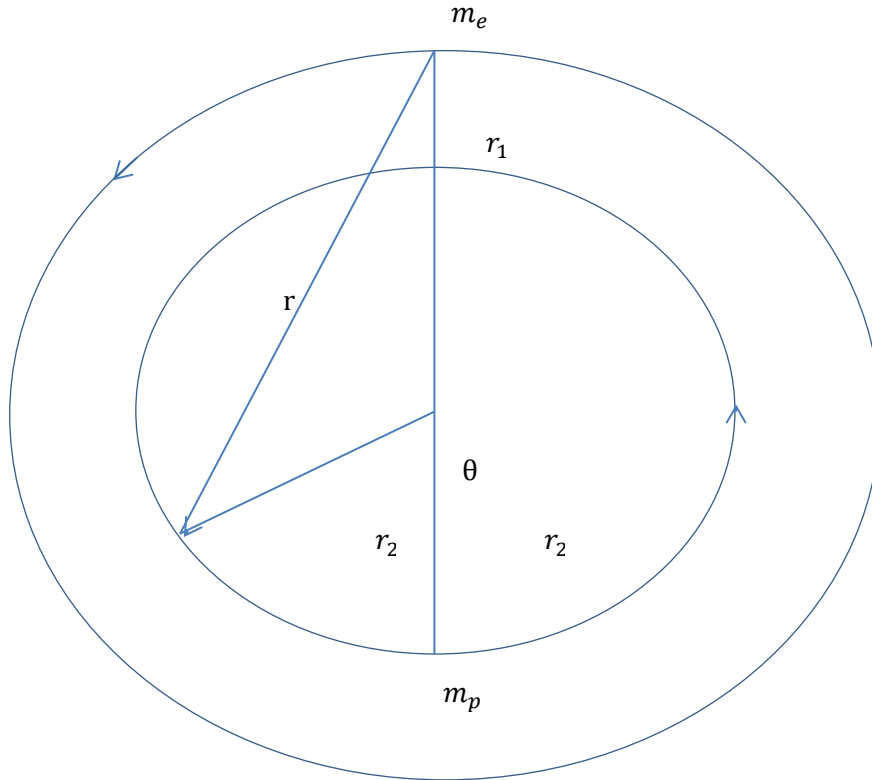


Fig. 1-1. El retardo electrodinámico del problema de dos cuerpos

1.2. INTERACCIÓN DE ELECTRONES CON CAMPOS ELECTROMAGNÉTICOS DENTRO DEL SEMICONDUCTOR.

Como la corriente eléctrica es un desplazamiento de carga (electrones), una carga eléctrica producirá un campo magnético.

Por lo tanto tomando en cuenta que $\vec{E} = \frac{\vec{F}}{q}$

La fuerza del campo eléctrico se define como:

$$\vec{F}_E = k \frac{q_0 q}{r^2} \vec{u}_r \quad (1.2)$$

Con;

$$k = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \quad (1.3)$$

Donde la constante dieléctrica relativa está definida como; en (1.1):

$$\epsilon_{\text{rel}} = \frac{\epsilon_0}{\epsilon} \quad (1.4)$$

Interacción con otras partículas cargadas=fuerza de Coulomb.

$$\vec{F}_C = q_0\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_0q}{r^2} \quad (1.5)$$

Por lo tanto, una partícula cargada de masa m y carga q que se mueve con una velocidad \vec{v} en una región, donde está presente un campo \vec{E} y \vec{B} experimenta una fuerza, donde:

$$\vec{F} = q\vec{E} + q(\vec{v} \times \vec{B})$$

Donde;

\vec{F} = fuerza de Lorentz

\vec{E} = campo eléctrico

\vec{B} = campo magnético.

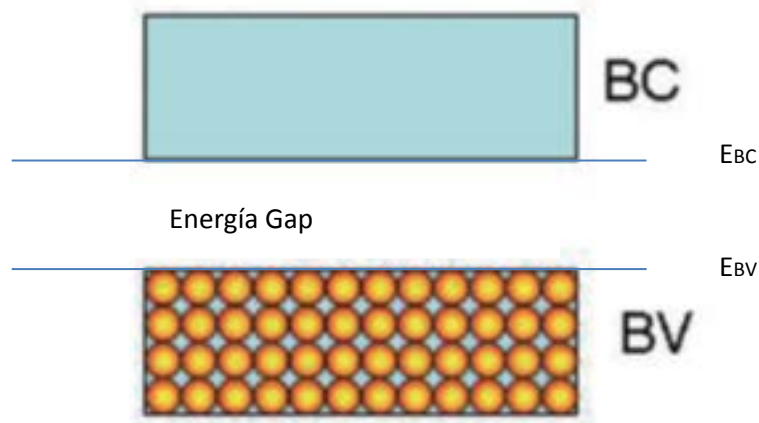


Fig. 1-2 Banda de valencia completa y banda de conducción vacía, lo que corresponde a un estado aislante o no conductor.

1.3. NANO-CRISTAL

Para realizar un breve análisis de estas estructuras cristalinas de tamaños nanométricos nos referiremos a trabajos realizados por L. Wang, A. Rastelli (Towards deterministically controlled InGaAs/GaAs lateral quantum dot molecules, 2008), y a W. Jaskolski (Artificial Molecules, 2002) principalmente donde precisa que un material cristalino con dimensiones medidas en nanómetros. Una nano-partícula con una estructura que es principalmente cristalina, conocidos también como nanocristales (NC). Estos materiales son de enorme interés tecnológico puesto que muchas de sus propiedades eléctricas, termodinámicas y ópticas muestran una fuerte dependencia del tamaño y pueden por lo tanto ser controladas por medio de procesos de fabricación cuidadosos.

Los NC semiconductores en el rango de los 10 nm de tamaño son frecuentemente referidos como puntos cuánticos (Quantum Dots).

Los Quantum Dots (QDs) (Artificial Molecules, 2002) más pequeños son NC sintetizados en soluciones coloidales siendo más frecuentes esféricos o tetraédricos y pueden ser construidos de varias capas concéntricas de semiconductores con armazones de espesor bajos o nano capas simples. También se han desarrollado DQ como sólidos compactos o sistemas construidos por varios NC acoplados. El espectro de absorción y luminiscencia de los QD sólidos son significativamente diferentes de los espectros obtenidos para NC que no interactúan entre sí.

Tabla 1-1¹. Niveles de energía de la BC más bajas (eV) de los nano-cristales de CdS y los dots heterogéneos.		
CdS 2,91 nm	Doble Quantum Dot	CdS 1,86 nm
NC1	DQD	NC2
2,6548 (1)	2,6543(1)	
2,8010 (3)	2,7913 (1)	2,7981 (1)
	2,8009 (1)	
	2,8059 (1)	
2,9528 (3)	2,9526 (1)	
	2,9527 (1)	
	2,9528 (1)	

¹ Fuente: (Artificial Molecules, 2002)

2,9793 (2)	2,9702 (1)	
	2,9793 (1)	
3,0387 (1)	3,0351 (1)	3,0660 (3)

Las características físicas y sus propiedades ópticas dependen de la composición espacial y estructural: entre ellos tenemos las moléculas artificiales heterogéneas (NC heterogéneos)², uno de ellos son los NC esféricos de CdS (Sulfuro de Cadmio) diferentes. Donde NC1 y NC2 de radio 2.91 nm y 1.86 nm respectivamente separados por 4.65 nm a lo largo del eje x definidas por ocho elementos de celdas cubicas unitarias, donde ambos puntos son centrados en el átomo de cadmio, este sistema puede tener hasta 5333 átomos pero de ellos solo uno es común para ambos NCs que están unidos por solo 16 enlaces de un total de 1088 átomos superficiales. Si los centros de los dots están separados por más de 4.8 nm, entonces los puntos no tienen un simple átomo común y su espectro de energía es una suma de los espectros de los dots individuales.

En la **tabla 1-1** se muestra los niveles de energía de la BC (E_{BC}) de NC simples de CdS y los dots heterogéneos. Los NC menores (NC2) como se muestra en la figura 3, en b, c y d tienen un mayor vacío efectivo y mayor separación entre los niveles de energía.

² Artificial Molecules; W. Jaskolski: International Journal of Quantum Chemistry, Vol 90, 1075-1082 (2002).

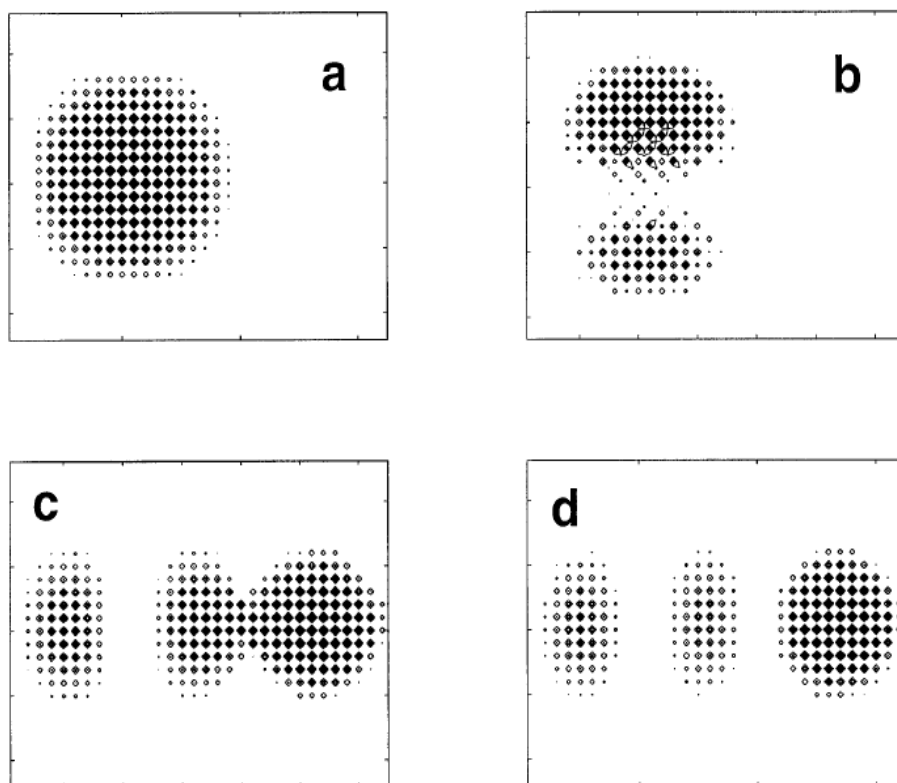


Fig. 1-3³ Densidades en el plano XY de cuatro estados de la banda de conducción de NC (moléculas artificiales) con dots heterogéneos de CdS. El NC1 está situado en el lado izquierdo de las gráficas. (a) Los estados más bajos-s (2.6543 eV) localizados en NC1. (b) Uno de los dos estados polarizados tipo-p perpendicular para el eje del DQD (QDs dobles). (c) El orbital enlazado. (d) El orbital anti-enlace.

También existen moléculas artificiales con dots homogéneos⁴, en esta clase de estructuras se forma orbitales moléculas más significantes si las moléculas artificiales están formados por QDs casi idénticos, en este caso los estados de un dot serán casi resonantes con estados de la misma simetría en el otro dot y hace posible un acoplamiento fuerte.

³ Fuente de imagen (Artificial Molecules, 2002)

⁴ Artificial Molecules; W. Jaskolski: International Journal of Quantum Chemistry, Vol 90, 1075-1082 (2002).

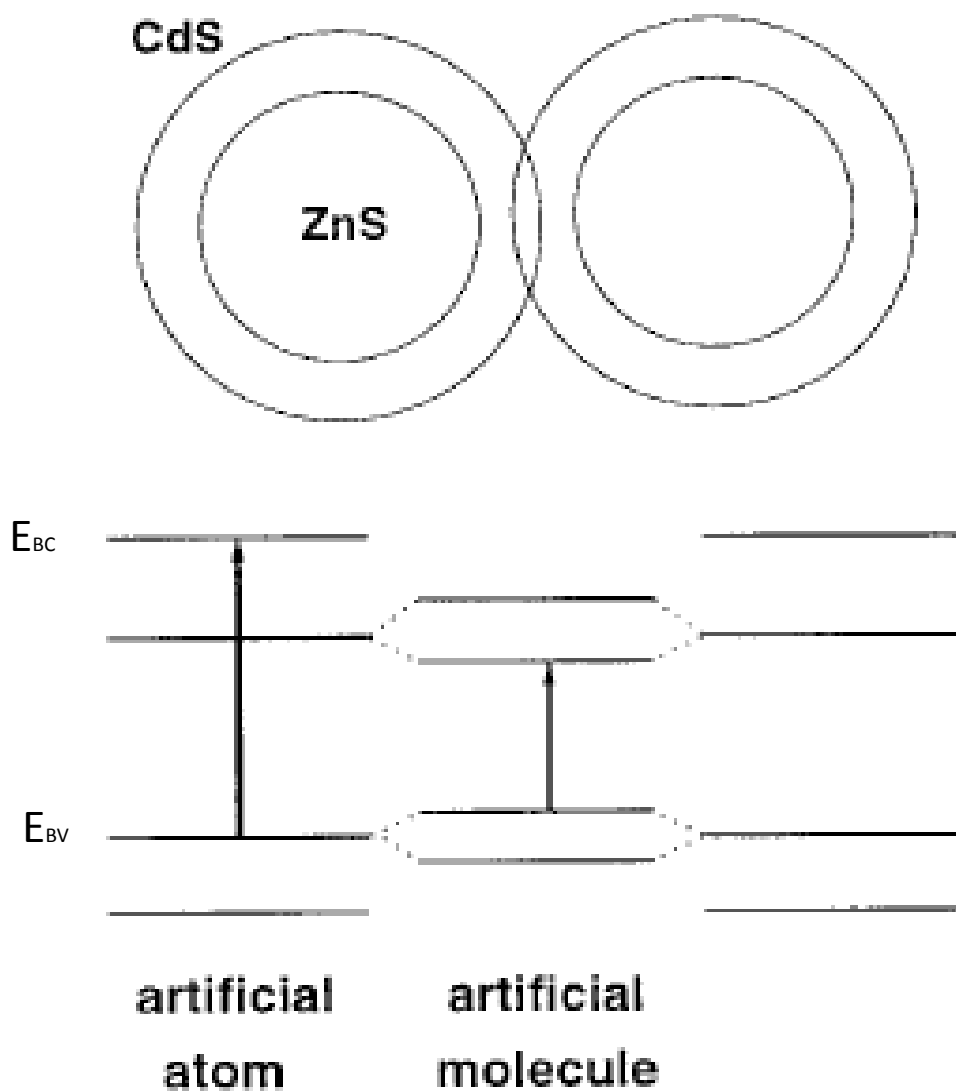


Fig. 1-4⁵ Molécula artificial de dot homogéneos investigado. Los dos niveles más bajos de BC y BV de un dot simple (izquierda y derecha) y dot doble (mitad). La actividad de transiciones ópticamente más bajas es indicada por flechas.

Si consideramos la formación de un QD molecular de dos QD con multi-revestimientos casi idénticos. Donde cada punto está compuesto de núcleo ZnS (sulfuro de Zinc) y revestido de CdS de un espesor de 0.58 nm (nano-capas), el núcleo de los NC denotados AQD1 y AQD2 son 1.86 nm y 1.75 nm respectivamente, los centros de los puntos están separados por 4.66 nm en dirección de x , esta configuración

⁵ Artificial Molecules; W. Jaskolski: International Journal of Quantum Chemistry, Vol 90, 1075-1082 (2002).

permite a los dos NC estar centrados en el átomo de Cd. El sistema entero contiene 4621 átomos.

En la tabla II se muestra los niveles de energías más altos de la BV y los niveles de energía más bajos de la BC. Donde el estado más bajo de la BC de cada NC tiene simetría *s*, sus energías difieren por solo 16 meV, sus densidades de carga poseen simetría esféricamente y están localizados principalmente en la banda prohibida más baja de un revestimiento de CdS.

Tabla 1-2⁶. Niveles de energía altos de la BV y más bajos de la BC (eV) de dos NC de ZnS/CdS y de dot dobles.		
AQD1	Dot doble	AQD2
Banda de conducción		
3,1074 (1)	3,0915 (1)	3,1233 (1)
	3,1191 (1)	
	3,1581 (1)	
3,1784 (3)	3,1784 (1)	
	3,1787 (1)	
	3,2021 (1)	
	3,2025 (1)	3,2027 (3)
	3,2043 (1)	
Banda de valencia		
	-0,1979 (1)	
	-0,2189 (1)	
	-0,2268 (1)	
-0,2327 (3)	-0,2323 (1)	
	-0,2334 (1)	
	-0,2477 (1)	-0,2494 (3)

Sistemas de dos QDs, contruidos de dos NC de CdS de diferentes tamaños y otros compuestos por dos QDs de ZnS/CdS casi idénticos. Los sistemas de dot dobles contruidos por acoplamiento de dos NC cada uno contienen varios miles de átomos y

⁶ Fuente: (Artificial Molecules, 2002)

unidos solo por unos varios enlaces, los espectros de energía y las propiedades ópticas exhibidas serán muy diferentes a los NC individuales (Artificial Molecules, 2002).

1.4. PUNTO CUÁNTICO LATERALES (LATERAL QUANTUM DOT)

Generalmente es un NC semiconductor que confina el movimiento, en las tres direcciones espaciales, de los electrones de la BC y los huecos de la BV o excitones (pares de enlaces de electrones de la BC y los huecos de BV).

Para explicar las características de interacción de estos QDs laterales se toma en cuenta la disminución de las distancias entre borde y borde de dos QDs dentro de los QDM (red cristalina de gran tamaño), sin embargo la división de la función de onda del electrón (hueco) dentro del estado de simetría y anti-simetría es observada con la finalidad de indicar la presencia de acoplamiento lateral⁷.

Los QDs semiconductores acoplados (Towards deterministically controlled InGaAs/GaAs lateral quantum dot molecules, 2008) son de mucho interés debido a sus aplicaciones en puertos cuánticos de estado sólido, los progresos en aplicaciones experimentales comprende los QDs definidos eléctricamente y los QDs de auto ensamblaje atrapados verticalmente, por lo tanto la fabricación de QDMs de *InGaAs* (Arseniuro de Indio y Galio) usa un haz ordenado combinado de *AsBr₃* in situ selectivamente decaído y saturado de QDs *InAs*. El proceso de crecimiento comienza con las capas de QDs de *InAs* de alta densidad, cubierto por 60 nm de *GaAs* a 500 °C, estas secuencias de capas permiten obtener una superficie con montículos intensificados que guían la formación de QDs y mejorar el rendimiento de QDMs. Para crear estos QDMs una segunda capa de QDs de *InAs* es depositada secuencialmente sobre esta superficie y cubierta por 10 nm de *GaAs* seguido por *AsBr₃* reaccionan in situ.

De la reacción principal para él *InGaAs* sobre *GaAs* con una tensión mejorada para la velocidad de reacción, donde los QDs cubiertos serán removidos formando nanohuecos en las posiciones anteriormente ocupados por los QDs.

⁷ Towards deterministically controlled InGaAs/GaAs Lateral quantum dot molecules; New Journal of Physics 10 (2008) 045010.

El crecimiento excesivo de los nano-huecos con *InAs* y más que 1.8 nm de monocapas (MLs) resultan en la formación de QDMs alineados de la dirección de cristal.

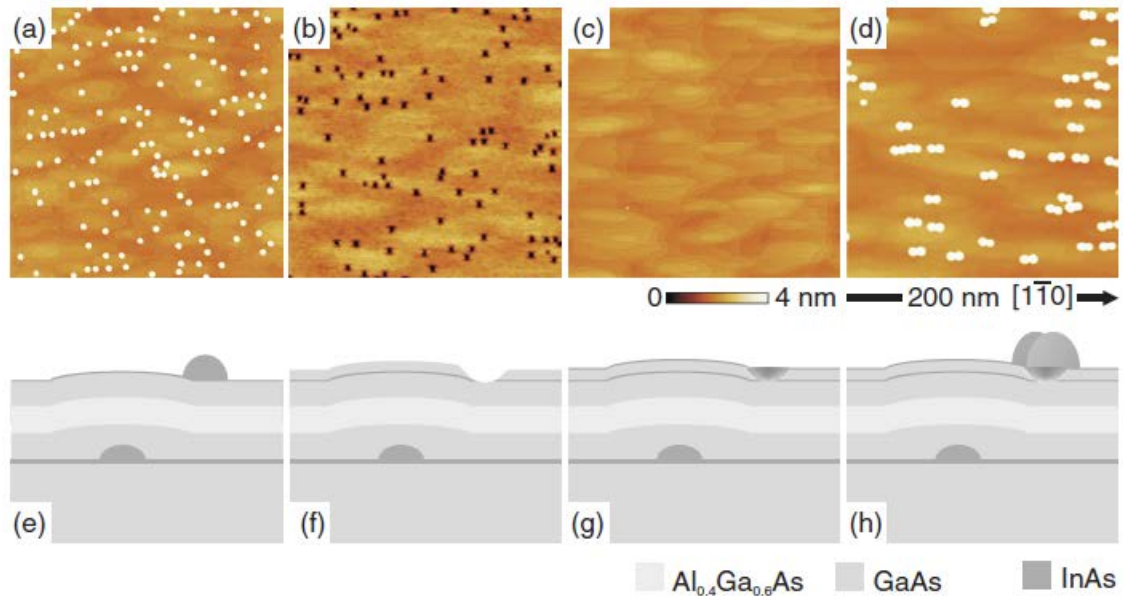


Fig. 1-5⁸ Imágenes de AFM. (a) crecimiento de QDs de *InAs* sobre una superficie compuesta de montículos intensificados formados por QDs de *InAs* cubiertos. (b) nano-huecos. (c) nano-huecos cubiertos con 1 ML de *InAs*, y (d) QDMs de *InAs*. Figuras de (e) hasta (h) son representaciones esquemáticas en la dirección del cristal.

Es importante notar que todos los QDs son nucleados en los bordes convexos de los montículos lo cual es atribuido a la tensión de relajación máxima en este sitio. Además después de una etapa de gran crecimiento de 10 nm de *GaAs*, se usa la reacción selectiva de *AsBr₃* para crear nano-huecos formados por arcos enlazados fácilmente alargados en la dirección del cristal. Además los nano-huecos y los montículos estructurales pueden todavía ser reconocidos incluso si la reacción selectiva produce algunas asperezas superficiales.

Un punto cuántico contiene un número reducido y finito de electrones de la banda de conducción (del orden de 1 a 100) y huecos en la banda de valencia, o de excitones, es decir, un número finito de cargas eléctricas elementales negativas positivas.

1.5. COORDENADAS RELATIVAS Y CENTROS DE MASA

⁸ Towards deterministically controlled *InGaAs/GaAs* Lateral quantum dot molecules; *New Journal of Physics* 10 (2008) 045010.

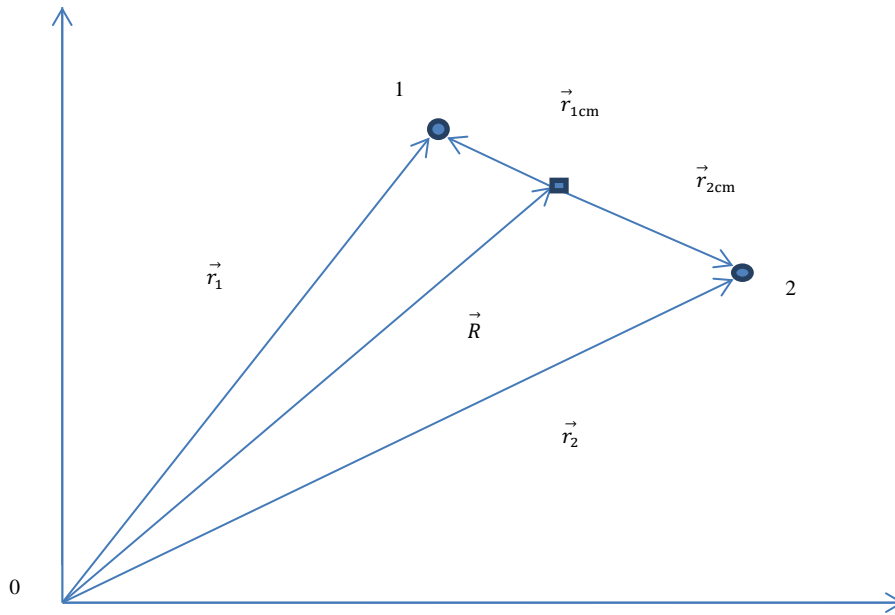


Fig. 1-6 Sistema de coordenadas relativas y centros de masas para dos partículas.

Un sistema constituido por un conjunto de partículas puntuales de masas m_1, m_2, \dots, m_n el centro de masa CM del sistema determinado por la fuerza central actuante, es un punto abstracto cuyo vector de posición define las coordenadas individuales de cada partícula, esto permite desacoplar las ecuaciones de movimiento. Por lo tanto podemos usar el mismo principio definido para dos partículas interactuantes en un sistema de m_n partículas: definido de la siguiente manera;

$$\vec{R} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (1.7)$$

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad (1.8)$$

$$\vec{r}_1 = \vec{R} - \frac{m_2}{M} \vec{r} \quad (1.9)$$

$$\vec{r}_2 = \vec{R} + \frac{m_1}{M} \vec{r} \quad (1.10)$$

Donde M representa la masa total y μ es la masa reducida de la partícula y esta definida por las siguientes ecuaciones:

$$M = m_1 + m_2:$$

Y

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{m_1 m_2}{M} \quad (1.11)$$

Un sistema de coordenadas de centros de masa, tiene como su origen su centro de masa, donde sus fórmulas de transformación son;

$$\vec{r}_{1\text{cm}} = \frac{m_2}{M} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = -\frac{m_2}{M} \vec{r} \quad (1.12)$$

$$\vec{r}_{2\text{cm}} = \frac{m_1}{M} (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \frac{m_1}{M} \vec{r} \quad (1.13)$$

Donde además se cumple que:

$$m_1 \vec{r}_{1\text{cm}} + m_2 \vec{r}_{2\text{cm}} = 0 \quad (1.14)$$

$$\vec{r}_{2\text{cm}} - \vec{r}_{1\text{cm}} = \vec{r} \quad (1.15)$$

1.6. COORDENADAS DE JACOBI

En la teoría de sistemas de muchas partículas, las coordenadas de Jacobi se usan con frecuencia para simplificar las fórmulas matemáticas.

1.6.1. ALGORITMO PARA N CUERPOS

Un algoritmo para generar coordenadas de Jacobi para N cuerpos se describe como sigue:

Sean m_j y m_k las masas de dos cuerpos que son reemplazados por un nuevo cuerpo de masa virtual $M = m_j + m_k$.

Las coordenadas x_j y x_k se reemplazan por sus posiciones relativas $r_{jk} = x_j - x_k$ y por el vector al centro de sus masas

$$R_{jk} = \frac{m_j q_j + m_k q_k}{m_j + m_k}. \quad (1.16)$$

El nodo en el árbol binario correspondiente al cuerpo virtual tiene m_j como rama derecha y m_k como rama izquierda. El orden de las ramas indica el punto de coordenadas relativas desde x_j' a x_k .

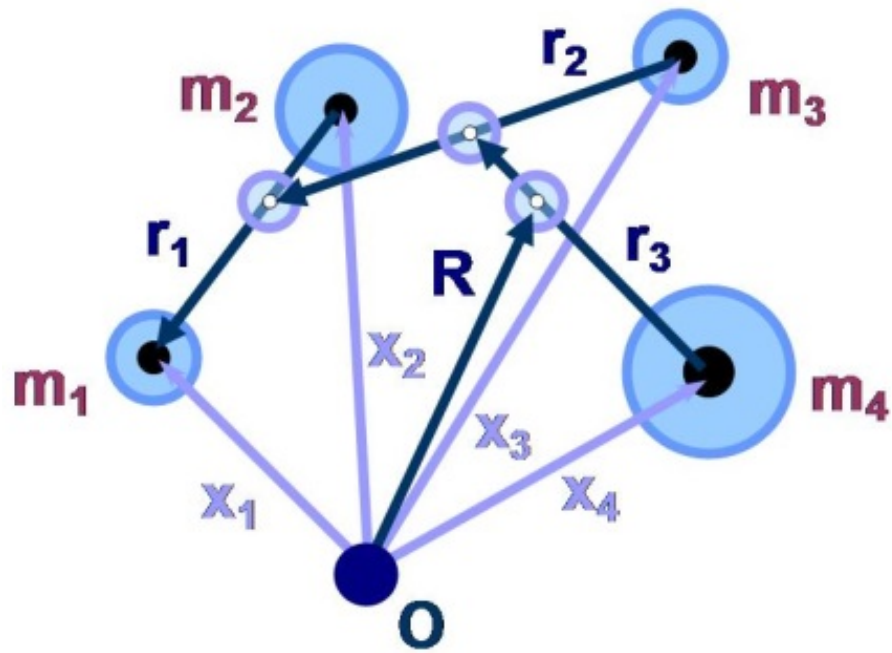


Fig. 1-7⁹ Un ejemplo de conjunto de coordenadas de Jacobi para el problema de los cuatro cuerpos; las coordenadas de Jacobi son r_1, r_2, r_3 y el centro de gravedad R , hay que aclarar que este sistema no representa ningún fenómeno estudiado o por estudiarse (Z., y otros, 1999).

1.6.2. PROBLEMA DE CUATRO CUERPOS

Para el problema de cuatro cuerpos el resultado es:

$$r_1 = x_1 - x_2 \quad (1.17)$$

$$r_j = \frac{1}{m_{0j}} \sum_{k=1}^j m_k x_k - x_{j+1} \quad (1.18)$$

Con;

$$m_{0j} = \sum_{k=1}^j m_k \quad (1.19)$$

El vector R es el centro de gravedad de todos los cuerpos:

$$R = \frac{1}{m_0} \sum_{k=1}^N m_k x_k$$

$$m_0 = \sum_{k=1}^N m_k \quad (1.20)$$

⁹ Fuente de imagen (Z., y otros, 1999).

1.7. MÉTODO DE JACOBI PARA MATRICES SIMÉTRICAS REALES

En esta sección veremos brevemente algunos conceptos básicos que serán de utilidad en las siguientes secciones. (Handbook Series Linear Algebra. The Jacobi Method for Real Symmetric Matrices, 1966).

Donde se llama una rotación de Jacobi a lo siguiente:

$$A \rightarrow A_{k+1} = U_k^T A_k U_k, \quad A_0 = \text{matriz dada} \quad (1.21)$$

Con U_k^T que representa la matriz traspuesta en donde el elemento u_{ji} de la matriz original U_k se convertirá en el elemento a_{ij} de la matriz traspuesta U_k^T .

Donde $U_k = U_k(p, q, \varphi)$ es una matriz ortogonal que se deriva de la matriz unitaria solo en los elementos:

$$u_{pp} = u_{qq} = \cos(\varphi) \quad (1.22)$$

Y

$$u_{pq} = -u_{qp} = \sin(\varphi) \quad (1.23)$$

Por lo tanto el método de Jacobi realiza la operación

$$A \rightarrow D = V^T A V \quad (1.24)$$

1.8. APROXIMACIÓN BORN OPPENHEIMER (ABO)

La base de esta aproximación permite tener el punto de partida para estudios enfocados en el análisis teórico del comportamiento cuántico de sistemas similares para átomos poliatómicas y para el presente trabajo que considera los átomos artificiales.

De tal forma la ABO considera que la importancia de los núcleos atómicos se basa en su masa relativamente grande, lo que nos permite establecer una localización razonable de los núcleos dentro de las moléculas, es decir, si en un sistema físico tiene variables que cambian lentamente y otras rápidamente por sentido común diremos que el comportamiento de las variables rápidas no están determinadas y/o influenciadas por

la velocidad de cambio de las variables lentas, este desacoplamiento de las propiedades de movimiento de las variables lentas y rápidas es la base de la ABO.

Si consideramos un sistema molecular, los electrones y los núcleos están confinados en un volumen correspondiente al tamaño de la molécula, es decir en confinada en un espacio L , entonces por el principio de incertidumbre la partícula puede tener un momento $\hbar/2$ ya que la masa nuclear es alrededor de 1840 veces más grande que de los electrones, esto conduce a que la velocidad de movimiento del electrón es alrededor de mil veces la del núcleo, debido a esto los núcleos están mucho más localizados en las moléculas que los electrones pues las velocidad de los núcleos son considerablemente más pequeñas. Por lo tanto, la solución del sistema molecular aprovecha la posibilidad de desacoplamiento de las variables debido a las velocidades de los núcleos y los electrones.

La escritura del Hamiltoniano para la ABO, será el punto de partida para cualquier sistema molecular, donde tenemos lo siguiente:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (1.25)$$

Con;

$$\hat{H}_0 = V(r, R) + V(R) + T_0(r) \quad (1.26)$$

$$\hat{H}_1 = T_N(R) \quad (1.27)$$

$$T_0(r) = - \sum_{\mu} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r_{\mu}^2} \quad (1.28)$$

$$T_N(R) = - \sum_i \frac{\hbar^2}{2M_i} \frac{\partial^2}{\partial R_i^2} \quad (1.29)$$

Donde r y R determinan las coordenadas nucleares y electrónicas del sistema; $V(r, R)$ es la energía potencial de los electrones en el campo nuclear y $V(R)$ es la energía potencial nuclear; $T_0(r)$ y $T_N(R)$ son los operadores de la energía cinética de los electrones y los núcleos; con m y M_i son sus masas.

Los operadores \hat{H}_0 y R conmutan, por lo tanto de los valores propios \hat{H}_0 se puede fijar la posición de los núcleos y escribir para cada una de las posiciones; de la siguiente manera:

$$\hat{H}_0|\psi_n(r, R)\rangle = E_n^0(R)|\psi_n(r, R)\rangle \quad (1.30)$$

Además debemos considerar que $\psi_n(r, R)$ son reales y normalizadas para cada posición de R :

$$\langle\psi_n(r, R)|\psi_n(r, R)\rangle = 1 \quad (1.31)$$

La función de onda total del sistema está desarrollada como la suma de productos:

$$\psi(r, R) = \sum_n \psi_n(r, R)\chi_n(R) \quad (1.32)$$

La búsqueda de los valores propios y funciones propias de la ecuación:

$$\hat{H}_0 + \hat{H}_1|\psi(r, R)\rangle = E^{\text{vib}}|\psi(r, R)\rangle \quad (1.33)$$

En el marco de la A.B.O. la ecuación (1.30) describe el comportamiento electrónico del sistema para grupo fijo de coordenadas nucleares R . Esta ecuación debe ser resuelta para cada grupo de posiciones nucleares fijas y consecuentemente, el autovalor electrónico E_n^0 depende de R .

1.9. DOS ELECTRONES EN POTENCIAL OSCILADOR EXTERNO.

Solución analítica particular del problema de correlación de Coulomb

Este enfoque nos proporciona soluciones establecidas para el caso en estudio, en el cual se ha aplicado el tratamiento NBO de molécula Hookeana de H_2 en (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H2 Hookean molecule, 2005). Estos sistemas tienen muchas aplicaciones y una de las consideraciones consiste en la importancia del estudio del incremento de la correlación con la disminución de la densidad en un sistema finito, esto puede ser logrado transformando las frecuencias del oscilador a una función de onda

que se propaga más y más (Two electrons in an external oscillator potencial. Particular analytic solutions of a Coulomb correlation pproblem , 1993). (Véase Anexo C)

Primero expresaremos por separado la ecuación de Schrödinger en cinco ecuaciones que pueden ser resultas de forma simple y una ecuación de Schrödinger radial de las coordenadas inter-partículas.

Por lo tanto el sistema de ecuaciones se escribe:

$$H = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_2^2 + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \quad (1.34)$$

Donde r_1 y r_2 son los operadores de posición de las dos partículas. (La unidad atómica $\hbar = m = e = 1$ será usada en el resto de este documento).

Luego se introduce nuevas variables:

$$r = r_2 - r_1 \quad (1.35)$$

$$R = \frac{1}{2}(r_2 + r_1) \quad (1.36)$$

Desacoplando el Hamiltoniano tenemos:

$$H = -\nabla_r^2 + \frac{1}{4}\omega^2 r^2 + \frac{1}{r} - \frac{1}{4}\nabla_R^2 + \omega^2 R^2 = H_r + H_R \quad (1.37)$$

Debido a que el H es independiente del espín la función de onda total se puede factorizar en:

$$\psi(1,2) = \varphi(r)\xi(R)\chi(s_1, s_2) \quad (1.38)$$

Seguidamente de la (1.37) la ecuación de Schrödinger $H\psi = E\psi$ se separa en:

$$\left[-\nabla_r^2 + \frac{1}{4}\omega_r^2 r^2 + \frac{1}{2r} \right] \varphi(r) = \epsilon' \varphi(r) \quad (1.39)$$

Donde $\omega_r = \frac{1}{2}\omega$, $\epsilon' = \frac{1}{2}\epsilon$ y

$$\left[-\frac{1}{4}\nabla_R^2 + \frac{1}{2}\omega_R^2 R^2 \right] \xi(R) = \eta' \xi(R) \quad (1.40)$$

Donde $\omega_R = 2\omega$, $\eta' = 2\eta$; se establece como analogía de problemas ya conocidos definiendo nuevas frecuencias de osciladores y energías para cada problemas, con una energía total $E = \epsilon + \eta$.

Ahora para el movimiento relativo de ambos electrones introduciremos coordenados esféricas que separen los módulos r de las coordenadas angulares $\hat{r} = \frac{\mathbf{r}}{r}$, donde lugar al siguiente enfoque:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{u(r)}{r} Y_{lm}(\hat{r}) \quad (1.41)$$

Donde Y_{lm} son armónicos esféricos y $u(r)$ está determinado por la ecuación de Schrödinger radial:

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} - \frac{1}{2} \omega_r^2 r^2 + \frac{1}{2r} + \frac{l(l+1)}{2} \frac{1}{r^2} \right] u(r) = \epsilon' u(r) \quad (1.42)$$

Debido a que $Y_{ml}(-\hat{r}) = (-1)^l Y_{ml}(\hat{r})$ vemos que todas las eigen-soluciones satisfacen el principio de Pauli y que las soluciones correspondiente incluso a l , se mantienen.

En este mismo trabajo se verá, que las solución de la ecuación de Schrödinger radial es obtenida como una aproximación que puede ser expresado alrededor de una posición inicial mínima r_0 en series de Taylor, además una solución exacta introduce las variables reducidas en (1.42) $\rho = \sqrt{\omega_r} r$, $\epsilon'' = \frac{2\epsilon'}{\omega_r}$ y dividiendo la solución para $r \rightarrow \infty$.

Así también mediante las condiciones siguientes;

$$F(l, n, \epsilon'', \omega_r) = 0 \quad (1.43)$$

$$\epsilon'' = 2(l + n) + 1 \quad (1.44)$$

Las formulas (1.43) y (1.44) son las dos ecuaciones para ϵ'' y ω_r que definen el espectro de energía. No se halla el espectro de energía para una frecuencia de oscilador ω_r de forma sencilla, pero de la ecuación (1.44) podemos calcular las energías reducidas ϵ'' para un n y l dado.

$$F(l, n, 2(l + n) + 1, \omega_r) = 0 \quad (1.45)$$

Entonces la ecuación (1.45) determina que la frecuencia del oscilador ω_r a la energía reducida, definida por (1.44).

Ahora se considera el caso de $l = 0$ y n arbitrario, en este caso n es el orden del polinomio $t(\rho)$ la correspondiente F estará por encima de $l = 11$, esto se calcula de muestran en la **tabla 3**, debemos enfatizar que las soluciones halladas de esta manera no son necesariamente del estado fundamental.

Tabla 1-3¹⁰. Energías para $l = 0$ y $n \leq 11$.

n	$1/\omega_r$	N_r	ϵ'	ϵ'_T	$\frac{\epsilon' - \epsilon'_T}{\epsilon'} (\%)$	ϵ'_{int}	$\frac{\epsilon' - \epsilon'_{int}}{\epsilon'} (\%)$
2	4	0	0,625	0,5915	5,36	0,6250	0,000
3	20	0	0,1750	0,1715	1,97	0,1750	-0,023
4	54,7386	0	0,0822	0,0814	1,02	0,0822	0,026
	5,26137	1	0,8553	0,8062	5,74	0,8553	0,000
5	115,299	0	0,0477	0,0474	0,63	0,0477	0,049
	24,701	1	0,2227	0,2166	2,73	0,2228	-0,045
6	208,803	0	0,0311	0,0310	0,43	0,0311	0,055
	64,8131	1	0,1003	0,0956	1,63	0,1003	0,005
	6,38432	2	1,0181	0,9528	6,41	1,0181	0,000
7	342,366	0	0,0219	0,0218	0,31	0,0219	0,054
	132,638	1	0,0565	0,0559	1,11	0,0565	0,041
	28,9962	2	0,2587	0,2495	3,56	0,2588	-0,062
8	523,102	0	0,0162	0,0162	0,24	0,0162	0,050
	235,301	1	0,0361	0,0358	0,80	0,0361	0,058
	74,1774	2	0,1146	0,1119	2,35	0,1146	-0,019
	7,41903	3	1,1457	1,0655	7,00	1,1457	0,000
9	758,124	0	0,0125	0,0125	0,19	0,0125	0,045
	379,925	1	0,0250	0,0249	0,61	0,0250	0,064
	148,942	2	0,0638	0,0627	1,69	0,0638	0,022
	33,0088	3	0,2878	0,2755	4,28	0,2879	-0,045
10	1054,54	0	0,0100	0,0099	0,15	0,0100	0,041
	573,625	1	0,0183	0,0182	0,48	0,0183	0,064

¹⁰ N_r es el número de nodos reales positivos de $t(\rho)$ [y de $u(r)$]. ϵ'_T es la forma de la expansión de las series de Taylor para el estado fundamental descrito anteriormente. ϵ'_{int} define las consecuencias y análisis

	260,427	2	0,0403	0,0398	1,29	0,0403	0,047
	83,0152	3	0,1265	0,1227	3,01	0,1265	0,004
	8,39091	4	1,2514	1,1577	7,48	1,2513	0,000
11	1419,47	0	0,0081	0,0081	0,12	0,0810	0,037
	823,515	1	0,0140	0,0139	0,39	0,0140	0,062
	415,764	2	0,0277	0,0274	1,02	0,0276	0,060
	164,445	3	0,0699	0,0683	2,27	0,0699	0,036
	36,8097	4	0,3124	0,2971	4,89	0,3123	0,035

1.10. SISTEMAS MODELO DE POCAS PARTÍCULAS PARA DESCRIBIR NANOESTRUCTURAS.

Este sistema considera que las NC de semiconductores aun en el caso 1D pueden estar constituidos por miles de átomos. Sin embargo, lo sorprendente es que produzcan niveles discretos, es decir, que tengan un comportamiento similar al de los átomos (Sistemas Modelos de Pocas Particulas para la descripción de Nanoestructuras: Quanntum Dots Simples y Acoplados, Excitones., 2012).

Por lo tanto daremos un vistazo breve a este trabajo, con el fin de comprender y obtener un soporte teórico global para la comprensión y aplicación en las siguientes secciones donde nos referiremos al Modelo Hookeano de un Bi-excitón en puntos cuánticos laterales.

Como es bien conocido los QDs, a diferencia de los átomos; en el NC hay unos pocos electrones que actúan como si estuviesen en un pozo de potencial que tiene las dimensiones del NC, donde ese confinamiento es el que produce los niveles discretos. De hecho, la mayoría de los electrones en un NC están asociados a los átomos que lo conforman. Sin embargo, hay algunos electrones que se mueven libremente (dentro del pozo de potencial) y son estos electrones los que hacen que el NC tenga niveles discretos de energía que lo asemejen a un átomo. Pero a diferencia de lo que ocurre en un átomo real, en donde los electrones se mueven en un potencial Coulombico, en los QDs, los electrones están bajo el influjo de potenciales que más bien se asemejan a potenciales Hookeanos.

Una magnitud importante en la definición de un QD es la del radio de Bohr del excitón correspondiente al material másico (bulk) en el semiconductor. El tamaño de un excitón es la distancia que hay entre un electrón que ha sido promovido a la BC del NC

semiconductor y el espacio que deja este electrón (o hueco en el NC, El par electrón-hueco es lo que se conoce como excitón).

1.10.1. QUANTUM DOT DE DOS ELECTRONES EN TRES DIMENSIONES

El problema de un QD de dos electrones en tres dimensiones (3D) está caracterizado por el Hamiltoniano (Two-electron quantum dot in a magnetic field: Analytical results, 1997);

$$\hat{H} = \sum_{j=1} \left\{ \frac{1}{2m^*} (\hat{P}_j - e\vec{A}_j)^2 + \frac{m^2}{2} [w_0^2(x_j^2 + y_j^2) + w_z^2 z_j^2] \right\} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (1.46)$$

El cual satisface la Ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (1.47)$$

En la ecuación (1.46) \hat{P} es el operador de momento y se define por $\hat{P}_j = -i\hbar\nabla_{\vec{r}_j}$.

Este Hamiltoniano puede simplificarse midiendo las distancias en Bohrs efectivos, es importante recalcar que, un Bohr efectivo no es igual a la unidad Bohr que está dada por la longitud del radio del átomo de Bohr, $a_0 = \frac{4\hbar^2\epsilon_0}{m_e e^2}$ en donde ϵ_0 es la constante dieléctrica en el vacío y m_e es la masa del electrón los cuales se miden usando un radio de Bohr efectivo que denominamos a^* . Así tenemos:

$$\vec{\tilde{r}}_j = \frac{\vec{r}_j}{a^*} \quad (1.48)$$

Donde;

$$a^* = a_0\epsilon \frac{m_e}{m^*} = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0\epsilon}{m^* e^2} \quad (1.49)$$

Si medimos la energía en Hartrees reducidos los cuales se definen:

$$E_h^* \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon a^*} \quad (1.50)$$

1.10.2. LA ECUACIÓN PARA EL MOVIMIENTO RELATIVO

Para esta sección se estableció su variable natural la coordenada r . Por lo tanto, se considera coordenadas esféricas polares, en cuyos términos la función de onda se escribe como (Annu., y otros, 2005):

$$\Psi_{\vec{r}}(\vec{r}) = \psi_r(r) Y_{l_r, m_r}(\theta_r, \varphi_r) \quad (1.51)$$

Ya que los dos lados tienen variables diferentes, podemos igualar separadamente las partes de esta ecuación a una constante $-\frac{l_r(l_r+1)}{2}$.

De aquí obtenemos las siguientes ecuaciones separadas para la parte radial y la angular:

$$-\frac{1}{2} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi_r(r)}{\partial r} \right) + \frac{1}{2} \frac{l_r(l_r+1)}{r^2} \psi_r(r) + \left(\frac{\tilde{\gamma}^2}{2} r^2 + \frac{1}{2r} \right) \psi_r(r) = \left(E_r'' + \frac{\hbar^* w_0}{4} \text{tm}_r \right) \psi_r(r) \quad (1.52)$$

Y

$$\frac{1}{2} \left[\frac{1}{\text{Sin}^2 \theta_r} \frac{\partial}{\partial \theta_r} \left(\text{Sen} \theta_r \frac{\partial}{\partial \theta_r} \right) - \frac{m_r^2}{\text{Sin}^2 \theta_r} \right] Y_{l_r, m_r}(\theta_r, \varphi_r) = -\frac{l_r(l_r+1)}{2} Y_{l_r, m_r}(\theta_r, \varphi_r) \quad (1.53)$$

La ecuación radial se puede simplificar cuando se introduce $\psi_r(r) = \frac{u(r)}{r}$

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{2} \frac{l_r(l_r+1)}{r^2} + \frac{1}{2r + \frac{\tilde{\gamma}^2}{2} r^2} \right] u(r) = E_r'' u(r) \quad (1.54)$$

En donde las energías están relacionadas por:

$$E_r'' = E_r' + \frac{\hbar^* w_0}{4} \text{tm}_r \quad (1.55)$$

Como veremos más adelante, existen soluciones analíticas en forma cerrada para ciertos valores de la variable $\tilde{\gamma}$ de la Ec. (1.54). Las soluciones dependen de los números cuánticos n_r y l_r . Si identificamos a estos valores particulares de la variable como:

$$\tilde{\gamma} = W_r(n_r, l_r) \quad (1.56)$$

Entonces podemos escribir la energía como:

$$E_r'' = W_r(n_r, l_r) \left(n_r + l_r + \frac{3}{2} \right) \quad (1.57)$$

Para esos valores particulares de $\tilde{\gamma} = W_r(n_r, l_r)$. Es decir, que para estos valores tenemos:

$$E'_r = 2W_r(n_r, l_r) \left(n_r + l_r + \frac{3}{2} \right) - \frac{\hbar^* w_0}{2} \text{tm}_r \quad (1.58)$$

CAPÍTULO 2

En esta sección desarrollaremos el sistema planteado de cuatro cuerpos que comprenden un bi-exciton, este análisis consta de formulación matemática que explique del comportamiento de las partículas obedeciendo las condiciones y consideraciones fijas, aplicando a la ecuación de Schrödinger y con el correcto uso del método de Jacobi para matrices simétricas para su resolución.

2. MÉTODOS Y TÉCNICAS

Se parte del problema mecánico-cuántico de cuatro partículas (dos huecos y dos electrones) en donde las interacciones entre hueco-hueco y electrón-electrón son Coulombianas y las interacciones entre los huecos y electrones son armónicas. Con estas condiciones se determina un Hamiltoniano H_0 . Esta definición del Hamiltoniano permite obtener una solución analítica para la función de onda de estas cuatro partículas basándonos en el enfoque NBO de la molécula Hookeana de H_2 . (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H2 Hookean molecule, 2005)

Usando soluciones analíticas obtenidas en trabajos anteriores para el Hamiltoniano H_0 se analiza la dependencia de la energía versus su distancia relativa de interacción del Bi-exciton dentro de QD, sin embargo esto se abordará haciendo uso del método de Jacobi, para definir así una matriz simétrica de transformación. En esta expresión H_0 es el Hamiltoniano exacto (que contiene todas las interacciones entre las partículas). Esta evaluación constituye la médula del presente trabajo. En caso de que no se pueda evaluarlas en forma analítica se explorará su evaluación en forma numérica-gráfica.

El desarrollo del tema se basa en la utilización de modelos simples de pocas partículas con potenciales armónicos y la aproximación de la masa efectiva, tanto para los electrones como para los huecos.

Ya que estos modelos han sido usados por varios investigadores para describir estos sistemas, el énfasis se pone en algunos de los artículos básicos dentro de este contexto. Se discute también la descripción de los QDs y excitones como parte de un problema de muchos cuerpos y se presentan someramente algunos de los métodos utilizados para este fin.

Para la realización de los cálculos y la resolución de las diferentes ecuaciones se utiliza ampliamente el software Wolfram Mathematica versión 10.0, además de realizar las operaciones de evaluación y la comprobación de los resultados obtenidos, establecidos como procedimientos analíticos.

El método implementado será de carácter investigativo teórico, por lo tanto, teniendo como base la teoría se procederá a un análisis físico-matemático del comportamiento del fenómeno estudiado.

2.1. ANÁLISIS DEL MODELO HOOKEANO PARA UN BIEXCITÓN UTILIZANDO UN MATRIZ SIMÉTRICA DE TRANSFORMACIÓN

Para resolver nuestro sistema de cuatro partículas se describirá brevemente el enfoque NBO del H_2 , donde la ecuación exacta de Schrödinger para una molécula Hookeano de H_2 puede ser desacoplada en base a las ecuaciones que describen el movimiento relativo de los electrones y el movimiento relativo de los núcleos, así mismo podemos decir que el movimiento de un modo colectivo representa un oscilador armónico tridimensional y el movimiento de una partícula libre expresado como una combinación lineal de las coordenadas individuales de los centros de masas de los núcleos y los electrones.

Ahora Se presenta una descripción del modelo NBO para un bi-excitón acoplado al cual nombraremos (*eehh*) bajo un sistema de Quantum Dot (QD) acoplados lateralmente, definiendo el Hamiltoniano de orden cero, que nos permitirá bajo ciertas condiciones sobre las masas y las constantes de acoplamiento, desacoplar el problema para su posterior resolución.

Se debe mencionar también que en este tipo de excitones es decir QD acoplados lateralmente las interacciones importantes son del tipo exciton-exciton, además como sabemos que estas estructuras son más estables dentro de bloques semiconductores, siendo éste un efecto esencial producido por la separación espacial de los QD acoplados.

Se debe tener en cuenta además, que debido a su construcción en bloques (electrones y huecos) serán fermiones, por lo tanto, un aspecto crucial en el enfoque

teórico para la interacción del exciton es la determinación de un potencial efectivo excitón-excitón el cual toma en cuenta, el intercambio Fermiónico y las fuerzas Coulombicas.

La descripción del sistema de dos excitones $X_2(eehh)$ requiere un Hamiltoniano de cuatro partículas involucrando dos electrones (ee) y dos huecos (hh) donde sus electrones y los huecos son caracterizados por sus respectivas masas efectivas m_e^* , m_h^* e interactúan a través de potenciales efectivos Coulombianos, es decir modificado a través de una constante dieléctrica particular.

El Hamiltoniano mecánico cuántico de cuatro partículas surge del tratamiento de un sistema bi-excitónico $X_2(eehh)$ siendo muy semejante a una molécula de H_2 . También tomaremos una ampliación del Hamiltoniano para un bi-exciton incluyendo potenciales imagen e imagen mutua o incluyendo potenciales harmónicos para cada partícula tomados desde un centro de masa común.

Para nuestro trabajo presentaremos un Hamiltoniano exacto para el bi-excitón dado por la Ec. (2.3) donde los potenciales harmónicos dependen de las distancias entre los electrones y los huecos.

Por reordenamiento de los términos definiremos el Hamiltoniano de orden cero desacoplado cuyas soluciones son precisamente las Non-Born-Oppenheimer exactas anteriormente obtenidas para el modelo Hookeano de la molécula de H_2 .

2.1.1. MODELO DE LA INTERACCIÓN EXCITÓN-EXCITON EN QUANTUM DOT

Se considera primeramente un Hamiltoniano general tipo Hookeano para nuestro sistema de cuatro partículas con un modelo de un sistema bi-exciton verdadero donde cada electrón está atrapado en un potencial harmónico centrado en cada hueco.

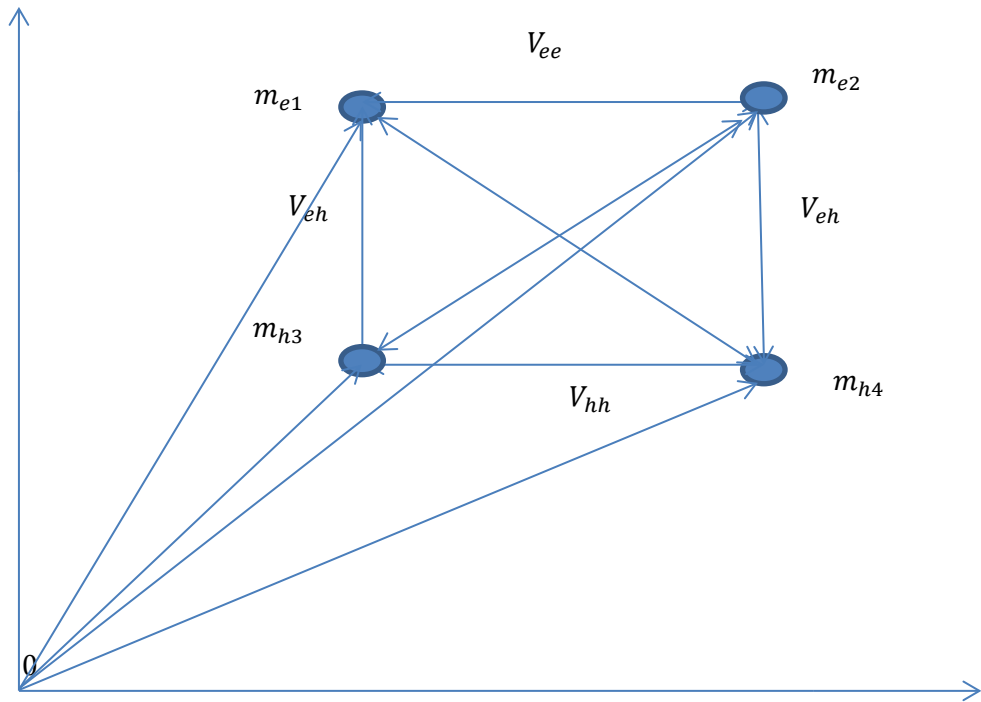


Fig. 2-1 Sistema de cuatro partículas, donde dos son electrones con carga negativa y dos son huecos con carga contraria.

2.1.2. MATRIZ SIMÉTRICA DE TRANSFORMACIÓN PARA EL SISTEMA DE CUATRO PARTÍCULAS

Por lo tanto para desacoplar el sistema vamos a considerar sus respectivas transformaciones en coordenadas de Jacobi considerando el movimiento relativo de los electrones y los huecos respectivamente y otras ecuaciones los movimientos de centros de masas, los cuales se establecen como translacionalmente invariantes, este enfoque fue implementado en trabajos anteriores para un sistema de tres partículas (Exact non-Born-Oppenheimer wave functions for three-particle Hookean systems with arbitrary masses, 2006), entonces para nuestro sistema vamos a establecer un conjunto de vectores $\{q_i\}_{i=1}^N$ definido experimentalmente. Sin embargo como los centros de masa no intervienen en la dinámica interna del sistema, esto separa el sistema y es descrito por medio del conjunto de vectores $\{t_i\}_{i=1}^N$, donde el primer sistema $N - 1$, son coordenadas translacionalmente invariantes y $t_N \equiv t_{cm}$, las coordenadas de centros de masas (Non-Born-Oppenheimer electronic and nuclear densities for a Hooke-Cologero three-particle model: Non-uniqueness of density-derived molecular structure., 2012). En general estos conjuntos matriciales están relacionados por las transformaciones;

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ \vdots \\ t_{N-1} \\ t_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_{11} & \cdots & V_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{N-1,1} & \cdots & V_{N-1,N} \\ V_{N1} & \cdots & V_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_{N-1} \\ q_N \end{pmatrix}$$

Denotado de forma simplificado como $t = \underline{V}q$.

Para garantizar la translacionalidad invariante y para definir las coordenadas de centros de masas los elementos de la matriz de transformación V deben satisfacer:

$$\sum_{j=1}^N V_{ij} = 0 \text{ con } i = 1, \dots, N-1, \text{ y}$$

$$V_{Ni} = \frac{m_i}{M} \text{ con } i = 1, \dots, N \quad (2.1)$$

Donde $M = \sum_{i=1}^N m_i$.

Además sabemos que la transformación inversa es $q = \underline{V}^{-1}t$. Donde de la condición (2.1) tenemos que:

$$V_{iN}^{-1} = 1 \text{ con } i = 1, 2, \dots, N. \quad (2.2)$$

Ahora debido a la separabilidad del Hamiltoniano en el conjunto de coordenadas $\{t_i\}$, es decir $\hat{H}(t_1, \dots, t_N) = \hat{H}_{\text{int}}(t_1, \dots, t_N) + \hat{H}_{\text{cm}}(t_N)$, las funciones de ondas pueden ser escritas como $\tilde{\Psi}(q_1, \dots, q_N) = \Psi_{\text{int}}(t_1, \dots, t_N) \Psi_{\text{cm}}(t_N)$ donde $\Psi_{\text{cm}}(t_N)$ solo representa las funciones de onda el movimiento libre de un paquete de ondas tridimensionales.

2.1.3. SISTEMA BI-EXCITON

Se considera primeramente un sistema de cuatro partículas idealizado, con sus respectivas interacciones inter-partículas bajo un sistema de coordenadas translacionalmente invariante (esto se explicará con más detalle posteriormente); es decir, el sistema bajo estudio expresado gráficamente en forma sencilla se muestra en la Fig.2.1.

Este sistema de partículas corresponde a un sistema bi-excitónico dentro de un QD, por lo tanto, estará determinado por su energía cinética y potencial con respecto a sistema de coordenadas establecidas para nuestro estudio, el cual se explicará con más detalle en secciones siguientes.

Seguidamente escribiremos el Hamiltoniano las masas efectivas.

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2} \left\{ -\frac{1}{m_e^*} \nabla^2 r_{e1} - \frac{1}{m_e^*} \nabla^2 r_{e2} - \frac{1}{m_h^*} \nabla^2 r_{h1} - \frac{1}{m_h^*} \nabla^2 r_{h2} \right\} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \left\{ \frac{1}{|r_{e1}-r_{e2}|} + \frac{1}{|r_{h1}-r_{h2}|} - \frac{1}{|r_{e1}-r_{h1}|} - \frac{1}{|r_{e1}-r_{h2}|} - \frac{1}{|r_{e2}-r_{h1}|} - \frac{1}{|r_{e2}-r_{h2}|} \right\} \quad (2.3)$$

Donde las masas m_e^* y m_h^* son las respectivas masas efectivas, como vemos aquí todas las interacciones entre los electrones y los huecos son del tipo Coulombicas que incluyen constantes dieléctricas efectivas ϵ .

Sin embargo estas interacciones no están desacopladas, por lo tanto no es posible obtener una solución analítica para el Hamiltoniano dado por la Ec. (2.3) por lo tanto podemos obtener soluciones aproximadas a través una diagonalización de este Hamiltoniano mediante un apropiado conjunto de matrices base.

2.1.4. MODELO HOOKEANO PARA CUATRO PARTICULAS

Se considera en forma general el sistema de cuatro partículas, donde dos partículas tienen cargas negativas $-Z_1e$ y $-Z_2e$ con masas m_1 y m_2 respectivamente y otras dos partículas con cargas positivas Z_Ae y Z_Be con masas m_3 y m_4 , esto nos permite libertad sobre las masas para examinar las condiciones impuestas sobre las mismas para alcanzar el desacoplamiento.

Debemos asumir también que las masas con cargas iguales interactúan a través de un potencial Coulombico y cuyas cargas son contrarias a través de un potencial armónico con una constante de fuerza armónica k_{oc} con $o = 1,2$ y $c = A,B$; por lo tanto el Hamiltoniano para nuestro sistema, está dado por:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (2.4)$$

Donde \hat{T} representa la energía cinética total del sistema de cuatro partículas y \hat{V} es la energía potencial total, para cuatro partículas, definido por:

$$\hat{V} = \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{hh} + \hat{V}_{eh} + \hat{V}_{Hookeano} \quad (2.5)$$

Entonces podemos establecer;

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{hh} + \hat{V}_{eh} + \hat{V}_{Hookeano} \quad (2.6)$$

Con;

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \nabla^2 r_1 + \frac{1}{m_2} \nabla^2 r_2 + \frac{1}{m_3} \nabla^2 R_A + \frac{1}{m_4} \nabla^2 R_B \right) \quad (2.7)$$

$$\hat{V}_{ee} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_1 Z_2}{|r_1 - r_2|} \quad (2.8)$$

$$\hat{V}_{hh} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_A Z_B}{|R_A - R_B|} \quad (2.9)$$

$$\hat{V}_{eh} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \left(-\frac{Z_1Z_A}{|r_1-R_A|} - \frac{Z_1Z_B}{|r_1-R_B|} - \frac{Z_2Z_A}{|r_2-R_A|} - \frac{Z_2Z_B}{|r_2-R_B|} \right) \quad (2.10)$$

$$\hat{V}_{Hookeano} = \frac{e^2}{a_0^{*3}4\pi\epsilon_0\epsilon} [k_{1A}(r_1 - R_A)^2 + k_{2A}(r_2 - R_A)^2 + k_{1B}(r_1 - R_B)^2 + k_{2B}(r_2 - R_B)^2] \quad (2.11)$$

Donde \hat{H} representa el Hamiltoniano total del sistema y está definido por;

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \nabla^2 r_1 + \frac{1}{m_2} \nabla^2 r_2 + \frac{1}{m_3} \nabla^2 R_A + \frac{1}{m_4} \nabla^2 R_B \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_1Z_2}{|r_1-r_2|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_AZ_B}{|R_A-R_B|} + \\ & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \left(-\frac{Z_1Z_A}{|r_1-R_A|} - \frac{Z_1Z_B}{|r_1-R_B|} - \frac{Z_2Z_A}{|r_2-R_A|} - \frac{Z_2Z_B}{|r_2-R_B|} \right) + \frac{e^2}{a_0^{*3}4\pi\epsilon_0\epsilon} [k_{1A}(r_1 - R_A)^2 + \\ & k_{2A}(r_2 - R_A)^2 + k_{1B}(r_1 - R_B)^2 + k_{2B}(r_2 - R_B)^2] \end{aligned} \quad (2.12)$$

De la Ec. (2.12) podemos establecer las soluciones analíticas exactas para un sistema molecular Hookeano H_2 desde el enfoque Non-Born-Oppenheimer.

Por lo tanto tenemos que;

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 = & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \nabla^2 r_1 + \frac{1}{m_2} \nabla^2 r_2 + \frac{1}{M_A} \nabla^2 R_A + \frac{1}{M_B} \nabla^2 R_B \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_1Z_2}{|r_1-r_2|} + \\ & \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_AZ_B}{|R_A-R_B|} + \frac{e^2}{a_0^{*3}4\pi\epsilon_0\epsilon} [k_{1A}(r_1 - R_A)^2 + k_{2A}(r_2 - R_A)^2 + k_{1B}(r_1 - R_B)^2 + \\ & k_{2B}(r_2 - R_B)^2] \end{aligned} \quad (2.13)$$

Donde \hat{H}_0 , representa las soluciones analíticas exactas desde el enfoque Non-Born-Oppenheimer con las correspondientes interacciones entre las masas con cargas diferentes no incluido en dicha perspectiva, por lo tanto para nuestro sistema esta definición se hace complementaria, representando una forma muy ideal del sistema estudiado.

Sin embargo como sabemos \hat{H}_0 , se define como el Hamiltoniano de orden cero o basal con soluciones ya encontradas en trabajos anteriores, sin embargo aclararemos que aquí se considera la interacción \hat{V}_{eh} como una perturbación, este hecho se explicara con más detalle en secciones posteriores.

2.1.5. SEPARACIÓN DEL SISTEMA DE CUATRO PARTICLAS

Reescribiremos la Ec. (2.12):

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_1} \nabla^2 r_1 + \frac{1}{m_2} \nabla^2 r_2 + \frac{1}{m_3} \nabla^2 R_A + \frac{1}{m_4} \nabla^2 R_B \right) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_1 Z_2}{|r_1 - r_2|} \\
& + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{Z_A Z_B}{|R_A - R_B|} \\
& + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \left(-\frac{Z_1 Z_A}{|r_1 - R_A|} - \frac{Z_1 Z_B}{|r_1 - R_B|} - \frac{Z_2 Z_A}{|r_2 - R_A|} \right. \\
& \left. - \frac{Z_2 Z_B}{|r_2 - R_B|} \right) \\
& + \frac{e^2}{a_0^*{}^3 4\pi\epsilon_0\epsilon} [k_{1A}(r_1 - R_A)^2 + k_{2A}(r_2 - R_A)^2 + k_{1B}(r_1 - R_B)^2 \\
& + k_{2B}(r_2 - R_B)^2]
\end{aligned}$$

Para simplificar la Ec. (2.12) utilizaremos unidades de Born modificadas $a_0^* = a_0\epsilon$ donde $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{e^2 m_e}$, la energía en unidades de Hartree modificadas $E_0^* = \frac{E_H}{\epsilon}$ donde $E_H = \frac{2e}{4\pi\epsilon_0 a_0}$ es la unidad de Hartree y las masas m_i y M_I para $i = 1, 2$. y $I = A, B$. respectivamente, son representados como múltiplos de m_e .

2.1.6. DESACOPLAMIENTO DEL SISTEMA

El primer paso para el proceso de desacoplamiento vamos a realizar un cambio de coordenadas y establecer una matriz de transformación; por lo tanto:

$$r = r_1 - r_2 \quad (2.14)$$

$$s = \frac{m_1 r_1 + m_2 r_2}{m_1 m_2} \quad (2.15)$$

$$R = R_A - R_B \quad (2.16)$$

$$S = \frac{M_A R_A + M_B R_B}{M_A M_B} \quad (2.17)$$

Luego la matriz de transformación es:

$$V = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ \frac{m_1}{m_1+m_2} & \frac{m_2}{m_1+m_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{M_A}{M_A+M_B} & \frac{M_B}{M_A+M_B} \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Sin embargo la matriz V debe cumplir las condiciones establecidas por el método de Jacobi para matrices cuadrados simétricas; por lo tanto vamos a realizar las siguientes comprobaciones:

La inversa de V ; definida por:

$$V^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{m_2}{m_1+m_2} & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{m_1}{m_1+m_2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{M_B}{M_A+M_B} & 1 \\ 0 & 0 & -\frac{M_A}{M_A+M_B} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Donde $VV^{-1} = U$ donde U es la matriz unitaria; entonces:

$$U = VV^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Por lo tanto podemos establecer F como la matriz diagonal:

$$\begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ t_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1} & \frac{-1}{m_2} & 0 & 0 \\ \frac{m_1+m_2}{m_1+m_2} & \frac{m_2}{m_1+m_2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{M_A}{M_A+M_B} & \frac{M_B}{M_A+M_B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix}$$

Para la energía cinética; se tiene:

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{m_2}{m_1+m_2} & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{m_1}{m_1+m_2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{M_B}{M_A+M_B} & 1 \\ 0 & 0 & -\frac{M_A}{M_A+M_B} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ t_4 \end{pmatrix}$$

$$F = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix}$$

Y

$$T = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ t_4 \end{pmatrix}$$

Donde T es la ortogonal.

2.1.7. DESACOPLAMIENTO DE LA ENERGÍA CINÉTICA

Aplicando la matriz de transformación V , tenemos que la energía cinética para nuestro sistema bi-excitónico, será;

$$q = V^{-1}T$$

$$q = \begin{pmatrix} \frac{t_1}{2} + t_2 \\ -\frac{t_1}{2} + t_2 \\ \frac{t_3}{2} + t_4 \\ -\frac{t_3}{2} + t_4 \end{pmatrix} \quad (2.20)$$

Ahora; procedemos a calcular \hat{T} ;

Vamos a empezar con el cambio de las variables:

$$\frac{m \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_4^2} + 4m \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_3^2} + M \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_2^2} + 4M \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_1^2}}{4mM}$$

Luego tenemos que:

$$\begin{aligned} \hat{T} &= -\frac{\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_4^2}}{4M} - \frac{\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_3^2}}{M} - \frac{\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_2^2}}{4m} - \frac{\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{\partial t_1^2}}{m} \\ \hat{T} &= -\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4M \partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{M \partial t_3^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4m \partial t_2^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{m \partial t_1^2} \end{aligned} \quad (2.21)$$

Se debe aclarar que las condiciones sobre las masas de las cuatro partículas se determinan por inspección ya que los dos electrones tienen masas iguales y similarmente para los huecos.

Como se ve para el sistema bi-excitónico el cálculo de su energía cinética no conlleva mucha complejidad debido a que sus variables siempre se encuentran desacopladas, sin embargo el problema surge al desacoplar estos mismo términos de las energías potenciales

2.1.8. DESACOPLAMIENTO DE LA ENERGÍA POTENCIAL.

Como se verá a continuación se puede aplicar el mismo método utilizado para la energía cinética teniendo en cuenta que la matriz de transformación debe ser la inversa de la matriz V .

Por lo tanto de la Ec. (2.4), la Ec. (2.5) y Ec. (2.20) tenemos;

$$F(q_i) = V^{-1}T(t_i) \quad \text{con } i = 1, 2, 3, 4$$

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 1 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ t_3 \\ t_4 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ q_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{t_1}{2} + t_2 \\ -\frac{t_1}{2} + t_2 \\ \frac{t_3}{2} + t_4 \\ -\frac{t_3}{2} + t_4 \end{pmatrix}$$

Ahora para \hat{V}_{ee} y \hat{V}_{hh} tenemos;

$$\hat{V}_{ee} = \frac{z_1 z_2}{|r_1 - r_2|} = \frac{z_1 z_2}{|q_1 - q_2|} = \frac{z_1 z_2}{|t_1|} \quad (2.22)$$

Y

$$\hat{V}_{hh} = \frac{z_1 z_2}{|R_A - R_B|} = \frac{z_1 z_2}{|q_3 - q_4|} = \frac{z_1 z_2}{|t_3|} \quad (2.23)$$

Sin embargo para el potencial Hookeano dado por la Ec. (2.11) es más complejo e incluye términos acoplados, por lo tanto aplicando la Ec. (2.20) tenemos;

$$\hat{V}_{Hookeano} = k_{1A}(r_1 - R_A)^2 + k_{2A}(r_2 - R_A)^2 + k_{1B}(r_1 - R_B)^2 + k_{2B}(r_2 - R_B)^2 \quad (2.24)$$

$$\hat{V}_{Hookeano} = k_{1A}[(q_1 - q_3)^2] + k_{2A}[(q_2 - q_3)^2] + k_{1B}[(q_1 - q_4)^2] + k_{2B}[(q_2 - q_4)^2] \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \hat{V}_{Hookeano} &= k_B \left(\frac{t_1^2}{4} + t_1 t_2 + t_2^2 + \frac{t_1 t_3}{2} + t_2 t_3 + \frac{t_3^2}{4} - t_1 t_4 - 2t_2 t_4 - t_3 t_4 + t_4^2 \right) + \\ &k_{2B} \left(\frac{t_1^2}{4} - t_1 t_2 + t_2^2 - \frac{t_1 t_3}{2} + t_2 t_3 + \frac{t_3^2}{4} + t_1 t_4 - 2t_2 t_4 - t_3 t_4 + t_4^2 \right) + k_A \left(\frac{t_1^2}{4} + t_1 t_2 + \right. \\ &t_2^2 - \frac{t_1 t_3}{2} - t_2 t_3 + \frac{t_3^2}{4} - t_1 t_4 - 2t_2 t_4 + t_3 t_4 + t_4^2 \left. \right) + k_{2A} \left(\frac{t_1^2}{4} - t_1 t_2 + t_2^2 + \frac{t_1 t_3}{2} - t_2 t_3 + \right. \\ &\left. \frac{t_3^2}{4} + t_1 t_4 - 2t_2 t_4 + t_3 t_4 + t_4^2 \right) \\ \hat{V}_{Hookeano} &= \left(\frac{k_A}{4} + \frac{k_{2A}}{4} + \frac{k_B}{4} + \frac{k_{2B}}{4} \right) t_1^2 + (k_A + k_{2A} + k_B + k_{2B}) t_2^2 + \left(\frac{k_A}{4} + \frac{k_{2A}}{4} + \frac{k_B}{4} + \right. \\ &\left. \frac{k_{2B}}{4} \right) t_3^2 + (k_A + k_{2A} - k_B - k_{2B}) t_3 t_4 + (k_A + k_{2A} + k_B + k_{2B}) t_4^2 + t_2 [(-k_A - k_{2A} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& k_B + k_{2B})t_3 + (-2k_A - 2k_{2A} - 2k_B - 2k_{2B})t_4] + t_1 [(k_A - k_{2A} + k_B - k_{2B})t_2 + \\
& (-\frac{k_A}{2} + \frac{k_{2A}}{2} + \frac{k_B}{2} - \frac{k_{2B}}{2})t_3 + (-k_A + k_{2A} - k_B + k_{2B})t_4] \\
\hat{V}_{Hookeano} = & \frac{1}{4}(k_A + k_{2A} + k_B + k_{2B})t_1^2 + (k_A + k_{2A} + k_B + k_{2B})t_2^2 + \frac{1}{4}(k_A + k_{2A} + \\
& k_B + k_{2B})t_3^2 + (k_A + k_{2A} - k_B - k_{2B})t_3t_4 + (k_A + k_{2A} + k_B + k_{2B})t_4^2 + \\
& t_2[(-k_A - k_{2A} + k_B + k_{2B})t_3 - 2(k_A + k_{2A} + k_B + k_{2B})t_4] + t_1 [(k_A - k_{2A} + k_B - \\
& k_{2B})t_2 - \frac{1}{2}(k_A - k_{2A} - k_B + k_{2B})t_3 - (k_A - k_{2A} + k_B - k_{2B})t_4] \quad (2.26)
\end{aligned}$$

Luego las condiciones para construir las coeficientes de orden cero de los términos acoplados (t_1t_2) , (t_1t_3) , (t_3t_4) , (t_2t_4) , (t_2t_3) y (t_1t_4) son;

$$m_2(k_{1A} + k_{1B}) = m_1(k_{2A} + k_{2B}) \quad (2.27)$$

$$M_B(k_{1A} + k_{1B}) = M_A(k_{2A} + k_{2B}) \quad (2.28)$$

De la misma forma con en el enfoque (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) estas condiciones pueden ser satisfechas estableciendo $m_2 = \alpha m_1$ y $M_B = \alpha M_A$, $(k_{2A} + k_{2B}) = \alpha(k_{1A} + k_{1B})$ para $\alpha = 1$ tenemos en particular que los términos de acoplamiento se hace cero cuando $m_1 = m_2 = m$ y $m_3 = m_4 = M$; ya que por inspección para un sistema bi-excitónico $m_{e1} = m_{e2}$ y $m_{h1} = m_{h2}$, por lo tanto tenemos que $(k_{2A} + k_{2B}) = (k_{1A} + k_{1B})$.

Además brevemente se recalca que la última condición puede ser satisfecha asumiendo que hay dos constantes de acoplamiento, la primero caracterizada por un potencial armónico de corto alcance de la interacción del electrón 1 con el hueco A y el electrón 2 con el hueco B; entonces tenemos que $k_C = k_{1A} = k_{2B}$ y otra potencial armónico de largo alcance caracterizado por la interacción del electrón 1 con el hueco B y el electrón 2 con el hueco A, por lo tanto tenemos que $k_L = k_{1B} = k_{2A}$.

$$\begin{aligned}
\hat{V}_{Hookeano} = & \frac{1}{2}(k_L + k_C)t_1^2 + 2(k_L + k_C)t_2^2 + (k_L - k_C)t_1t_3 + \frac{1}{2}(k_L + k_C)t_3^2 - \\
& 4(k_L + k_C)t_2t_4 + 2(k_L + k_C)t_4^2 \quad (2.29)
\end{aligned}$$

Sin embargo esto no hace desaparecer los términos (t_1t_3) y (t_2t_4)

Por tanto introduciremos las siguientes condiciones $K^+ = k_L + k_C$ y $K^- = k_L - k_C$.

$$\begin{aligned}
\hat{V}_{Hookeano} = & \frac{1}{2}(K^+)t_1^2 + 2(K^+)t_2^2 + (K^-)t_1t_3 + \frac{1}{2}(K^+)t_3^2 - 4(K^+)t_2t_4 + 2(K^+)t_4^2 \\
& (2.30)
\end{aligned}$$

Luego mediante el análisis de los fenómenos físico considerados como perturbaciones dentro de sistemas de muchos cuerpos, podemos asumir de la misma manera que en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011), que todos los electrones y los huecos tienen el mismo potencial armónico de interacción, es decir, que $k_L = k_C$ entonces tendríamos de $K^- = 0$, donde este es el caso de la molécula Hookeano de \mathbf{H}_2 , donde no aparece el termino acoplado ($t_1 t_3$).

Entonces se asume que el potencial armónico de corto alcance es mucho más fuerte que el potencial de largo alcance $K^+ > K^-$, por lo tanto podemos considerar al termino asociado con K^- como una perturbación (véase Anexo D) sin embargo esto también implica que el presente trabajo resulta ser un tratamiento aproximado.

Luego de la Ec. (2.4), Ec. (2.5) y Ec. (2.6) tenemos:

$$\hat{V} = \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{hh} + \hat{V}_{Hookeano} \quad (2.31)$$

$$\hat{V} = \frac{Z_1 Z_2}{|t_1|} + \frac{Z_1 Z_2}{|t_3|} + \frac{1}{2}(K^+)t_1^2 + 2(K^+)t_2^2 + \frac{1}{2}(K^+)t_3^2 - 4(K^+)t_2 t_4 + 2(K^+)t_4^2 \quad (2.32)$$

Además, está claro que estas transformaciones no desacoplan los potenciales Coulombicos que aparecen en \hat{V}_{eh} . La presencia de los términos acoplados ($t_2 t_4$) visto en la Ec. (2.30) no evita el desacoplamiento de la ecuación.

En base a los razonamientos anteriores vamos a separar un Hamiltoniano de orden cero más una corrección de primer orden.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1 \quad (2.33)$$

Donde;

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{t_1} + \hat{H}_{t_3} + \hat{H}_{t_2, t_4} \quad (2.34)$$

Y donde:

$$\hat{H}_1 = \hat{V}_{eh} - K^- t_1 t_3 \quad (2.35)$$

Donde \hat{H}_1 se define con el Hamiltoniano de la corrección de primer orden, sin embargo el desarrollo y desacoplamiento del mismo se deja para futuros trabajos.

Luego de la Ec. (2.5), Ec. (2.32) y Ec. (2.34) tenemos:

$$\hat{V} = \frac{Z_1 Z_2}{|t_1|} + \frac{Z_1 Z_2}{|t_3|} + \frac{1}{2}(K^+)t_1^2 + 2(K^+)t_2^2 + \frac{1}{2}(K^+)t_3^2 - 4(K^+)t_2 t_4 + 2(K^+)t_4^2 \quad (2.36)$$

Por lo tanto de la Ec. (2.21), Ec. (2.34) y Ec. (2.36) tenemos que:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4M\partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{M\partial t_3^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4m\partial t_2^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{m\partial t_1^2} + \frac{Z_1 Z_2}{|t_1|} + \frac{Z_1 Z_2}{|t_3|} + \frac{1}{2}(K^+)t_1^2 + 2(K^+)t_2^2 + \frac{1}{2}(K^+)t_3^2 - 4(K^+)t_2 t_4 + 2(K^+)t_4^2 \quad (2.37)$$

Como \hat{H}_0 satisface la ecuación de Schrödinger;

$$\hat{H}_0 \Psi_0(t_1, t_2, t_3, t_4) = E_0 \Psi_0(t_1, t_2, t_3, t_4) \quad (2.38)$$

Estableciendo $\Psi_0(t_1, t_2, t_3, t_4) = \Psi_{t_1}(t_1)\Psi_{t_3}(t_3)\Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4)$ con la energía total del estado basal o fundamental, es decir la energía de orden cero $E_0 = E_{t_1} + E_{t_3} + E_{t_2, t_4}$ podemos desacoplar la ecuación de Schrödinger de orden cero; en lo siguiente.

Asumiremos $Z_1 = Z_2 = Z_A = Z_B = 1$

De la Ec. (5.1.7.17) tenemos;

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4M\partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{M\partial t_3^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4m\partial t_2^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{m\partial t_1^2} + \frac{1}{|t_1|} + \frac{1}{|t_3|} + \frac{1}{2}(K^+)t_1^2 + 2(K^+)t_2^2 + \frac{1}{2}(K^+)t_3^2 - 4(K^+)t_2 t_4 + 2(K^+)t_4^2 \right] \Psi_{t_1}(t_1)\Psi_{t_3}(t_3)\Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) = E_{t_1}\Psi_{t_1}(t_1)E_{t_3}\Psi_{t_3}(t_3)E_{t_2, t_4}\Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \quad (2.39)$$

Luego desacoplando tenemos:

$$\left(\frac{t_1^2 K^+}{2} + \frac{1}{\text{Abs}[t_1]} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{m\partial t_1^2} \right) \Psi_{t_1}(t_1) = E_{t_1} \Psi_{t_1}(t_1) \quad (2.40)$$

$$\left(\frac{t_3^2 K^+}{2} + \frac{1}{\text{Abs}[t_3]} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{M\partial t_3^2} \right) \Psi_{t_3}(t_3) = E_{t_3} \Psi_{t_3}(t_3) \quad (2.41)$$

$$\left(2t_2^2 K^+ - 4t_2 t_4 K^+ + 2t_4^2 K^+ - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4M\partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4m\partial t_2^2} \right) \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) = E_{t_2, t_4} \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \quad (2.42)$$

2.1.9. SOLUCIONES

Del análisis de la expresión de la Ec. (2.40) en el tratamiento Non-Born Oppenheimer de la molécula Hookeano de H_2 .

$$\frac{m}{2} \left(\frac{t_1^2 K^+}{2} + \frac{1}{\text{Abs}[t_1]} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{m\partial t_1^2} \right) \Psi_{t_1}(t_1) = E_{t_1} \Psi_{t_1}(t_1) \frac{m}{2}$$

$$\left(-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2\partial t_1^2} + \frac{mK^+}{4} t_1^2 + \frac{m}{2} \frac{1}{\text{Abs}[t_1]} \right) \Psi_{t_1}(t_1) = \frac{mE_{t_1}}{2} \Psi_{t_1}(t_1)$$

Luego consideremos que;

$$E_1 = \frac{mE_{t_1}}{2}, \quad W_1^2 = \frac{mK^+}{2}, \quad K_1 = m, \quad \text{Abs}[t_1] = t_1 \quad (2.43)$$

$$\left(-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2\partial t_1^2} + \frac{W_1^2}{2} t_1^2 + \frac{1}{2} \frac{K_1}{t_1}\right) \Psi_{t_1}(t_1) = E_1 \Psi_{t_1}(t_1) \quad (2.44)$$

De la misma manera para t_3 tenemos;

$$\begin{aligned} \frac{M}{2} \left(\frac{t_3^2 K^+}{2} + \frac{1}{\text{Abs}[t_3]} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{M \partial t_3^2} \right) \Psi_{t_3}(t_3) &= E_{t_3} \Psi_{t_3}(t_3) \frac{M}{2} \\ \left(-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2 \partial t_3^2} + \frac{MK^+}{4} t_3^2 + \frac{M}{2} \frac{1}{\text{Abs}[t_3]} \right) \Psi_{t_3}(t_3) &= \frac{ME_{t_3}}{2} \Psi_{t_3}(t_3) \end{aligned}$$

Con;

$$E_3 = \frac{E_{t_3} M}{2}, \quad W_3^2 = \frac{MK^+}{2}, \quad K_3 = M, \quad \text{Abs}[t_3] = t_3 \quad (2.45)$$

$$\left(-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2\partial t_3^2} + \frac{W_3^2}{2} t_3^2 + \frac{1}{2} \frac{K_3}{t_3}\right) \Psi_{t_3}(t_3) = E_3 \Psi_{t_3}(t_3) \quad (2.46)$$

De la misma forma para la Ec. (2.42) con respecto a la Ec. (2.21) en el tratamiento Non-Born Oppenheimer de la molécula Hookeano de H_2 tenemos que;

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4M \partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4m \partial t_2^2} + 2K^+(t_2^2 - 2t_2 t_4 + t_4^2) \right] \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \\ &= E_{t_2, t_4} \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \\ 2M &\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4M \partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{4m \partial t_2^2} + 2K^+(t_2^2 - 2t_2 t_4 + t_4^2) \right] \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \\ &= E_{t_2, t_4} \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) 2M \\ &\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2\partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2 \frac{m}{M} \partial t_2^2} + 4MK^+(t_2^2 - 2t_2 t_4 + t_4^2) \right] \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \\ &= 2ME_{t_2, t_4} \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \end{aligned}$$

Con;

$$E_{2,4} = 2ME_{t_2, t_4}, \quad u = \frac{m}{M}, \quad W_{2,4}^2 = MK^+ \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2\partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2u \partial t_2^2} + 4W_{2,4}^2(t_2^2 + t_4^2 - 2t_2 t_4) \right] \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) = \\ &E_{2,4} \Psi_{t_2, t_4}(t_2, t_4) \end{aligned} \quad (2.48)$$

Por inspección la Ec. (2.48) es muy similar la Ec. (8) en el tratamiento NBO de la molécula Hookeano de H_2 (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H2 Hookean molecule, 2005) por lo que está ecuación puede ser desacoplada introduciendo la nueva

variable \tilde{t}_2 para luego definir las nuevas coordenadas P y Q a través de una rotación unitaria del ángulo θ .

Donde;

$$\tilde{t}_2 = \sqrt{u}t_2 \quad (2.49)$$

$$M_r = \begin{pmatrix} \text{Cos}[\theta] & \text{Sin}[\theta] \\ -\text{Sin}[\theta] & \text{Cos}[\theta] \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

Donde es $\theta = \tan^{-1}(u)$ y $u = \frac{m}{M}$ o de la misma manera condiciones que se establecen en (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H2 Hookean molecule, 2005):

$$\text{Sin}\theta = \frac{\sqrt{u}}{\sqrt{u+1}} = \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{m+M}}, \quad \text{Cos}\theta = \frac{\sqrt{1}}{\sqrt{u+1}} = \frac{\sqrt{M}}{\sqrt{m+M}} \quad (2.51)$$

$$J = \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

$$G = \begin{pmatrix} \tilde{t}_2 \\ t_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{t_2}{\sqrt{u}} \\ t_4 \end{pmatrix} \quad (2.53)$$

La coordenada P y Q se relacionan la matriz simétrica real M_r , es decir aplicamos a está matriz el método de Jacobi;

Entonces la matriz de transformación inversa será;

$$M_{r(in)} = \begin{pmatrix} \text{Cos}[\theta] & -\text{Sin}[\theta] \\ \text{Sin}[\theta] & \text{Cos}[\theta] \end{pmatrix}$$

Comprobaremos su simetría, por lo tanto;

$$M_r M_{r(in)} = U$$

$$\begin{pmatrix} \text{Cos}[\theta] & \text{Sin}[\theta] \\ -\text{Sin}[\theta] & \text{Cos}[\theta] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \text{Cos}[\theta] & -\text{Sin}[\theta] \\ \text{Sin}[\theta] & \text{Cos}[\theta] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Cos}[\theta]^2 + \text{Sin}[\theta]^2 & 0 \\ 0 & \text{Cos}[\theta]^2 + \text{Sin}[\theta]^2 \end{pmatrix}$$

Con $\text{Cos}[\theta]^2 + \text{Sin}[\theta]^2 = 1$;

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Por lo tanto;

$$J = M_{r(in)}G$$

$$\begin{pmatrix} \tilde{t}_2 \\ t_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{Cos}[\theta] & -\text{Sin}[\theta] \\ \text{Sin}[\theta] & \text{Cos}[\theta] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} P\text{Cos}[\theta] - Q\text{Sin}[\theta] \\ Q\text{Cos}[\theta] + P\text{Sin}[\theta] \end{pmatrix} \quad (2.54)$$

De la Ec. (2.48) y Ec. (2.49) se tiene los términos acoplados $\tilde{t}_2 t_4$ y si resolvemos utilizando la Ec. (2.54) se tiene que:

$$\left\{ -\frac{\partial^2 f[t_1, \tilde{t}_2, t_3, t_4]}{2\partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, \tilde{t}_2, t_3, t_4]}{2u\partial \left(\frac{\tilde{t}_2}{\sqrt{u}}\right)^2} + W_{2,4}^2 \left[\left(\frac{\tilde{t}_2}{\sqrt{u}}\right)^2 + t_4^2 - 2\left(\frac{\tilde{t}_2}{\sqrt{u}}\right)t_4 \right] \right\} \Psi_{\tilde{t}_2, t_4}(\tilde{t}_2, t_4) = E_{2,4} \Psi_{\tilde{t}_2, t_4}(\tilde{t}_2, t_4)$$

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, \tilde{t}_2, t_3, t_4]}{2\partial t_4^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, \tilde{t}_2, t_3, t_4]}{2\partial \tilde{t}_2^2} + 4W_{2,4}^2 \left(\frac{\tilde{t}_2^2}{u} - \frac{2\tilde{t}_2 t_4}{\sqrt{u}} + t_4^2 \right) \right] \Psi_{\tilde{t}_2, t_4}(\tilde{t}_2, t_4) = E_{2,4} \Psi_{\tilde{t}_2, t_4}(\tilde{t}_2, t_4) \quad (2.55)$$

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial P^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q} + 4W_{2,4}^2 \left(P^2 \text{Cos}[\theta]^2 + \frac{Q^2 \text{Cos}[\theta]^2}{u^2} - \frac{2PQ \text{Cos}[\theta]^2}{\sqrt{u}} - 2PQ \text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta] + \frac{2PQ \text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta]}{u^2} - \frac{2P^2 \text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta]}{\sqrt{u}} + \frac{2Q^2 \text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta]}{\sqrt{u}} + Q^2 \text{Sin}[\theta]^2 + \frac{P^2 \text{Sin}[\theta]^2}{u^2} + \frac{2PQ \text{Sin}[\theta]^2}{\sqrt{u}} \right) \right] \Psi_{P,Q}(P, Q) = E_{2,4} \Psi_{P,Q}(P, Q)$$

Luego simplificando tenemos:

$$\left\{ -\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial P^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q^2} + 4W_{2,4}^2 \left[\frac{(Q \text{Cos}[\theta] + P \text{Sin}[\theta])^2}{u^2} + (P \text{Cos}[\theta] - Q \text{Sin}[\theta])^2 + \frac{2(Q \text{Cos}[\theta] + P \text{Sin}[\theta])(-P \text{Cos}[\theta] + Q \text{Sin}[\theta])}{\sqrt{u}} \right] \right\} \Psi_{P,Q}(P, Q) = E_{2,4} \Psi_{P,Q}(P, Q)$$

$$-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial P^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q^2} + 4W_{2,4}^2 \left[\left(\frac{\text{Cos}[\theta]^2}{u^2} + \frac{2\text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta]}{\sqrt{u}} + \text{Sin}[\theta]^2 \right) Q^2 + \left(\text{Cos}[\theta]^2 - \frac{2\text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta]}{\sqrt{u}} + \frac{\text{Sin}[\theta]^2}{u^2} \right) P^2 + \left(-\frac{2\text{Cos}[\theta]^2}{\sqrt{u}} - 2\text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta] + \frac{2\text{Cos}[\theta] \text{Sin}[\theta]}{u^2} + \frac{2\text{Sin}[\theta]^2}{\sqrt{u}} \right) PQ \right] \Psi_{P,Q}(P, Q) = E_{2,4} \Psi_{P,Q}(P, Q)$$

$$-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial P^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q^2} + \frac{4W_{2,4}^2}{u} \left[(\text{Cos}[\theta] + \sqrt{u} \text{Sin}[\theta])^2 Q^2 + (-\sqrt{u} \text{Cos}[\theta] + \text{Sin}[\theta])^2 P^2 - (2\sqrt{u} \text{Cos}[2\theta] + (u-1) \text{Sin}[2\theta]) PQ \right] \Psi_{P,Q}(P, Q) = E_{2,4} \Psi_{P,Q}(P, Q) \quad (2.56)$$

Donde;

$$2\sqrt{u} \text{Cos}[2\theta] + (u-1) \text{Sin}[2\theta] = 0 \quad (2.57)$$

$$\theta = \tan^{-1}[\sqrt{u}] + n\pi \quad (2.58)$$

$$\theta = -\text{Cot}^{-1}[\sqrt{u}] + n \quad (2.59)$$

Permiten que las constantes de acoplamiento desaparezcan este enfoque es tratado en trabajos anteriores por Pino y Mujica, además la Ec. (2.58) también establece que los

coeficientes de P^2 sea cero mientras que la Ec. (2.59) hace lo mismo con los términos de Q^2 luego tenemos:

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial P^2} + \frac{4(u+1)W_{2,4}^2}{u} Q^2 \right] \Psi_{P,Q}(P, Q) = E_{2,4} \Psi_{P,Q}(P, Q) \quad (2.60)$$

De la misma manera que para el desacoplamiento de t_1 , t_3 y $t_2 t_4$ establecemos que $\Psi_{P,Q}(P, Q) = \Psi_P(P)\Psi_Q(Q)$ con $E_{2,4} = E_P + E_Q$ por lo tanto obtenemos;

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial P^2} - \frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q^2} + \frac{4(u+1)W_{2,4}^2}{u} Q^2 \right] \Psi_P(P)\Psi_Q(Q) = E_{2,4} \Psi_P(P)\Psi_Q(Q) \quad (2.61)$$

Luego tenemos;

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial P^2} \right] \Psi_P(P) = E_P \Psi_P(P) \quad (2.62)$$

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q^2} + \frac{4(u+1)W_{2,4}^2}{u} Q^2 \right] \Psi_Q(Q) = E_Q \Psi_Q(Q) \quad (2.63)$$

Donde $\frac{W_Q^2}{2} = \frac{2(u+1)W_{2,4}^2}{u}$ entonces tenemos que;

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, P, t_3, Q]}{2\partial Q^2} + \frac{W_Q^2}{2} Q^2 \right] \Psi_Q(Q) = E_Q \Psi_Q(Q) \quad (2.64)$$

Se considera la solución de la Ec. (2.44) según el tratamiento NBO de la molécula de H_2 , reescribiendo la función de onda como un producto de sus partes radial y angular, conociendo que $\Psi_{t_1}(t_1) = \psi_{t_1}(t_1)Y_{l_{t_1}, m_{t_1}}(\theta_{t_1}, \varphi_{t_1})$ y estableciendo como $\psi_{t_1}(t_1) = \frac{u_{t_1}(t_1)}{t_1}$ por lo tanto la ecuación radial es;

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2\partial t_1^2} + \frac{l_{t_1}(l_{t_1}+1)}{2t_1^2} + \frac{W_1^2 t_1^2}{2} \right] u_{t_1}(t_1) = E_{u_{t_1}} u_{t_1}(t_1) \quad (2.65)$$

Cuyas soluciones generales establecidas por NBO (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H2 Hookean molecule, 2005), Taut (Two electrons in an external oscillator potencial. Particular analytic solutions of a Coulomb correlation pproblem , 1993)

Son:

$$u_{n_{t_1}, l_{t_1}}(t_1) = t^{l_{t_1}+1} e^{\left[-\frac{W_1(n_{t_1}, l_{t_1})}{2} \right]} \sum_{i=0}^{n_{t_1}} a_i t_1^i \quad (2.66)$$

Como para los tratamientos anteriores se sabe que esta solución solo es posible para valores particulares de $W_1(n_{t_1}, l_{t_1})$ y recalamos que, esto se debe al hecho de que solo para pares específicos de números cuánticos n_{t_1}, l_{t_1} las constantes de acoplamiento $W_1(n_{t_1}, l_{t_1})$ están determinados a través de una solución de las relaciones de recursión

de los coeficientes de expansión tratados y explicados anteriormente en NBO y Taut (Two electrons in an external oscillator potencial. Particular analytic solutions of a Coulomb correlation pproblem , 1993), con su correspondiente energía definida como;

$$E_{u_{t_1}} = W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left(n_{t_1} + l_{t_1} + \frac{3}{2} \right) \quad (2.67)$$

De la misma manera para la Ec. (2.46) se establecen relaciones similares donde $\Psi_{t_3}(t_3) = \psi_{t_3}(t_3) Y_{l_{t_3}, m_{t_3}}(\theta_{t_3}, \varphi_{t_3})$ y $\psi_{t_3}(t_3) = \frac{u_{t_3}(t_3)}{t_3}$ tenemos que la solución radial es;

$$\left[-\frac{\partial^2 f[t_1, t_2, t_3, t_4]}{2\partial t_3^2} + \frac{l_{t_3}(l_{t_3}+1)}{2t_3^2} + \frac{W_3^2 t_3^2}{2} \right] u_{t_3}(t_3) = E_{u_{t_3}} u_{t_3}(t_3) \quad (2.68)$$

$$u_{n_{t_3}, l_{t_3}}(t_3) = t^{l_{t_3}+1} e^{\left[-\frac{W_3(n_{t_3}, l_{t_3})}{2} \right]} \sum_{i=0}^{n_{t_3}} b_i t_3^i \quad (2.69)$$

Por inspección se sabe que las constantes $W_3(n_{t_3}, l_{t_3})$ y $W_1(n_{t_1}, l_{t_1})$ no son independientes ya que de la misma forma que en el modelo Hookeano de H_2 las Ec. (2.43) y Ec. (2.45) establecen que están relacionados por;

$$W_3^2 = \frac{M \left(\frac{2W_1^2}{m} \right)}{2}$$

$$\sqrt{W_3^2} = \sqrt{\frac{M}{m} (W_1^2)}$$

$$W_3 = \sqrt{\frac{M}{m}} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \quad (2.70)$$

Como se ha visto en el Modelo para un Bi exciton en un Quantum Dot basados en soluciones exactas para la molécula de H_2 no es posible tener un W_3 que satisfaga simultáneamente la Ec. (2.70) y las relaciones de recursión para los coeficientes $\{b_i\}$ de la Ec. (2.69) por lo tanto como en el NBO apartado C mediante la Ec. (35) se establece la constante $W_3^{(t_1)}$ para valores específicos de $W_1(n_{t_1}, l_{t_1})$, de la misma manera llamaremos $W_3^{(t_3)}(n_{t_3}, l_{t_3})$, esto es posible debido al hecho de considerar el mismo modelo establecidos en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) con la diferencia de utilizar una matriz de transformación para el análisis teórico.

Para conservar la forma analítica de la solución de la parte radial de la Ec. (2.69) se selecciona como se establece en NBO los valores $W_3^{(t_3)}(n_{t_3}, l_{t_3})$ más pequeños

calculados por un $W_1(n_{t_1}, l_{t_1})$, luego denotaremos este valor como $W_3^{(t_3^*)}(n_{t_3}, l_{t_3})$ con una energía dada por;

$$E_{u_{t_3}} = W_3^{(t_3^*)}(n_{t_3}, l_{t_3}) \left(n_{t_3} + l_{t_3} + \frac{3}{2} \right) \quad (2.71)$$

La Ec. (2.62) describe el movimiento de una partícula libre como se explica en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) y NBO de la molécula de H_2 ; tenemos que;

$$E_p = 0 \quad (2.72)$$

Entonces $\Psi_p(P)$ es constante y se desprecia.

Mientras que para la Ec. (2.64) describe un oscilador armónico tridimensional con sus respectivas funciones de onda escritas como un producto de su parte radial y angular como en la NBO, es decir que para $\Psi_Q(Q) = \psi_Q(Q)Y_{l_Q, m_Q}(\theta_Q, \varphi_Q)$ es conocido la solución de su parte radial y está defino por:

$$\psi_{v_Q, l_Q}(Q) = N_{v_Q, l_Q} Q^{l_Q} e^{\left[\left(-\frac{W_Q}{2} \right) Q^2 \right]} F\left(-v_Q, l_Q + \frac{3}{2}, W_Q Q^2 \right) \quad (2.73)$$

Donde $F\left(-v_Q, l_Q + \frac{3}{2}, W_Q Q^2 \right)$ es la función híper-geométrica confluyente, asociada con una energía definida por;

$$E_Q = W_Q \left(2n_Q + l_Q + \frac{3}{2} \right) \quad (2.74)$$

Es necesario aclarar que los resultados no sufrirán un cambio significativo sobre todo las ecuaciones que definen la energía del sistema de cuatro partículas, es decir estos resultados tendrán mucha concordancia con los establecidos en trabajos anteriores como se ve en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011).

CAPÍTULO 3

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo se presentan los resultados analíticos con la aplicación de una matriz simétrica de transformación, a través del método de Jacobi para el tratamiento del modelo de un bi-excitón acoplados en QDs laterales y las soluciones de la ecuación de Schrödinger, el valor de la energía de orden cero, energía de enlace y un análisis gráfico también será presentados en esta sección.

3.1. ENERGÍA DE ORDEN-CERO (ENERGÍA ESTADO BASAL)

Como se deduce del análisis de la sección anterior el sistema de cuatro partícula encaja perfectamente a través del modelos Hookeano, por lo tanto podemos utilizar la forma de las soluciones analíticas del sistema de cuatro partículas a través de tratamiento NBO para obtener la energía de estado fundamental es decir de orden cero, además se establece como nuestro punto de partida en una descripción ampliada de la naturaleza de la interacción y correlación inter-partículas. Sin embargo aclararemos que al igual que en el enfoque NBO y en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) es importante la interacción entre los excitones para diferentes valores de la razón de masas efectivas $\sigma = \frac{m}{M}$.

Por lo tanto de energía de orden cero E_0 y de las Ec. (2.43), Ec. (2.45) y Ec. (2.47) tenemos que;

$$E_0 = \frac{2}{m} E_1 + \frac{2}{M} E_3 + \frac{1}{2M} E_{2,4} \quad (3.1)$$

Luego del análisis del tratamiento NBO y del modelo para un bi-excitón en QDs lateral (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) con la energía $E_{2,4}$ y las Ec. (2.67), Ec. (2.71), Ec. (2.72) y la Ec. (2.74) obtenemos lo siguiente;

$$E_0 = \frac{2}{m} E_{u_{t_1}} + \frac{2}{M} E_{u_{t_3}} + \frac{1}{2M} (E_P + E_Q) \quad (3.2)$$

$$E_0 = \frac{2}{m} \left[W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left(n_{t_1} + l_{t_1} + \frac{3}{2} \right) \right] + \frac{2}{M} \left[W_3^{(t_1^*)}(n_{t_3}, l_{t_3}) \left(n_{t_3} + l_{t_3} + \frac{3}{2} \right) \right] + \frac{1}{2M} \left[0 + W_Q \left(2n_Q + l_Q + \frac{3}{2} \right) \right] \quad (3.3)$$

Primero se menciona nuevamente que W_1 estará directamente relacionados con las constantes de acoplamiento para valores particulares de $W_1(n_{t_1}, l_{t_1})$ con pares específicos de números cuánticos n_{t_1}, l_{t_1} . Luego del análisis de la Ec. (2.43), Ec. (2.74)

y W_Q definido por $\frac{W_Q^2}{2} = \frac{2(u+1)W_{2,4}^2}{u}$, tenemos que;

$$\begin{aligned} W_Q^2 &= \frac{4(u+1)W_1^2}{u} \\ W_Q^2 &= \frac{4(u+1)}{u} \left[\frac{m}{2} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \right]^2 \\ W_Q &= \frac{2M}{m} \sqrt{2 \left(\frac{m+M}{M} \right)} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

Luego de la Ec. (2.30) y Ec. (3.3), se tomará las mismas consideraciones de las soluciones aproximadas para el movimiento nuclear relativo de enfoque NBO y asumiendo que podemos $W_3^{(t_1^*)}(n_{t_3}, l_{t_3})$ está directamente relacionado con la Ec. (2.70), vamos a obtener la energía del estado basal o fundamental (de orden cero) E_0 definida por;

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{2}{m} \left[W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left(n_{t_1} + l_{t_1} + \frac{3}{2} \right) \right] + \frac{2}{M} \left[\sqrt{\frac{M}{m}} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left(n_{t_3} + l_{t_3} + \frac{3}{2} \right) \right] + \\ &\frac{1}{2M} \left[\frac{2M}{m} \sqrt{2 \left(\frac{m+M}{M} \right)} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \right] \left(2n_Q + l_Q + \frac{3}{2} \right) \\ E_0 &= \frac{2}{m} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left(n_{t_1} + l_{t_1} + \frac{3}{2} \right) + \frac{2}{M} \sqrt{\frac{M}{m}} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left(n_{t_3} + l_{t_3} + \frac{3}{2} \right) + \\ &\frac{1}{m} \sqrt{2 \left(\frac{m+M}{M} \right)} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left(2n_Q + l_Q + \frac{3}{2} \right) \\ E_0 &= \frac{2}{m} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left[\left(n_{t_1} + l_{t_1} + \frac{3}{2} \right) + \sqrt{\frac{m}{M}} \left(n_{t_3} + l_{t_3} + \frac{3}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\left(\frac{m+M}{M} \right)} \left(2n_Q + l_Q + \right. \right. \\ &\left. \left. \frac{3}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.5)$$

Donde la Ec. (2.47) es la energía de orden cero para el complejo Bi-excitónico para diferentes valores e la razón de $\sigma = \frac{m}{M}$.

Sin embargo se debe tener en cuenta que E_0 representa la energía para \hat{H}_0 de la Ec. (2.33) es decir que la energía para \hat{H}_1 debe ser sumada con fin de obtener un valor corregido de energía total de orden cero.

En la **figura 3-1** y **3-2** se presenta la dependencia de la energía de orden cero para el complejo $X_2 = ee hh$ versus la razón de masa efectiva $\sigma = \frac{m}{M}$.

Una consecuencia directa en este resultado debe ser la correspondencia que deben tener las curvas mostradas con los resultados obtenidos en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) a través del enfoque del NBO de la molécula de H_2 . Además, es importante señalar que para la construcción de las curvas, no se toma en cuenta la corrección a la energía total, es decir se toma las mismas consideraciones anteriormente mencionadas.

Por lo tanto, en el presente trabajo la energía de orden cero, dado por la Ec. (3.5), puede ser expresado mediante dos gráficas (véase, Fig. 3-1 y 3-2), sin embargo aquí no se presenta valores de interpolación de la energía.

Para el primer caso definiremos un valor fijo de m y para el segundo un valor fijo de M , este resultado puede ser explicado como una relación directa entre la variación de la masa; tanto de los electrones como de los huecos, definidos por la razón de masas $\sigma = \frac{m}{M}$, como en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011), sin embargo para este enfoque no se toma en cuenta la interpolación de su energía, por lo tanto estos resultados solo mostraran la tendencia del comportamiento de nuestro sistema en correspondencia con los trabajos anteriores, tomando las mismas consideraciones, también es importante señalar que los resultados, a través del método de Jacobi si proporcionan una información valedera y relacionada con los resultados mostrado en (Non-Born-Oppenheimer treatment of the H2 Hookean molecule, 2005) y (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) expresando su validez y su posible uso para trabajos posteriores.

Además, se verá que algunos aspectos mostrados aquí han variado con respecto al enfoque mostrado en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011), es decir al comparar los

valores de W_Q de la Ec. (3.4) con el valor de W_Q en la Ec. (50) en modelo para un Bi-excítón en QDs laterales no existe igualdad, sin embargo esto no conduce a un cambio significativamente grande en el valor de su energía, pero se debe aclarar que esto podría representar una condición importante a tenerse en cuenta para el momento de dar uso y aplicación al enfoque presentado en este trabajo.

Así mismo la existencia de un término, en el último factor de la Ec. (3.5) que define la energía de orden cero del sistema, donde la cifra $\frac{1}{\sqrt{2}}\sqrt{\left(\frac{m+M}{M}\right)}\left(2n_Q + l_Q + \frac{3}{2}\right)$ tiene un valor de $\frac{1}{\sqrt{2}}$, el mismo que es una constante, siendo esto una discrepancia con respecto al enfoque en el modelo para un Bi-exciton en QDs laterales, tal resultado proporciona una correspondencia diferente de la energía en comparación a los resultados dados por la Ec. (51) en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011), existiendo una consecuencia directa con el tipo de método tomado para el análisis presentado, esto es visto al momento de realizar la formulación matemático teórica en las secciones anteriores.

La energía para diferentes valores de m cálculos en un intervalo de 0.5, será presentados en los párrafos siguientes, sin embargo se puede obtener resultados para intervalos más pequeños.

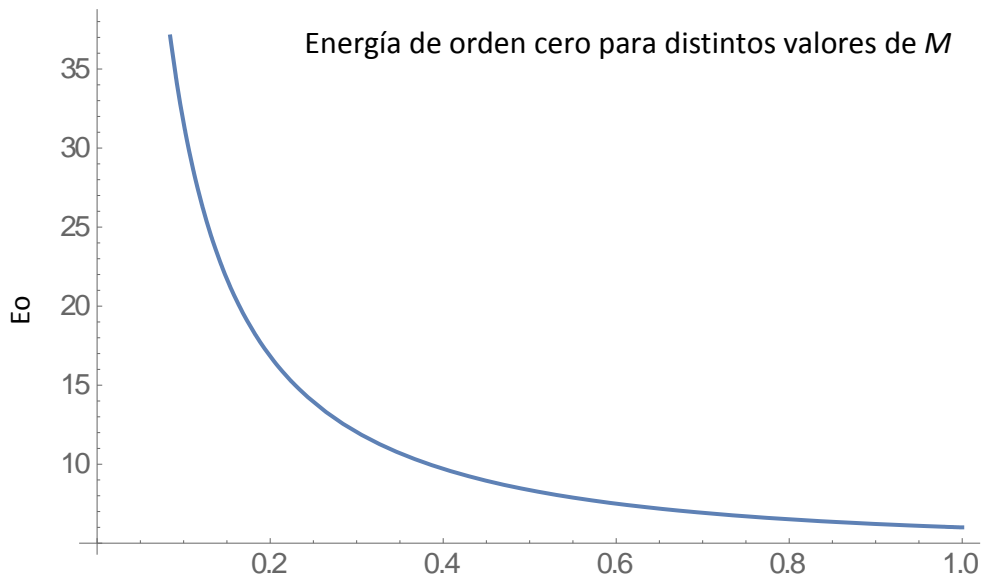


Fig. 3-1 Energía de estado fundamental E_0 del complejo bi-excítico para $M=1$, donde los valores $\{(0.9987, 6.094), (0.0856, 36.97), (0.3985, 9.782)\}$ están en función del valor de m y su energía en tres puntos diferentes de la curva.

Los resultados de la energía para diferentes valores de M y m , son presentados en la **tabla 3-1**, los cálculos realizados en Wolfram Mathematica consideran diecisiete cifras significativas, con el objetivo de obtener una alta sensibilidad.

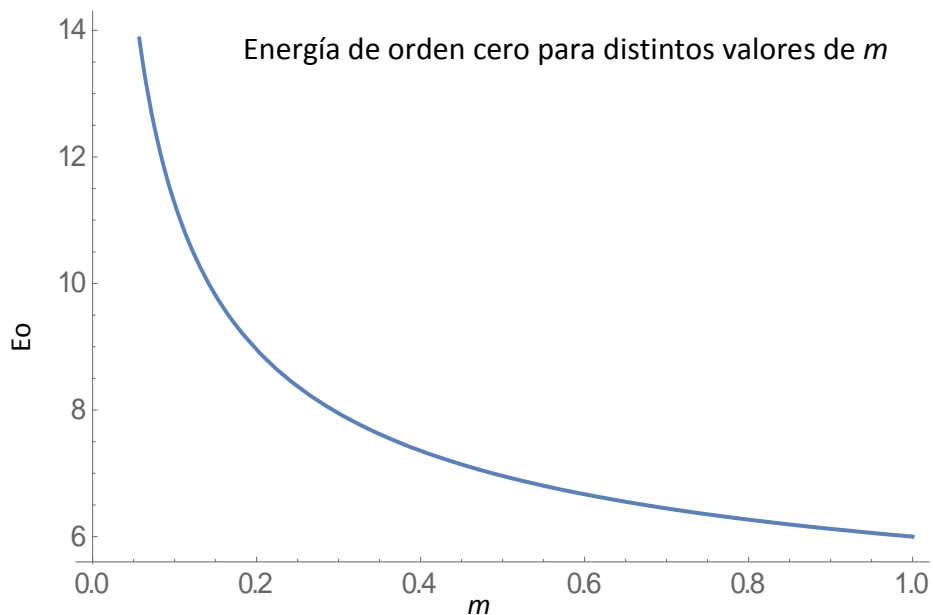


Fig. 3-2 Energía de estado fundamental del complejo bi-excítico para $m=1$, donde los valores $\{(0.05816, 13.87), (1.001, 5.998), (0.3973, 7.365)\}$ están en función del valor de M y su energía en tres puntos diferentes de la curva.

Tabla 3-1. Valores de M , m y las energías del estado fundamental en unidades de Hartree.

M	m	$1/M$	$m/1$	Energía con M	Energía con m
-	-	-	-	-	-
0,05	0,05	20,0000	0,0500	14,56876	61,42226
0,10	0,10	10,0000	0,1000	11,26123	31,58677
0,15	0,15	6,6667	0,1500	9,80982	21,71838
0,20	0,20	5,0000	0,2000	8,95218	16,83272
0,25	0,25	4,0000	0,2500	8,37171	13,93585
0,30	0,30	3,3333	0,3000	7,94655	12,03092
0,35	0,35	2,8571	0,3500	7,61856	10,69122
0,40	0,40	2,5000	0,4000	7,35602	9,70367
0,45	0,45	2,2222	0,4500	7,14001	8,95010
0,50	0,50	2,0000	0,5000	6,95844	8,35970
0,55	0,55	1,8182	0,5500	6,80318	7,88749
0,60	0,60	1,6667	0,6000	6,66854	7,50354
0,65	0,65	1,5385	0,6500	6,55042	7,18717
0,70	0,70	1,4286	0,7000	6,44576	6,92364
0,75	0,75	1,3333	0,7500	6,35224	6,70216
0,80	0,80	1,2500	0,8000	6,26804	6,51467
0,85	0,85	1,1765	0,8500	6,19176	6,35500
0,90	0,90	1,1111	0,9000	6,12224	6,21838
0,95	0,95	1,0526	0,9500	6,05858	6,10105
1,00	1,00	1,0000	1,0000	6,00000	6,00000

Aquí se verá que para valores fijos de m tendremos una curva en la **figura 3-1**, donde a menores valores de M , mayor será la energía debido a la interacción de los huecos con los electrones, sin embargo cuando M es el valor fijo **figura 3-2** los valores de la energía decrecen rápidamente, en consecuencia la **figura 3-2** expresa de mejor manera la energía de orden cero del complejo $Xeehh$.

En efecto debemos explicar, que debido a que los huecos son una porción de todo la estructura que forma el NC y son los electrones que se moverán de forma arbitraria, por lo tanto teóricamente es más razonable pensar que la interacción de los electrones con los huecos en el QD se asemeja a la interacción vista en el átomo, es decir que es más notable en condiciones de experimentación describiendo así un comportamiento cercano a las estructuras estudiadas en condiciones ideales.

En el **figura 3-3** se muestra las energías de orden cero, donde podemos observar que las dos curvas representan las energías calculados mediante el enfoque presentado aquí, para distintos valores de M y m , en consecuencia la curva con menor energía representa la energía de orden cero más estable, además el valor máximo y mínimo de las curvas está determinado por el tamaño del QD debido al confinamiento cuántico.

En el **figura 3-4** se presenta el cálculo de las energías de la **tabla 3-1**, considerando los límites para el cual la energía se hace cero, esto se entiende como el punto de inflexión donde la interacción del sistema desaparece debido a la distancia.

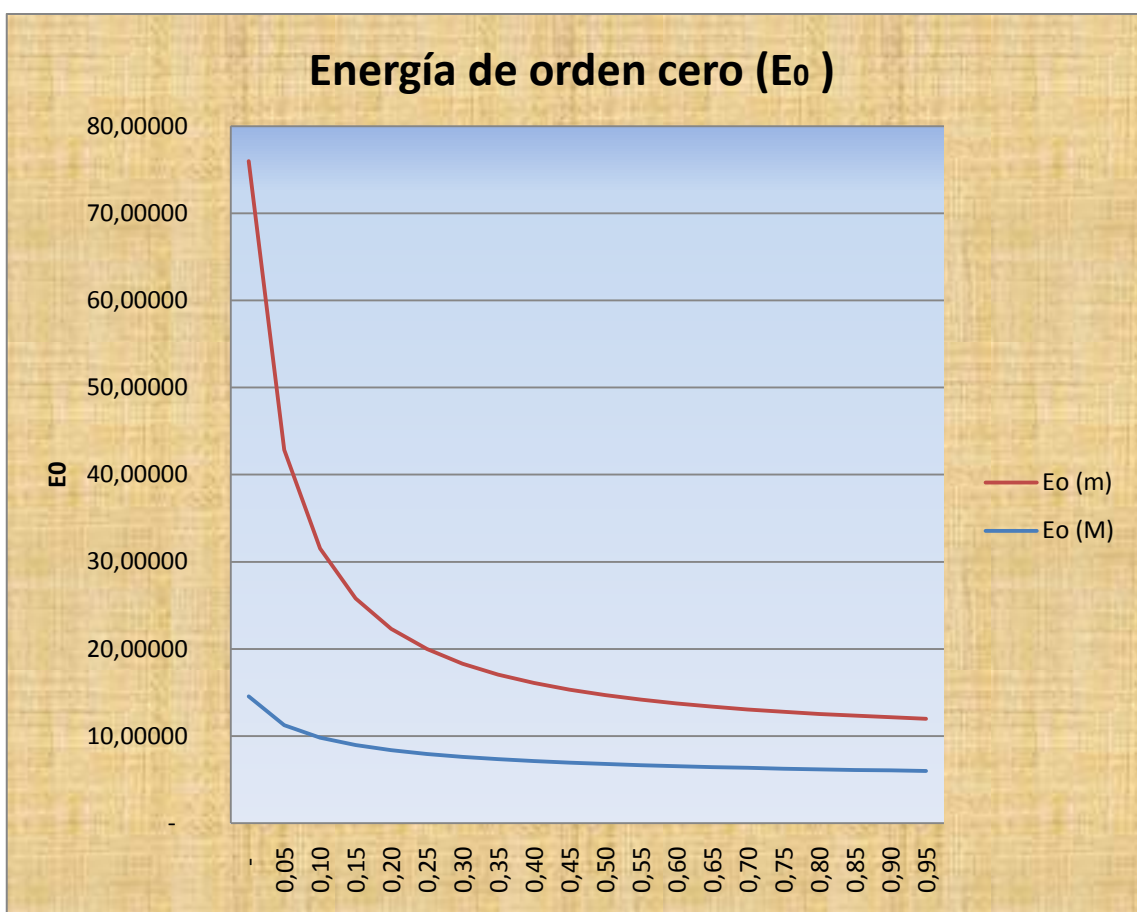


Fig. 3-3 Energía de orden-cero para valores de M y m , calculados utilizando la matriz de transformación.

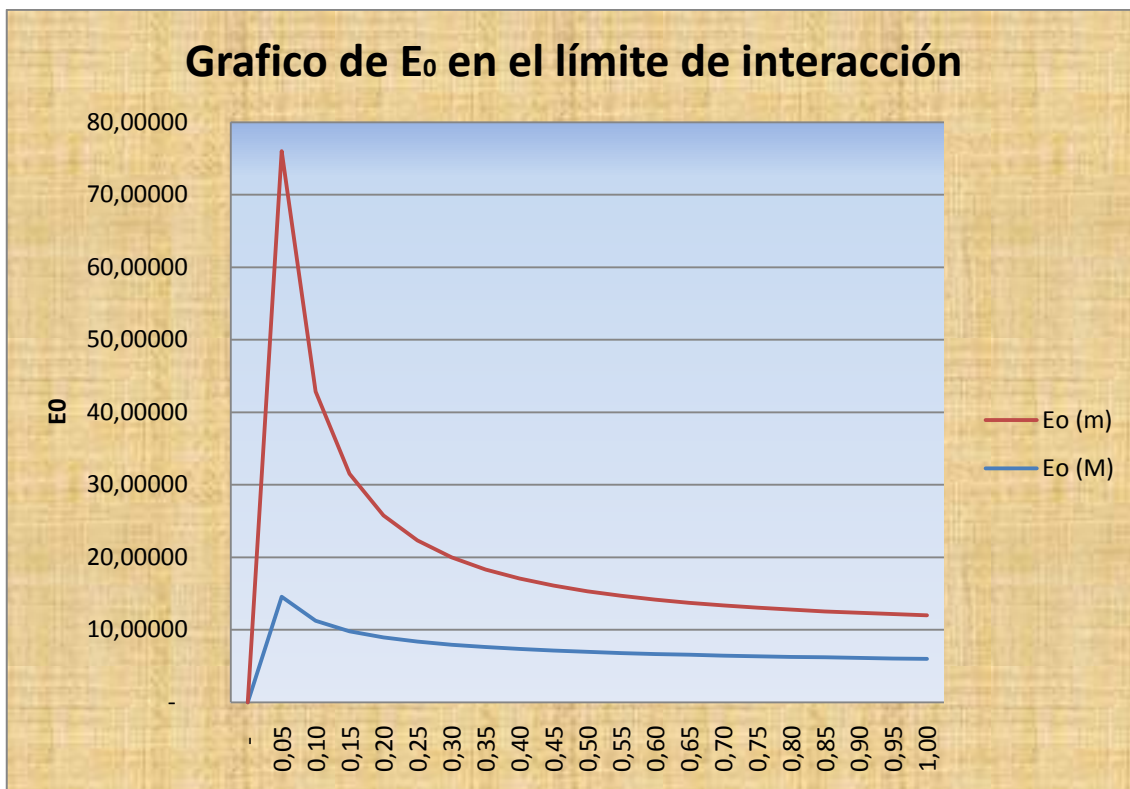


Fig. 3-4 Energía de orden-cero donde las masas M y m llegan al límite cayendo repentinamente a cero, fenómeno determinado por la distancia de interacción.

Tabla 3-2. Comparación de la energía E_0 en unidades de Hartree, mediante los dos tratamientos teóricos.

Razón de masa.	Energía con M 2011	Energía con m 2011	Energía con M 2015	Energía con m 2015
-	-	-	-	-
0,05	16,58207	61,87245	14,56876	61,42226
0,10	12,71835	32,04755	11,26123	31,58677
0,15	11,02630	22,18952	9,80982	21,71838
0,20	10,02834	17,31399	8,95218	16,83272
0,25	9,35410	14,42705	8,37171	13,93585
0,30	8,86111	12,53185	7,94655	12,03092
0,35	8,48140	11,20168	7,61856	10,69122
0,40	8,17795	10,22351	7,35602	9,70367
0,45	7,92865	9,47914	7,14001	8,95010
0,50	7,71940	8,89778	6,95844	8,35970
0,55	7,54072	8,43446	6,80318	7,88749
0,60	7,38598	8,05926	6,66854	7,50354
0,65	7,25040	7,75151	6,55042	7,18717
0,70	7,13042	7,49647	6,44576	6,92364
0,75	7,02334	7,28335	6,35224	6,70216

0,80	6,92705	7,10410	6,26804	6,51467
0,85	6,83991	6,95256	6,19176	6,35500
0,90	6,76059	6,82397	6,12224	6,21838
0,95	6,68802	6,71455	6,05858	6,10105
1,00	6,62132	6,62132	6,00000	6,00000

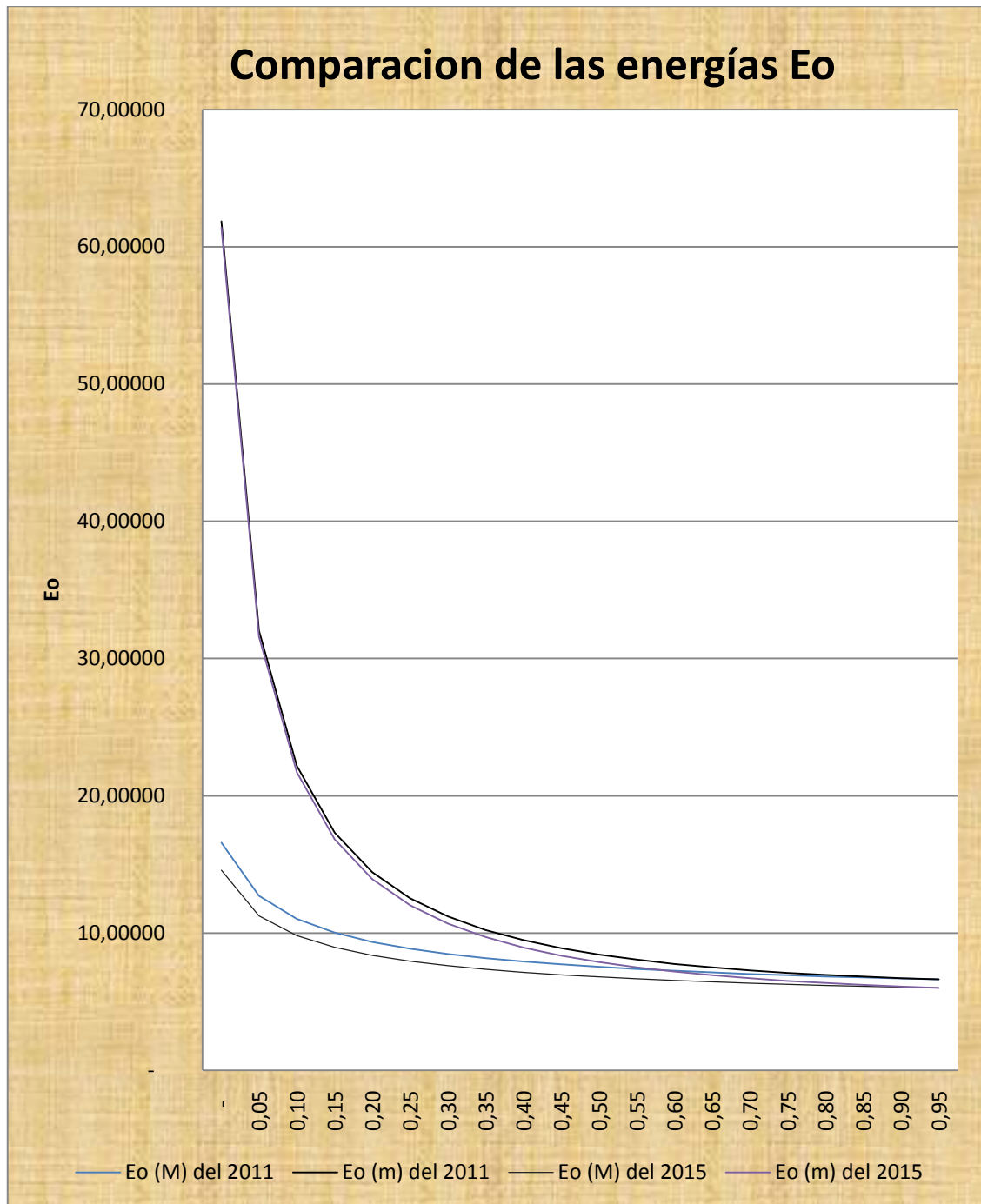


Fig. 3-5 Las energías E_o donde podemos visualizar la correspondencia entre sus curvas.

Como se puede visualizar en la **figura 3-5** las curvas son muy consistentes entre sí, por lo tanto los valores para la energía de orden cero calculados en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) son muy similares con los curvas que representan la energía de orden cero calculados mediante la aplicación del método de Jacobi a través de una matriz simétrica en el presente trabajo, en conclusión la aplicación de ambos modelos predicen de forma correcta el comportamiento del complejo *Xeehh*.

3.2. LA ENERGÍA DE ENLACE

Para obtener una expresión gráfica de la energía de enlace tomaremos lo establecido en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) que establece los siguientes procesos de disociación, por lo tanto tenemos que:

$$B(Xeehh) = B(Xeehh \rightarrow X + X) = 2E(X) - E(Xeehh) \quad (3.6)$$

Donde $E(X)$ es la energía del complejo excitónico simple establecida en el modelo para un bi-excitón en QDs lateral (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011).

Por lo tanto tenemos que;

$$E(X) = \frac{1}{m} W_1(n_{t_1}, l_{t_1}) \left[\sqrt{\left(\frac{2m+2M}{M}\right)} \left(2\tilde{n}_Q + \tilde{l}_Q + \frac{3}{2}\right) \right] \quad (3.7)$$

Donde \tilde{n} y \tilde{l} son los números cuánticos del oscilador armónico considerado para una molécula por lo tanto no están relacionados con los números cuánticos atómicos sin embargo como en (Exact non-Born-Oppenheimer wave functions for three-particle Hookean systems with arbitrary masses, 2006) podemos aplicar las mismas consideraciones para el cálculo de la energía para el sistema dado por la Ec. (3.7).

Valores de la energía para el sistema $E(X)$ para valores distintos de M con $\tilde{n}_Q = 0$ y $\tilde{l}_Q = 0$, son presentados en la **tabla 3-3**, de la misma manera para valores distintos de m con las mismas consideraciones hechas para M , donde M se consideraba fijo.

Tabla 3-3. Energía de enlace (B) en unidades de Hatree.							
M	m	E(X₂) M	E(X₂) m	E (X) M	E (X) m	2E(X)-E(X₂) M	2E(X)-E(X₂) m
-	-	0,00000	0,00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
0,05	0,05	14,56876	61,42226	9,72111	28,98275	4,87346	-3,45676

0,10	0,10	11,26123	31,58677	7,03562	14,83240	2,81002	-1,92198
0,15	0,15	9,80982	21,71838	5,87367	10,11050	1,93752	-1,49738
0,20	0,20	8,95218	16,83272	5,19615	7,74597	1,44013	-1,34078
0,25	0,25	8,37171	13,93585	4,74342	6,32456	1,11512	-1,28674
0,30	0,30	7,94655	12,03092	4,41588	5,37484	0,88521	-1,28125
0,35	0,35	7,61856	10,69122	4,16619	4,69476	0,71382	-1,30169
0,40	0,40	7,35602	9,70367	3,96863	4,18330	0,58123	-1,33707
0,45	0,45	7,14001	8,95010	3,80789	3,78431	0,47576	-1,38149
0,50	0,50	6,95844	8,35970	3,67423	3,46410	0,39003	-1,43150
0,55	0,55	6,80318	7,88749	3,56115	3,20124	0,31913	-1,48501
0,60	0,60	6,66854	7,50354	3,46410	2,98142	0,25966	-1,54069
0,65	0,65	6,55042	7,18717	3,37980	2,79475	0,20919	-1,59766
0,70	0,70	6,44576	6,92364	3,30584	2,63416	0,16592	-1,65532
0,75	0,75	6,35224	6,70216	3,24037	2,49444	0,12850	-1,71328
0,80	0,80	6,26804	6,51467	3,18198	2,37171	0,09592	-1,77125
0,85	0,85	6,19176	6,35500	3,12956	2,26299	0,06735	-1,82902
0,90	0,90	6,12224	6,21838	3,08221	2,16595	0,04217	-1,88647
0,95	0,95	6,05858	6,10105	3,03922	2,07878	0,01986	-1,94348
1,00	1,00	6,00000	6,00000	3,00000	2,00000	0,00000	-2,00000

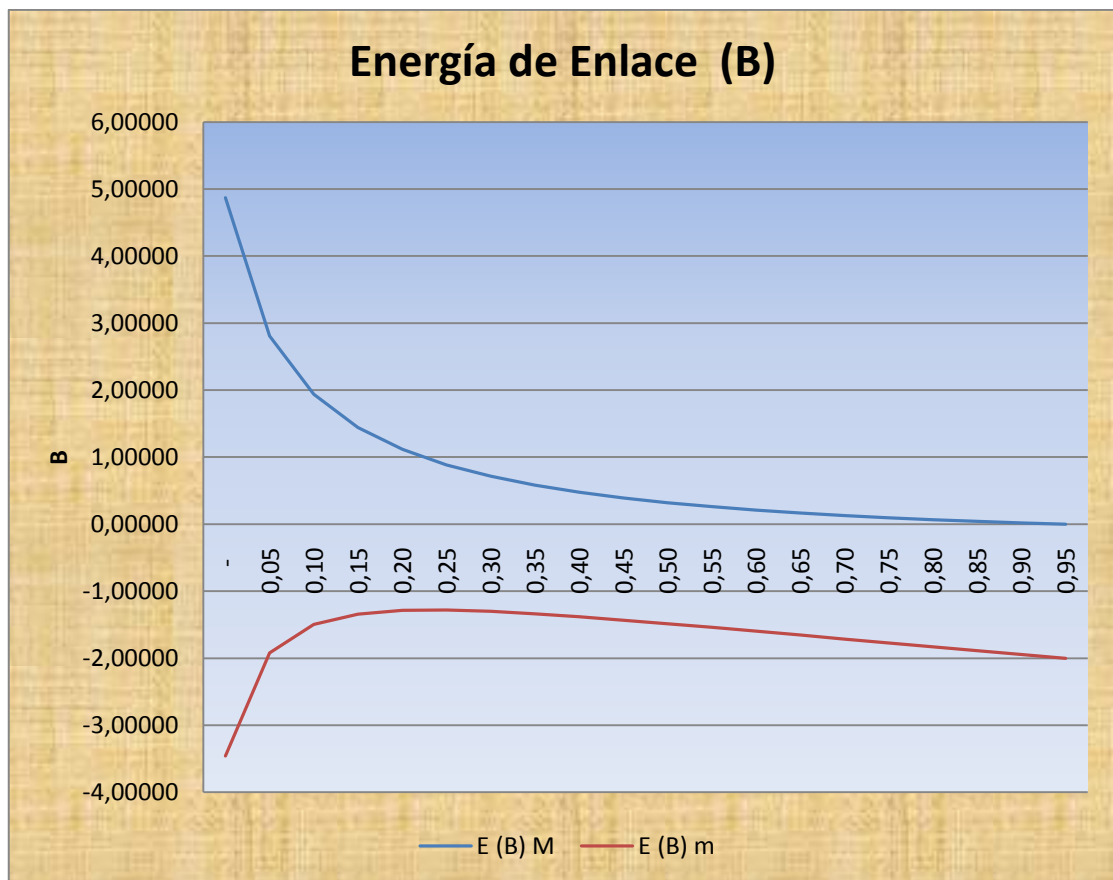


Fig. 3-6 Tendencia de la energía de enlace para *m* y *M*.

Como se esperaba la **Tabla 3-3**, muestra que cuando m varía tenemos como resultados energías de enlace más bajas, por lo tanto el sistema será más estable para estas condiciones.

Tabla 3-4¹¹. Energía de enlace en unidades de Hartree para M y m comparativas con resultados dados en el modelo para un Bi-excitón en QDs Laterales.

M	m	E(X ₂) M 2011	E(X ₂) m 2011	E(X ₂) M 2015	E(X ₂) m 2015	E (X) M	E (X) m	B (M) 2015	B (m) 2015	B (M) 2011	B (m) 2011
-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
0,05	0,05	16,58	61,87	14,56876	61,42226	9,72111	28,98275	4,87346	3,45676	2,86015	3,90695
0,10	0,10	12,72	32,05	11,26123	31,58677	7,03562	14,83240	2,81002	1,92198	1,35289	2,38276
0,15	0,15	11,03	22,19	9,80982	21,71838	5,87367	10,11050	1,93752	1,49738	0,72104	1,96852
0,20	0,20	10,03	17,31	8,95218	16,83272	5,19615	7,74597	1,44013	1,34078	0,36397	1,82205
0,25	0,25	9,35	14,43	8,37171	13,93585	4,74342	6,32456	1,11512	1,28674	0,13273	1,77794
0,30	0,30	8,86	12,53	7,94655	12,03092	4,41588	5,37484	0,88521	1,28125	0,02935	1,78217
0,35	0,35	8,48	11,20	7,61856	10,69122	4,16619	4,69476	0,71382	1,30169	0,14902	1,81215
0,40	0,40	8,18	10,22	7,35602	9,70367	3,96863	4,18330	0,58123	1,33707	0,24070	1,85691
0,45	0,45	7,93	9,48	7,14001	8,95010	3,80789	3,78431	0,47576	1,38149	0,31288	1,91052
0,50	0,50	7,72	8,90	6,95844	8,35970	3,67423	3,46410	0,39003	1,43150	0,37093	1,96957
0,55	0,55	7,54	8,43	6,80318	7,88749	3,56115	3,20124	0,31913	1,48501	0,41841	2,03198
0,60	0,60	7,39	8,06	6,66854	7,50354	3,46410	2,98142	0,25966	1,54069	0,45778	2,09641
0,65	0,65	7,25	7,75	6,55042	7,18717	3,37980	2,79475	0,20919	1,59766	0,49079	2,16200
0,70	0,70	7,13	7,50	6,44576	6,92364	3,30584	2,63416	0,16592	1,6553	0,5187	2,2281

¹¹ (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011)

	0								2	5	5
0,75	0,75	7,02	7,28	6,35224	6,70216	3,24037	2,49444	0,12850	1,71328	0,54260	2,29448
0,80	0,80	6,93	7,10	6,26804	6,51467	3,18198	2,37171	0,09592	1,77125	0,56309	2,36069
0,85	0,85	6,84	6,95	6,19176	6,35500	3,12956	2,26299	0,06735	1,82902	0,58080	2,42659
0,90	0,90	6,76	6,82	6,12224	6,21838	3,08221	2,16595	0,04217	1,88647	0,59617	2,49206
0,95	0,95	6,69	6,71	6,05858	6,10105	3,03922	2,07878	0,01986	1,94348	0,60958	2,55699
1,00	1,00	6,62	6,62	6,00000	6,00000	3,00000	2,00000	0,00000	2,00000	0,62132	2,62132

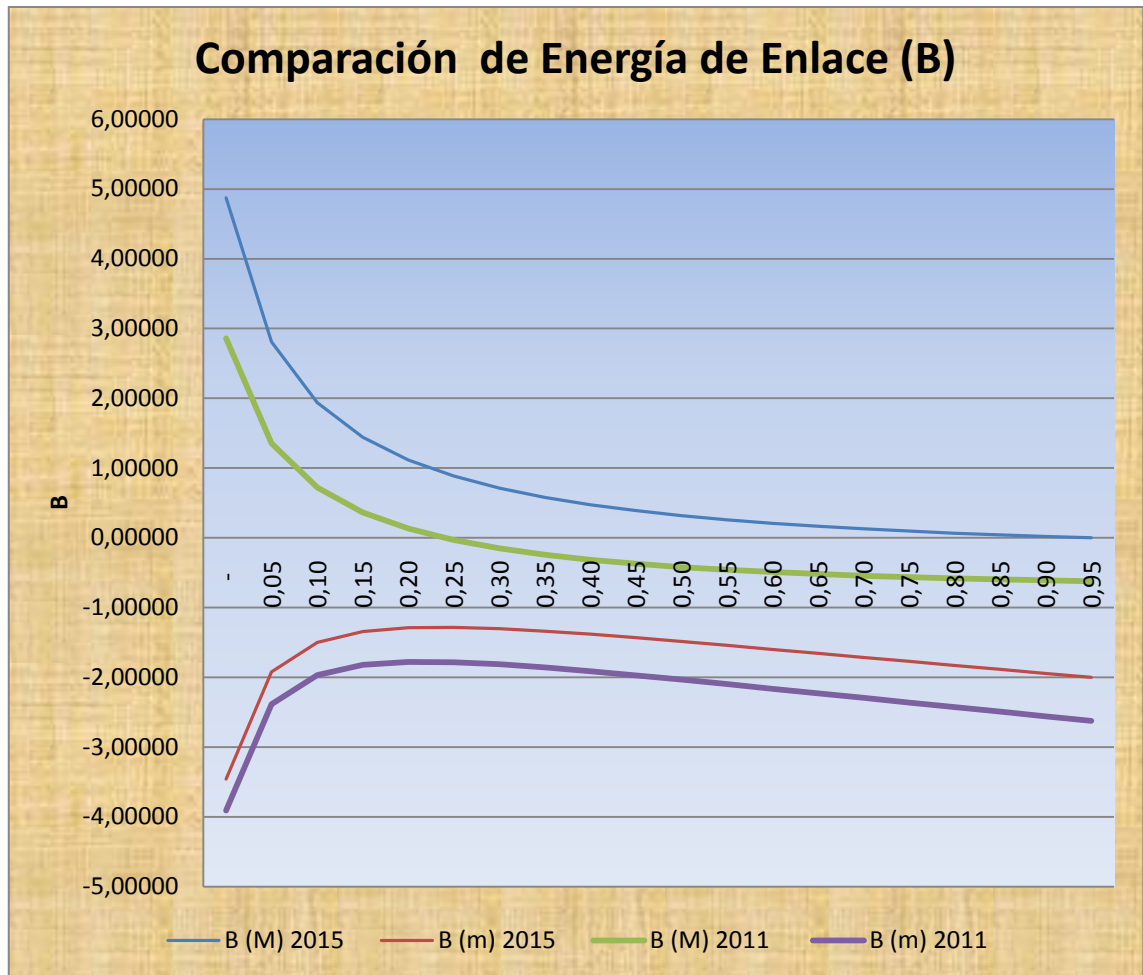


Fig. 3-7 Muestras las cuervas de la energía de enlace para m y M calculados utilizando el tratamiento de 2011 y mediante el método presentado en este trabajo.

Como muestra la **figura 3-7**, la línea azul gruesa representa la energía de enlace para m calculado mediante el enfoque (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) y la línea roja utiliza el método de Jacobi. De la misma forma la línea tomate gruesa representa la energía de enlace para M calculados mediante (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) y línea azul fina es la energía de enlace mediante el método de Jacobi presentado en este trabajo.

De forma teórica sabemos que el sistema que mantenga una menor energía de enlace debido a las interacciones entre las partículas que lo conforma será más estable, por lo tanto mediante el uso de la matriz de transformación a través del método de Jacobi no se logra obtener un sistema más o igualmente estable, presentado en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011), sin embargo esto no significa que no se puede utilizar este enfoque para el desarrollo de problemas similares, pero se debe aclarar que su corrección de primer orden debe ser mayor o se debe considerarse para futuros trabajos.

CAPÍTULO 4

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

4.1. CONCLUSIONES

- Se ha efectuado el cálculo de la energía del estado fundamental haciendo uso de las soluciones analíticas NBO del modelo Hookeano para QDs acoplados lateralmente obtenidas mediante la formulación analítico-matemática de la matriz simétrica de transformación demostrando que este enfoque proporciona un modelo valido en concordancia a trabajos anteriores.
- Se han analizado las curvas de las energías de orden cero (E_0) y de enlace (B), donde se demostró que el comportamiento del sistema es concordante con los cálculos obtenidos en el enfoque (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011), sin embargo también se debe aclarar que hay una discrepancia mínima constante de $\frac{1}{\sqrt{2}}$ con los resultados obtenidos en el presente trabajo, por lo tanto se debe considerar en las posibles correcciones a los valores de las energías para futuros trabajos.
- Se ha evidenciado que el sistema descrito en (Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule , 2011) posee propiedades más estables en base a su energía de primer orden (estado fundamental) y de la energía de enlace, sin embargo esto no determina que el enfoque presentado para el modelo del bi-exciton en este trabajo sea desperdiciado y/o desaprovechado, pero si se debe considerar estas discrepancias al ser utilizado, es decir que cuando se considera la B para M el valor 0.8800694319 será la diferencia de altura entre las curvas y el valor 0.5400700159 representa la diferencia de altura para m para los dos métodos considerados.

Tabla 4-1 Valores aproximados de discrepancia.				
Medidas	B (M) 2015	B (M) 2011	B (m) 2015	B (m) 2011
Promedio	0,8265006932	-0,0535687387	-1,6829404877	-2,2230105036
Diferencia	0,8800694319		0,5400700159	

4.2. RECOMENDACIONES

- 1) Utilizar los resultados obtenidos mostrados en el figura 3-1 y figura 3-2 para establecer los valores de m y M para los cuales el sistema se acerca lo mejor posible al fenómeno real a través de estudios de modelación computacional y/o experimental, los cuales no son tratados en el presente trabajo.
- 2) Se recomienda resolver la corrección de la energía de orden cero solucionando el acoplamiento de la interacción \hat{V}_{eh} y de \hat{H}_1 definidas por la Ec. (2.35) para una mejor aproximación de los resultados.
- 3) Analizar estructuras artificiales sintetizadas en los laboratorios de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo con el fin de ampliar la comprensión y aplicación para mejorar la formación integral de profesionales en nuevos campos de investigación científica en la institución.

BIBLIOGRAFÍA

- 1) Møller , C., & Plesset, M. (1934). Rayleigh-Schrodinger Perturbation Theory. *Physical Review*.
- 2) Nazmitdinov, R. G., & Dineykhán, M. (1997). Two-electron quantum dot in a magnetic field: Analytical results. *Physical Review B*, 1-6.
- 3) Annu., & Alivasatos, A. P. (2005). *Physical Review Letters*, 1-25.
- 4) E. Harris, F., & Monkhorst, H. J. (2005). INTEGRALS FOR FULLY CORRELATED GAUSSIANS IN RELATIVE COORDINATES . *Wiley InterScience* , 55-60.
- 5) EISBERG, R., & RESNICK, R. (1977). *Física Cuántica* . México, España, Venezuela, Argentina, Colombia, Puerto Rico: **EDITORIAL LIMUSA, GRUPO NORIEGA EDITORES** .
- 6) GINÉ, J. (2006). On the origin of quantum mechanics. *SCIENCE DIRECT*, 534-540.
- 7) JASKOLSKI, W., BRYANT, W., PLANELLES, J., & ZIELINSKI, M. (2002). Artificial Molecules. *International Journal of Quantum Chemistry*, 1075-1082.
- 8) LUDEÑA , E. V., ECHEVARRÍA, L., UGALDE, J. L., LOPEZ , X., & CORELLA-MADUEÑO, A. (2011). Model for a Biexciton in a Lateral Quantum Dot Based on Exact Solutions for the Hookean Subscript[H, 2] Molecule . *International Journal of Quantum Chemistry*.
- 9) LUDEÑA , E. V., LOPEZ , X., & UGALDE, J. (2005). Non-Born-Oppenheimer treatment of the H₂ Hookean molecule. *The Journal of Chemical Physics*.
- 10) Ludeña, E. V. (2012). Sistemas Modelos de Pocas Particulas para la descripción de Nanoestructuras: Quanntum Dots Simples y Acoplados, Excitones. *Pragrama PROMETEO SENESCYT, USFQ. Red GETNano.*, 1-3.

- 11) LUDENÑA, E. V., ECHEVARRÍA, L., LOPEZ, X., & UGALDE, M. (2012). Non-Born-Oppenheimer electronic and nuclear densities for a Hooke-Cologero three-particle model: Non-uniqueness of density-derived molecular structure. *The Journal of Chemical Physics*, 2-12.
- 12) QUESADA, A., GARCIA, M., COSTA-KRAMER, J., & FERNANDEZ, J. (2007). Semiconductores magnéticos diluidos: Materiales para la espintrónica. *INSTITUTO DE MAGNETISMO APLICADO SALVADOR Velayos. Dpto. Física de Materiales Materiales, UCM.*, 1-5.
- 13) REQUENA, A., & ROMERO, F. (s.f.). Aproximación Born-Oppenheimer. 48-74.
- 14) RUTISHAUSER, H. (1966). Handbook Series Linear Algebra. The Jacobi Method for Real Symmetric Matrices. *Numerische Mathematik*, 1-10.
- 15) Taut, M. (1993). Two electrons in an external oscillator potential. Particular analytic solutions of a Coulomb correlation problem. *Physical Review A*.
- 16) WANG, L., RASTELLI, A., & KIRAVITTAYA, S. (2008). Towards deterministically controlled InGaAs/GaAs lateral quantum dot molecules. *New Journal of Physics*, 1-14.
- 17) Z., J., & H., Z. (1999). Theory and application of quantum molecular dynamics. *World Scientific*, pág. 104.

ANEXOS

Anexo A

Cambio de variable a través de la Matriz de Jacobi para la energía cinética realizado en Wolfram Mathematica 10.0

```

JacobianMatrix[x_List, q_List] := Outer[D, x, q]
ChangeVariables[relation_List, new_List, old_List] := Module[{explicit = Through[new == old]}, Clear[Derivative];
Evaluate[JacobianMatrix[explicit, old]] == Simplify[Inverse[JacobianMatrix[relation, new]] /. Thread[new == explicit]]]

MatrixForm[ChangeVariables[{{m2 t1 / (m1 + m2) + t2, -m1 t1 / (m1 + m2) + t2, m4 t3 / (m3 + m4) + t4, -m3 t3 / (m3 + m4) + t4}, {t1, t2, t3, t4}, {q1, q2, q3, q4}] /.
{t1[q1, q2, q3, q4] + t1, t2[q1, q2, q3, q4] + t2, t3[q1, q2, q3, q4] + t3, t4[q1, q2, q3, q4] + t4}]

( 1 -1 0 0
  1/2 1/2 0 0
  0 0 1 -1
  0 0 1/2 1/2 )

Definición de Notación
<< Notation
Notation[ $\frac{\partial^{n_x} f[x_-, y_-, z_-, w_-]}{\partial x_-^{n_x}}$ ] == Derivative[nx_-, 0, 0, 0][f_][x_-, y_-, z_-, w_-]
Notation[ $\frac{\partial^{n_y} f[x_-, y_-, z_-, w_-]}{\partial y_-^{n_y}}$ ] == Derivative[0, ny_-, 0, 0][f_][x_-, y_-, z_-, w_-]
Notation[ $\frac{\partial^{n_z} f[x_-, y_-, z_-, w_-]}{\partial z_-^{n_z}}$ ] == Derivative[0, 0, nz_-, 0][f_][x_-, y_-, z_-, w_-]
Notation[ $\frac{\partial^{n_w} f[x_-, y_-, z_-, w_-]}{\partial w_-^{n_w}}$ ] == Derivative[0, 0, 0, nw_-][f_][x_-, y_-, z_-, w_-]
Notation[ $\frac{\partial^2 f[x_-, y_-]}{\partial x_- \partial y_-}$ ] == Derivative[nx_-, ny_-][f_][x_-, y_-]

```

Anexo B.

Cálculos para los diferentes valores de M y m

```

In[59]= E0M =  $\frac{2}{1} \left(\frac{3}{2}\right) + \sqrt{\frac{1}{M}} \left(\frac{3}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{1+M}{M}} \left(\frac{3}{2}\right)$ ;
In[60]= Table[E0M[M], {M, 0, 1, 0.05}]
Out[60]= {Indeterminate[0.], 14.5688[0.05], 11.2612[0.1], 9.80982[0.15], 8.95218[0.2],
8.37171[0.25], 7.94655[0.3], 7.61856[0.35], 7.35602[0.4], 7.14001[0.45],
6.95844[0.5], 6.80318[0.55], 6.66854[0.6], 6.55042[0.65], 6.44576[0.7],
6.35224[0.75], 6.26804[0.8], 6.19176[0.85], 6.12224[0.9], 6.05858[0.95], 6.[1.]}

In[61]= E0m =  $\frac{2}{m} \left(\frac{3}{2}\right) + \sqrt{\frac{m}{1}} \left(\frac{3}{2}\right) + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{m+1}{1}} \left(\frac{3}{2}\right)$ ;
In[62]= Table[E0m[m], {m, 0, 1, 0.05}]
Out[62]= {ComplexInfinity[0.], 61.4223[0.05], 31.5868[0.1], 21.7184[0.15],
16.8327[0.2], 13.9359[0.25], 12.0309[0.3], 10.6912[0.35], 9.70367[0.4],
8.9501[0.45], 8.3597[0.5], 7.88749[0.55], 7.50354[0.6], 7.18717[0.65], 6.92364[0.7],
6.70216[0.75], 6.51467[0.8], 6.355[0.85], 6.21838[0.9], 6.10105[0.95], 6.[1.]}

```

Anexo C

Potencial oscilador armónico cuántico

Este potencial permite estudiar los fenómenos mecánico-cuánticos de forma más realista, además se puede utilizar para describir casi cualquier sistema en cual una entidad ejecute vibraciones pequeñas alrededor de su punto de equilibrio estable.

Con una función potencial parabólica en el mínimo se define como (Eisberg, y otros, 1977):

$$V(x) = \frac{C}{2}x^2 \quad (C.1)$$

Donde C es una constante, además desde el punto de vista clásico una partícula que se mueve bajo su influencia experimenta una fuerza restauradora lineal.

$$F(x) = \frac{dV(x)}{dx} = -Cx \quad (C.2)$$

Estas afirmaciones predicen que una partícula bajo la influencia de una fuerza restauradora lineal ejercida por un potencial y desplazada una cantidad x_0 de la posición de equilibrio oscilará en un movimiento armónico simple alrededor de la posición de equilibrio con una frecuencia

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{C}{m}} \quad (C.3)$$

Donde m es su masa, donde la E energía total puede tener cualquier valor ya que x_0 es arbitraria.

Desde el punto de vista cuántico las cosas cambian, donde el postulado de Planck predice que la (E) energía puede tomar solamente un conjunto discreto de valores ya que la partícula es ligada por el potencial a una región de extensión finita.

Según Planck sabemos que la energía puede tomar solamente valores definidos por:

$$E_n = n h \nu \text{ para } n = 1, 2, 3, \dots \quad (C.4)$$

Como sabemos los eigenvalores para un potencial armónico simple están dados por:

$$E_n = \frac{(n+1/2) h \nu}{2} \text{ para } n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (C.5)$$

Donde ν es la frecuencia del oscilador clásico. Como una consecuencia la energía total mínima posible para una partícula ligada al potencial es $E_0 = \frac{h\nu}{2}$ que es la energía del punto cero para el potencial y cuya existencia es requerida por el principio de incertidumbre.

Del análisis anterior podemos obtener las correspondientes eigenfunciones para el oscilador armónico simple.

0	$\psi_0 = A_0 e^{-\frac{u^2}{2}}$
1	$\psi_1 = A_1 u e^{-\frac{u^2}{2}}$
2	$\psi_2 = A_2 (1 - 2u^2) e^{-\frac{u^2}{2}}$
3	$\psi_3 = A_3 (3u - 2u^3) e^{-\frac{u^2}{2}}$
4	$\psi_4 = A_4 (3 - 12u^2 + 4u^4) e^{-\frac{u^2}{2}}$
5	$\psi_5 = A_5 (15u - 20u^3 + 4u^5) e^{-\frac{u^2}{2}}$

Las primeras eigenfunciones ψ_n que corresponden a los primeros eigenvalores se muestran en el siguiente gráfico:

Estas eigenfunciones están expresadas en términos de la variable adimensional u donde

$$u = \left[\frac{(Cm)^{\frac{1}{4}}}{h^{\frac{1}{2}}} \right] x. \quad (C.6)$$

El oscilador armónico cuántico es el análogo mecánico cuántico del oscilador armónico clásico. Es uno de los sistemas modelo más importante en mecánica cuántica, ya que cualquier potencial se puede aproximar por un potencial armónico en las proximidades del punto de equilibrio estable

Además, es uno de los sistemas mecánico cuántico que admite una solución analítica sencilla.

Hamiltoniano, energía y autofunciones

En el problema del oscilador armónico unidimensional, una partícula de masa m está sometida a un potencial cuadrático $V(x) = \frac{1}{2} kx^2$.

En Mecánica Clásica $k = m\omega_0^2$ se denomina constante de fuerza o constante elástica, y depende de la masa m de la partícula y de la frecuencia angular ω_0 .

El Hamiltoniano cuántico de la partícula es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 \quad (C.7)$$

Donde x es el operador posición y \hat{p} es el operador momento $\hat{p} = i\hbar \frac{d}{dx}$. El primer término representa la energía cinética de la partícula, mientras que el segundo

representa su energía potencial. Con el fin de obtener los estados estacionarios (es decir, las autofunciones y los autovalores del Hamiltoniano o valores de los niveles de energía permitidos), tenemos que resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{H} | \psi \rangle = E | \psi \rangle. \quad (C.8)$$

Se puede resolver la ecuación diferencial en la representación de coordenadas utilizando el método de desarrollar la solución en serie de potencias. Se obtiene así que la familia de soluciones es

$$\langle x | \psi_v \rangle = \sqrt{\frac{1}{2^v v!}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\left(\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)} H_v\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) \quad (C.9)$$

Para $v = 0, 1, 2, 3, \dots$

Donde v representa el número cuántico vibracional. Las ocho primeras soluciones ($v = 1a7$) se muestran en la figura de la derecha. Las funciones \hat{H}_n son los polinomios de Hermite:

$$\hat{H}_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (C.10)$$

Los niveles de energía son:

$$E_v = \hbar\omega\left(v + \frac{1}{2}\right) \quad (C.11)$$

Para $v = 0, 1, 2, \dots$

Este espectro de energía destaca por tres razones. La primera es que las energías están "cuantizadas" y solamente pueden tomar valores discretos, en fracciones semienteras $1/2, 3/2, 5/2, \dots$ de $\hbar\omega$.

Este resultado es característico de los sistemas mecano-cuánticos. En la siguiente sección sobre los operadores escalera haremos un detallado análisis de este fenómeno. La segunda es que la energía más baja no coincide con el mínimo del potencial (cero en este caso). Así, la energía más baja posible es $\frac{\hbar\omega}{2}$ y se denomina "energía del estado fundamental" o energía del punto cero. La última razón es que los niveles de energía están equiespaciados, al contrario que en el modelo de Bohr la partícula en una caja.

Conviene destacar que la densidad de probabilidad del estado fundamental se concentra en el origen. Es decir, la partícula pasa más tiempo en el mínimo del potencial, como sería de esperar en un estado de poca energía. A medida que la energía aumenta, la densidad de probabilidad se concentra en los "puntos de retorno clásicos", donde la

energía de los estados coincide con la energía potencial. Este resultado es consistente con el del oscilador armónico clásico, para el cual la partícula pasa más tiempo (y por tanto es donde es más probable encontrarla) en los puntos de retorno. Se satisface así el principio de correspondencia.

Aplicación: moléculas diatómicas

Para estudiar el movimiento de vibración de los núcleos se puede utilizar, en una primera aproximación, el modelo del oscilador armónico. Si consideramos pequeñas vibraciones en torno al punto de equilibrio, podemos desarrollar el potencial electrónico en serie de potencias. Así, en el caso de pequeñas oscilaciones el término que domina es el cuadrático, es decir, un potencial de tipo armónico. Por tanto, en moléculas diatómicas, la frecuencia fundamental de vibración vendrá dada por: $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ que se relaciona con la frecuencia angular mediante $\omega = 2\pi\nu$ y depende de la masa reducida μ de la molécula diatómica.

Anexo D

Teoría de perturbaciones para sistemas de muchos cuerpos.

La teoría de perturbaciones es otra aproximación que permite el cálculo de la energía de correlación electrónica, además de ser consistente con el tamaño. El Hamiltoniano se divide en 2 partes: el de orden cero \hat{H}_0 correspondiente al sistema no perturbado de soluciones exactas y la perturbación, donde la energía exacta se expresa como una suma de contribuciones de complejidad creciente (Rayleigh-Schrodinger Perturbation Theory, 1934).

Las expresiones de estas contribuciones contienen los autovalores de \hat{H}_0 y elementos de matriz asociados a perturbaciones entre estos, los términos que involucran productos de k , estos elementos se agrupan y constituyen la energía de perturbación de orden k . Si el \hat{H}_0 se ha escogido adecuadamente, la perturbación será pequeña y la expansión (suma de términos de primer, segundo... orden) convergerá rápidamente.

Para el problema de autovalores:

$$\hat{H} | \Phi_i \rangle = (\hat{H}_0 + \hat{H}_1) | \Phi_i \rangle = \varepsilon_i | \Phi_i \rangle \quad (\text{D.1})$$

Donde las funciones y valores propios de \hat{H}_0 son conocidas;

$$\hat{H}_0 | \Psi_i^{(0)} \rangle = E_i^{(0)} | \Psi_i^{(0)} \rangle, \text{ o } \hat{H}_0 | i \rangle = E_i^{(0)} | i \rangle \quad (\text{D.2})$$

Si la perturbación es suficientemente pequeña es de esperar que $| \Phi_i \rangle$ y \mathcal{E}_i sean cercanas a $| i \rangle$ y E_i . Queremos un procedimiento que permita mejorar sistemáticamente las funciones y valores propios de \hat{H}_0 , de modo que se acerquen cada vez más a las funciones y valores propios de \hat{H} .

Para ello introducimos el parámetro k según: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}_1$

Y expandimos las funciones y valores propios en series de Taylor:

$$| \Phi_i \rangle = | i \rangle + \lambda | \Psi_i^{(1)} \rangle + \lambda^2 | \Psi_i^{(2)} \rangle + \lambda^3 | \Psi_i^{(3)} \rangle + \dots \quad (\text{D.3})$$

$$\mathcal{E}_i = E_i^{(0)} + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \lambda^3 E_i^{(3)} + \dots \quad (\text{D.4})$$

Donde $E_i^{(k)} = \frac{1}{k!} \frac{\partial^k E_i}{\partial \lambda^k}$, es la energía de orden k , y $| \Psi_i^{(k)} \rangle = \frac{1}{k!} \frac{\partial^k | \Psi_i^{(0)} \rangle}{\partial \lambda^k}$ función de onda de orden k correspondiente al estado i .

Las funciones de onda del sistema no perturbado están normalizadas:

$$\langle \Psi_i^{(0)} | \Psi_i^{(0)} \rangle = \langle i | i \rangle = 1 \quad (\text{D.5})$$

Y establecemos la condición de normalización intermedia: $\langle i | \Phi_i \rangle = 1$ que es válida siempre y cuando $| \Phi_i \rangle$ he $| i \rangle$ no sean ortogonales.

Anexo E

Wolfram Mathematica 10.0

Paquete informático de carácter matemático científico con plataformas de programación, simulación, formulación matemática, cálculo y análisis de datos. (Véase Anexo A y Anexo B).

En los últimos años este paquete de computacional gana espacio como herramienta matemática de cálculos para el análisis y formulación de fenómenos mecánico cuánticos, así por ejemplo, ha sido utilizado en Ecuador de nivel de universidades en el

estudio de sistemas cuánticos de tres cuerpos y cuatro cuerpos y muchos otros. (Non-Born-Oppenheimer electronic and nuclear densities for a Hooke-Cologero three-particle model: Non-uniqueness of density-derived molecular structure., 2012). Por lo tanto, consiste en software con premisos y patentes adquiridos por la ESPOCH.

