



BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA "LUIS RIVERA TERRAZAS"

**"RELAJACIÓN DE ESTADOS CUÁNTICOS
COLECTIVOS EN ARREGLOS DE SISTEMAS
NANOESTRUCTURADOS"**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA:

CARINA MAGDALENA CORTÉS SÁNCHEZ

DIRIGIDA POR:

**DR. JOSE LUIS EUSTOLIO CARRILLO ESTRADA
DRA. LILIA MEZA MONTES**

JUNIO 2018

© 2018 - M. C. Carina Magdalena Cortés Sánchez

Derechos Reservados

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer al Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por la formación y enseñanza. A la Universidad de Ohio por toda las facilidades otorgadas para la realización de una estancia de investigación por el lapso de siete meses, cuya investigación fue complemento importante de este trabajo. Doy gracias a los profesores Sergio Ulloa y Nancy Sandler de la Universidad de Ohio que fueron una fuente inagotable de conocimiento. Ambos Dres., a pesar de estar muy ocupados, siempre sentí que tendrían tiempo para mi, y por eso estaré eternamente agradecida.

A continuación, me gustaría dar las gracias por su apoyo a la Dra. Rosario Moctezuma, cuyas ideas y explicaciones al inicio de esta tesis fueron indispensables para la elaboración de este trabajo, una parte del cual es una continuación de su tesis de doctorado.

Por último, me gustaría decir lo agradecida que estoy con mis asesores por la oportunidad de permitirme realizar una estancia en el extranjero, agradezco que en el trabajo principal me hayan dado orientación. Estos últimos años han sido pacientes y ha sido un verdadero placer trabajar con ellos, así que gracias.

¿No puede impedirse el viento, pero hay que saber hacer molinos?.

– Miguel de Cervantes Saavedra, Don Quixote.

Dedicado a mis hermanas

Relajación de estados cuánticos colectivos en arreglos de sistemas nanoestructurados

Resumen

Basándonos en la dinámica cuántica de electrones en nanoestructuras semiconductoras y metálicas, en este trabajo estudiamos teóricamente las características de los estados colectivos en distribuciones de puntos cuánticos y de anillos cuánticos, ambos semiconductores, y las características de estados plasmónicos colectivos en diferentes distribuciones de nanopartículas metálicas. En el caso de puntos y anillos cuánticos, enfocamos nuestra atención en los procesos y tiempos de relajación de los estados colectivos, con el fin de entender de qué manera la geometría de los puntos y anillos y las características de los arreglos bidimensionales de éstos, así como las interacciones entre los puntos cuánticos y entre los anillos cuánticos, influyen sobre los tiempos de relajación de los modos colectivos. El interés general de esta investigación es entender cómo sería posible incrementar los tiempos de vida de los estados colectivos, lo que sería de gran relevancia para diversos procesos y aplicaciones de estos sistemas. En el caso de los puntos cuánticos, proponemos un procedimiento basado en dispersión de electrones que permitiría estudiar los estados colectivos y estimar sus tiempos de relajación.

Con respecto a las distribuciones de nanopartículas metálicas, investigamos las características de los modos plasmónicos colectivos de distribuciones bidimensionales tipo Grafeno y distribuciones Kagomé. Basados en la aproximación cuasi-estática y el modelo de dipolos puntuales, desarrollamos un estudio detallado de los modos bosónicos en redes Grafeno y Kagomé con diferentes características, centrando nuestra atención en la relación que existe entre las orientaciones de los dipolos generados en las partículas metálicas, con los estados colectivos y la aparición de puntos de Dirac. Comprender esto sería de gran utilidad para descubrir los invariantes topológicos que estos sistemas exhiben y entender los fenómenos inducidos por el rompimiento de simetría de inversión, tales como la aparición de gaps en las bandas en los puntos de Dirac.

Relaxation of quantum collective states in arrays of nanostructured systems

Abstract

In conformity with the quantum dynamics of electrons in semiconductor and metallic nanostructures, in this thesis we study theoretically, the characteristics of collective states in quantum dot and quantum ring distributions, both semiconductors, and the characteristics of the collective behavior in plasmonic states in different distributions of metallic nanoparticles. In the case of quantum dots and rings, we focus our attention on the times of relaxation processes of collective states, in order to understand how the geometry of the dots and rings and the characteristics of the two-dimensional arrangements of these, as well as the interactions between the quantum dots and between the quantum rings, influence the relaxation times of the collective modes. The general interest of this research is to understand how it would be possible to increase the lifetimes of collective states, which would be of great relevance to various processes and applications of these systems. In the case of quantum dots, we propose a procedure based on electron dispersion that would allow us to study the collective states and estimate their relaxation times.

With respect to metallic nanoparticle distributions, we investigate the characteristics of the collective plasmonic modes of two-dimensional Graphene and Kagomé distributions. Founded on the quasi-static approach and the model of point dipoles, we developed a detailed study of the bosonic modes in Graphene and Kagomé arrays with different characteristics, focusing our attention on the relationship between the orientations of the dipoles generated in the metallic particles, the collective states, and the appearance of Dirac points. Understanding this would be very useful to discover the topological invariants that these systems exhibit and the phenomena induced by the broken inversion symmetry, such as the behavior of the bands in the Dirac points.

Publicaciones

- C. M. Cortés, L. Meza-Montes, R. E. Moctezuma, and J. L. Carrillo, “ Relaxation of ferroelectric states in 2D distributions of quantum dots: EELS simulation ”, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 49, 25, (2016).

Participación en eventos

- *Tiempo de Relajación de Estados Ferroeléctricos en Distribuciones Bidimensionales de Puntos Cuánticos Semiconductores*, C. M. Cortés, R. E. Moctezuma, L. Meza-Montes, J. L. Carrillo. LVII Congreso Nacional de Física. Mazatlán, Sinaloa, 2014.
- *Respuesta Dieléctrica para Tiempos de Relajamiento Largos en Distribuciones de Puntos Cuánticos*, C. M. Cortés, R. E. Moctezuma, L. Meza-Montes, J. L. Carrillo. LVIII Congreso Nacional de Física. Mérida, Yucatán, 2015.
- *Relaxation Time Of Ferroelectric States In 2D Distributions Of Semiconductor Quantum Dots*, C. M. Cortés, R. E. Moctezuma, L. Meza-Montes, J. L. Carrillo. XXIV International Materials Research Congress. Cancún. México, 2015.
- *Relaxation of ferroelectric states in 2D distributions of quantum dots tested by electron scattering* , C. M. Cortés, R. E. Moctezuma, L. Meza-Montes, J. L. Carrillo. XLIV Winter Meeting on Statistical Physics. UNAM. México, 2015.

Índice general

1. Antecedentes	4
1.1. Nanoestructuras	4
1.1.1. Puntos cuánticos	5
1.1.2. Anillos cuánticos	6
1.1.3. Nanopartículas metálicas	7
1.2. Propiedades físicas y estructura electrónica	9
2. Relajación en sistemas de puntos cuánticos interactivos	12
2.1. Puntos cuánticos independientes	13
2.1.1. Estados electrónicos	14
2.2. Estados colectivos	15
2.3. Polarización y transiciones de fase en una distribución de QDs	17
2.3.1. Polarización	17
2.3.2. Transición de fase Paraeléctrica - Ferroeléctrica	17
2.4. Modelos de interacción	19
2.4.1. Modelo de Ising	20
2.4.2. Aproximación de Bragg-Williams	21
2.5. Resultados	25
2.5.1. Función dieléctrica	25
2.5.2. Función de pérdida de energía	27
2.5.3. Tiempo de relajación de estados	30
2.6. Conclusiones	32
3. Anillos cuánticos: relajación de estados colectivos	34
3.1. Partícula libre moviéndose en un anillo de ancho infinitesimal	35
3.2. Campo magnético perpendicular a un anillo cuántico	36
3.3. Resultados	39
3.3.1. Anillo cuántico bidimensional	39
3.3.2. Anillo cuántico tridimensional	40
3.3.3. Distribución de anillos cuánticos	46
3.4. Conclusión	47

4. Estados plasmónicos de arreglos de partículas metálicas	49
4.1. Plasmones en nanopartículas metálicas	50
4.1.1. Aproximación cuasiestática: Interacción dipolo-dipolo	51
4.2. Plasmones en red Kagomé	53
4.2.1. Descripción del arreglo	53
4.2.2. Arreglo de nanopartículas	54
4.2.3. Dispersión de plasmones ($\varphi = 0^\circ$)	57
4.2.4. Dispersión colectiva de plasmones en el modo $0 < \theta \leq \pi/2, \varphi = 0^\circ$.	
Armchair	58
4.2.5. Polarización perpendicular al plano de la distribución $\theta = 0$ y $\varphi = 0^\circ$	60
4.2.6. Dispersión colectiva de plasmones en el modo $0 < \theta \leq \pi/2, \varphi = \frac{\pi}{2}$.	
Zigzag	62
4.2.7. Estructura de Kagome con simetría de inversión rota (diferentes ta-	
maños y/o materiales)	65
4.2.8. Siguietes vecinos más cercanos (nanoesferas idénticas)	68
4.3. Grafeno artificial	71
4.3.1. Plasmones en red panal	72
4.3.2. Arreglo de nanopartículas	73
4.3.3. Dispersión de plasmones en red panal con simetría de inversión rota	77
4.3.4. Dispersión de plasmones con interacción dipolo-dipolo más allá de los	
vecinos más cercanos	79
4.4. Comparación Grafeno plasmónico y Kagomé plasmónico	79
4.5. Conclusión	81
5. Conclusiones	83
5.1. Conclusiones generales y comentarios	83
A. Plasmones en red Lieb	85
A.1. Descripción del arreglo	85
A.2. Polarización perpendicular al plano de la distribución $\theta = 0$ y $\varphi = 0^\circ$	86
Bibliografía	88

Introducción

En este trabajo enfocamos nuestra atención en la posibilidad de controlar y optimizar el tiempo de decaimiento de los estados colectivos en puntos cuánticos cónicos interactivos cambiando los parámetros característicos individuales y los de la distribución. En esta línea, se plantea la base para extrapolar este problema a un sistema autoensamblado de nanoanillos cuánticos en presencia de un campo magnético, donde debido a la peculiar geometría, se predice que el tiempo de relajación colectivo presentará ventajas para una aplicación más extensa en problemas de información cuántica.

La generación de estados entrelazados en sistemas de puntos cuánticos, la observación de la decoherencia en los tiempos de decaimiento del orden de un picosegundo, así como la transferencia de coherencia de un estado cuántico macroscópico, se han estudiado desde hace ya varios años. Actualmente, es posible diseñar estos sistemas a nanoescala que se comportan como átomos artificiales, en el sentido de que poseen un espectro bien definido y controlable, al menos en cierta medida. Se observa que las propiedades físicas y posibles aplicaciones de estos sistemas cuánticos dependen de los eigenestados de los electrones confinados, es decir, al controlar las características físicas de los puntos cuánticos interactivos de la distribución, uno puede controlar el tiempo de decaimiento de los estados colectivos. Este decaimiento dependerá directamente de la transición de estados electrónicos, de características físicas de un punto cuántico individual, así como de la distribución de éstos. El problema de los tiempos de decaimiento es relevante y este trabajo intenta contribuir a una posible respuesta mediante un enfoque simple, pero físicamente significativo basado en aproximaciones bien establecidas. Sugerimos la espectroscopia de pérdida de energía de electrones como una herramienta que ayude a responder esta pregunta. Los conocimientos alcanzados sobre esta fenomenología proporcionarían algunas herramientas, y posibilidades para aprender cómo controlar el tiempo de vida coherente de los estados electrónicos en puntos cuánticos, que ha sido en gran medida una cuestión clave para aumentar la posibilidad de usarlos para desarrollar algunos dispositivos cuánticos.

Por tanto, la comprensión de la influencia de las propiedades electrónicas de los constituyentes individuales, sobre las propiedades colectivas emergentes de estos sistemas es realmente importante. Es así, que el tiempo de relajación de estados electrónicos colectivos en nuestra distribución, es investigado teóricamente mediante la simulación de experimentos de espectroscopía electrónica de pérdida de energía. A partir del cálculo numérico de la probabilidad

de pérdida de energía de un haz de electrones que viaja paralelo a la distribución, es posible estimar el tiempo de amortiguamiento de estados ferroeléctricos.

En el capítulo uno se describen antecedentes y la importancia científica de los sistemas nanométricos: Puntos cuánticos, anillos cuánticos y nanopartículas metálicas. Su dimensionalidad, propiedades, respuesta óptica, y su capacidad de confinar electrones, permite considerarlos como átomos artificiales, entonces así, se puede describirlos cuánticamente.

Los capítulos dos y tres analizan y describen el comportamiento de arreglos bidimensionales de semiconductores embebidos en un sustrato semiconductor. En el capítulo dos discutimos los tiempos de relajación colectivos en puntos cuánticos. Los resultados fueron publicados en un artículo cuyo título es *Relaxation of ferroelectric states in 2D distributions of quantum dots: EELS simulation*, en la revista *Journal Physics D (Appl. Physics)*, volumen 49, en el año 2016, en la página 255304. El capítulo tres, analiza las características de los estados electrónicos confinados en anillos cuánticos, y se evalúa la dependencia de estos en función de las dimensiones, y de sus propiedades geométricas.

El desarrollo de los capítulos dos y tres, está cimentado en el actual conocimiento y el estudio de la posible manipulación del tiempo de relajación en sistemas bidimensionales, ya que éste ha sido uno de los temas de fundamental importancia en muchas áreas de la física de la materia condensada, la óptica cuántica y la tecnología de la información. Los tiempos de decaimiento de los estados cuánticos están estrechamente relacionados con la pérdida de coherencia cuántica, cuyo control puede tener aplicaciones sustanciales en el campo de la computación cuántica, particularmente en prolongar la coherencia de la información cuántica debido a la interacción con un entorno. En este sentido, la exploración de los fenómenos que determinan los tiempos de relajación se ha convertido en un tema fundamental en estos campos de investigación.

En el cuarto capítulo, se discuten los resultados del trabajo de investigación desarrollado bajo la dirección de los Drs. Sergio Ulloa y Nancy Sandler en la Universidad de Ohio. Esta investigación fue de gran ayuda para entender el comportamiento de los modos colectivos electrónicos en sistemas nano-estructurados. Inspirados en estudios teóricos y experimentales previos, en grafeno plasmónico, investigamos las propiedades de un nuevo material artificial de Dirac. En primer lugar, consideramos una red bidimensional de nanopartículas metálicas dispuestas en geometría kagomé, donde cada partícula soporta plasmones superficiales localizados, y así estudiamos las propiedades cuánticas de los plasmones colectivos

resultantes de la interacción dipolar de campo cercano entre las nanopartículas.

Analíticamente investigamos el hamiltoniano efectivo, los eigenvalores y la dispersión de los plasmones colectivos para orientaciones arbitrarias de los momentos dipolares individuales. Cuando la dirección de los dipolos es perpendicular al plano, el espectro presenta conos de Dirac, similares a los presentes en la estructura electrónica de las bandas del grafeno. Discutiremos además sobre cómo uno puede manipular los puntos de Dirac en la zona de Brillouin, y sintonizar los plasmones colectivos de dispersión mediante la modificación de la polarización de plasmones superficiales localizados, dejando un camino para un estudio futuro de un análogo plasmónico totalmente sintonizable de ésta, y otras redes.

Cuando la simetría de inversión de la estructura kagomé se rompe, los plasmones colectivos se convierten en modos de Dirac quirales asimétricos respecto a la energía. Resaltaremos cómo romper la simetría de inversión del sistema permite resultados que no son posibles en este sistema simétrico en ausencia de simetrías.

Presentaremos finalmente, un estudio cuántico de las interacciones dipolares entre las nanopartículas, mas allá de primeros vecinos. Este enfoque se puede generalizar para describir muchos sistemas artificiales y reales con esta geometría, etiquetando estos materiales de Dirac de acuerdo a su espectro en la zona de Brillouin.

Capítulo 1

Antecedentes

En el presente capítulo se comenta la motivación y la relevancia científica para realizar este trabajo de investigación. Se comentan algunos de los antecedentes importantes y se discute brevemente la posibilidad de confinar electrones, bajo diferentes condiciones, en sistemas nanométricos como puntos cuánticos y anillos cuánticos. En este sentido estos sistemas pueden concebirse como átomos artificiales. También brevemente, se discuten algunos aspectos de las herramientas teóricas necesarias para la investigación de las propiedades físicas de estos sistemas nanométricos.

1.1. Nanoestructuras

El impresionante progreso en la fabricación de estructuras semiconductoras de baja dimensionalidad durante la última década, ha hecho posible reducir la dimensión efectiva de materiales tridimensionales a sistemas de menor dimensionalidad, como por ejemplo: pozos, hilos, puntos y anillos cuánticos. La heteroestructura más simple es el pozo cuántico (QW) que consiste en una capa delgada de un determinado semiconductor (aproximadamente 100 Å), confinada entre dos capas de otro material semiconductor caracterizado por una mayor brecha de energía prohibida (banda prohibida). Debido al perfil del potencial asociado a esta estructura, los portadores ven restringido su movimiento a un plano perpendicular a la dirección de crecimiento de la heteroestructura. Reduciendo la dimensionalidad se obtiene otra estructura semiconductor: hilos cuánticos (QWR), los que son buenos conductores en una dirección. A diferencia de los QW, donde los portadores se localizan en la dirección perpendicular a las capas pero se mueven libremente en el plano de la capa, en los QWR se

localizan en dos direcciones y se mueven libremente a lo largo del eje del hilo. Finalmente, reduciendo la dimensionalidad a cero la estructura semiconductor resultante es el punto cuántico (QD) (ver Fig. 1.1).

1.1.1. Puntos cuánticos

Los QDs son estructuras semiconductoras, superconductoras o metálicas, donde las cargas libres son confinadas en las tres direcciones del espacio debido a barreras de potencial, reduciendo así los grados de libertad de éstos a cero. Si el tamaño de la región es menor que la longitud de onda del electrón (del orden de 10 nm en la mayoría de los semiconductores), el confinamiento produce cuantización en los estados electrónicos. El espectro de los electrones confinados en QDs consiste en niveles discretos de energía, como ocurre en un átomo.

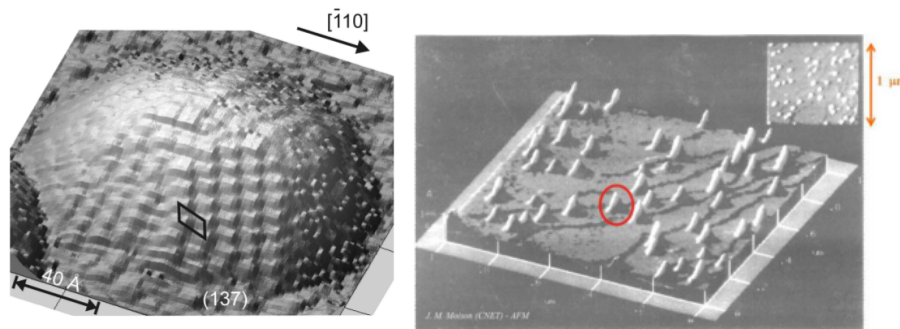


Figura 1.1: Izq. Imagen tridimensional de microscopio de efecto túnel (STM) de un punto cuántico sin cubrir de InAs crecido sobre GaAs (001) (Instituto Fritz-Haber, Berlin [1]). Der. Imagen obtenida por microscopio de fuerza atómica (AFM) de QDs de InAs/GaAs autoensamblados [2].

El sistema de QDs que estudiamos en este trabajo, está formado por una distribución bidimensional de puntos cuánticos cónicos de GaAs embebidos en una matriz de $Al_xGa_{1-x}As$. Los QDs son modelados como un cono truncado sobre una capa de mojado, su formación es resultado de un crecimiento de *Stranski-Krastanov* o autoensamblado, que es una técnica resultante de la relajación de la energía elástica, consecuencia de una diferencia de constantes de red entre dos materiales semiconductores [3]. Este crecimiento es una variante de la técnica de crecimiento por epitaxia de haces moleculares (*MBE*, *Molecular Beam Epitaxy*).

¹ El crecimiento de InAs sobre GaAs es un ejemplo típico en donde el desacople entre las constantes de red es de $\sim 7\%$. De esta manera, las islas de InAs se forman coherentemente, libres de dislocaciones sobre el substrato de GaAs acompañadas por una capa de mojado.

Veremos más adelante que las distribuciones bidimensionales de QDs semiconductores autoensamblados, permiten el estudio de las propiedades dieléctricas, paraeléctricas y ferroeléctricas por medio de la descripción de los fenómenos de polarización en distribuciones de puntos cuánticos interactuantes. Esto permite a su vez examinar las transformaciones análogas a las transiciones de fase que ocurren en los materiales ferroicos.

Algunas de las aplicaciones de los QDs en la industria de los materiales nanoestructurados se encuentran en la fabricación de LED's, nanomagnetos, nanosensores, dispositivos nanofotovoltaicos, computación cuántica, dispositivos espintrónicos, integración de QDs en microcavidades ópticas de cristales fotónicos para el desarrollo de dispositivos avanzados, memorias electrónicas/ópticas de alta densidad, entre muchas otras.

1.1.2. Anillos cuánticos

Otra nanoestructura que nos interesa investigar en sus propiedades magnéticas son los anillos cuánticos auto-ensamblados, que pueden ser crecidos por la técnica MBE (ver Fig. 1.2). Los QRs son estructuras con confinamiento en tres direcciones del espacio (similares a los QDs) que han atraído mucho interés debido a la aparición de corrientes de equilibrio o corrientes persistentes cuando se aplican campos magnéticos a estos sistemas [3-5]. La geometría del anillo hace que esta nanoestructura sea de gran interés en física, incluido su espectro de infrarrojo lejano y sus propiedades magnéticas novedosas.

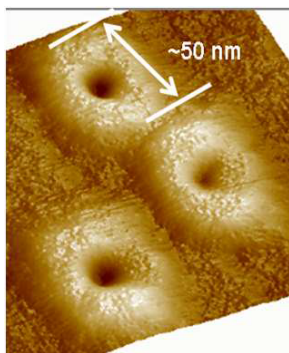


Figura 1.2: Imagen de anillos cuánticos de GaInAs crecidos por MBE, usando el modo de crecimiento Stranski-Krastanov (Axel Lorke *et. al.*) [5].

El avance en la nanofabricación basada en anillos semiconductores ha permitido no solamente el desarrollo de nuevos dispositivos con potenciales usos tecnológicos, sino también permiten la construcción de herramientas para investigar los fundamentos de la mecánica

cuántica [6,7]. Algunos fenómenos como la superposición, la interferencia cuántica, el entrelazamiento cuántico y la existencia de fases topológicas, han sido verificados en forma bella e impresionante en estudios experimentales del llamado efecto Aharonov-Bohm (AB) [8-10]. En la *física clásica*, el movimiento de una partícula cargada eléctricamente sólo es afectada por la presencia de un campo magnético \mathbf{B} cuando la partícula entra en una región del espacio en el que \mathbf{B} está presente. Entretanto, en la *física cuántica* todo portador de carga puede verse afectado por el vector potencial electromagnético \mathbf{A} , incluso en regiones donde $\mathbf{B} = \mathbf{0}$. Este contraste sorprendente entre la física clásica y cuántica en el campo de los materiales nanoestructurados, se ha demostrado en varios experimentos de anillos y puntos cuánticos de materiales semiconductores, metales, grafeno y superconductores [11,12]. Una fase topológica aparece en la función de onda de un sistema cuántico, QRs en este caso, al completar una trayectoria cerrada en el espacio de parámetros del hamiltoniano del sistema [13]. En la aproximación adiabática la fase acumulada se denomina fase de Berry, y la extensión a un caso más general donde la trayectoria es cerrada, se denomina fase de Aharonov-Anandan [14]. Experimentos recientes en ensambles de nanoanillos cuánticos autoensamblados demuestran una dependencia controlable de las características físicas [14]. Esto nos brinda una oportunidad única para estudiar efectos cuánticos topológicos tridimensionales como oscilaciones de la magnetización, comportamiento cuántico de la susceptibilidad magnética, etc. El estudio de ensambles de nanoestructuras, por ejemplo, permitiría procesar información (computación cuántica), en situaciones donde la dispersión en los parámetros dan como resultado la decoherencia no controlable en el entrelazamiento de múltiples bits.

1.1.3. Nanopartículas metálicas

Otro tipo de nanoestructura que investigamos en sus propiedades electrónicas de superficie son las nanopartículas metálicas. Las nanopartículas metálicas permiten escrutar el comportamiento de la luz cuando interactúa con estos materiales, así este estudio ha dado lugar a una gran variedad de aplicaciones prácticas en el campo de los materiales artificiales.

Cuando la luz incide sobre partículas relativamente grandes comparadas con su longitud de onda, la óptica clásica se utiliza ampliamente para obtener la información de estos objetos. Sin embargo, el límite de difracción ha obstaculizado la capacidad de observar estructuras microscópicas con dimensiones menores que la longitud de onda de la luz de detección. Este

límite se ha superado con el uso de nanoestructuras plasmónicas formadas por ensambles de nanopartículas metálicas. En determinadas condiciones, estos sistemas presentan características extraordinarias, tales como índice de refracción negativo [15], enfocado perfecto (*perfect lensing*) [16], invisibilidad electromagnética [17,18], etc.

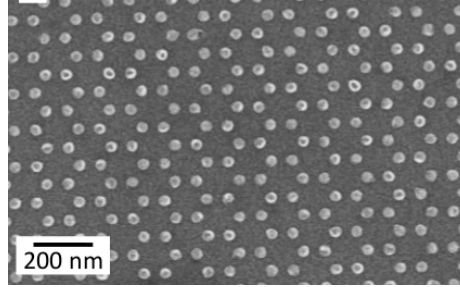


Figura 1.3: Imagen de microscopio electrónico de barrido (SEM), de un metamaterial plasmónico de un arreglo panal de nanodiscos de oro (Diego Scarabelli *et al.*) [19].

Para obtener las propiedades electrónicas de estos arreglos, primero se establecen las condiciones sobre la polarización de los plasmones superficiales localizados (PSL). Estas propiedades pueden ser sintonizadas en función de la dirección de los dipolos inducidos, obteniendo comportamientos diferentes de los modos colectivos en el sistema.

Algunos estudios teóricos sobre una red panal *honeycomb* de nanopartículas metálicas muestran que la red puede soportar modos plasmónicos colectivos, que se comportan como electrones en el grafeno, teniendo una dispersión lineal similar a las partículas de Dirac sin masa en reposo [20]. En esta línea, nosotros examinamos la dispersión plasmónica en una red de Kagomé de nanopartículas metálicas interactivas y analizamos el comportamiento de las excitaciones bosónicas, en una forma similar a como lo hicieron en la red panal *honeycomb* Weick *et al.* [21,22]. Las redes panal y Kagomé soportan plasmones colectivos extendidos que surgen de la interacción dipolar de campo cercano entre los plasmones de superficie localizados en cada nanopartícula. Como veremos más adelante, los resultados muestran propiedades muy interesantes en estas redes, incluyendo una banda de excitaciones que es completamente plana y otras dos que describen puntos de Dirac en la zona de Brillouin (ZB) [23,24].

En resumen, el conocimiento del comportamiento de los portadores a nivel atómico, ha permitido el aprovechamiento tecnológico de sus propiedades colectivas en una gran variedad de

dispositivos. La implementación de estos nuevos materiales en dispositivos optoelectrónicos tiene gran interés desde la perspectiva de la física aplicada y abren diversas áreas de investigación, ya que estos sistemas de baja dimensionalidad permiten el estudio de conceptos fundamentales en la física de materia condensada.

1.2. Propiedades físicas y estructura electrónica

Las propiedades de todos los materiales están inherentemente relacionadas con los átomos de los que están compuestos y de la manera en que interaccionan entre ellos para formar estructuras más complejas.

El espectro de energía de electrones confinados en puntos y anillos cuánticos en las bandas de conducción, es obtenido resolviendo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en la aproximación de la función envolvente

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (1.1)$$

donde $\Psi(\vec{r})$ es la función de onda, m^* es la masa efectiva del portador de carga y $V(\vec{r})$ es la energía potencial del electrón en el material ^[I]. Para un material semiconductor en bulto tridimensional, los electrones con masa m^* se comportan como electrones libres cerca de los puntos de alta simetría, por lo que su energía es proporcional al cuadrado de su vector de onda $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$, por ejemplo, para el punto Γ

$$E_{3D} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (1.2)$$

Reduciendo drásticamente las dimensiones del sistema, los electrones restringen su movimientos en una dirección específica, pero estarán libres de moverse en alguna otra dirección. Este tipo de confinamiento puede ser realizado embebiendo un material semiconductor en otro con banda prohibida más grande. Por ejemplo (ambos materiales modelados como materiales cuboides), para un pozo cuántico el electrón está confinado a lo largo de una dirección espacial L_x , y la energía del electrón que se mueve libremente en plano y-z se escribe como

$$E_{2D} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n_1 \pi}{L_x} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}. \quad (1.3)$$

^{II}Para el *GaAs*, la masa efectiva de los electrones $m_e = 0.063m_0$, (m_0 es la masa del electrón libre), la longitud de De Broglie $\lambda_B \sim 40$ nm y ~ 9 nm a $T = 300K$ para electrones.

Un hilo cuántico representa un sistema confinado en las direcciones espaciales L_x y L_y , es en este caso

$$E_{1D} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n_1^2 \pi^2}{L_x^2} + \frac{n_2^2 \pi^2}{L_y^2} \right) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}. \quad (1.4)$$

Reduciendo las dimensiones aún más, los portadores de carga son confinados en una caja con dimensiones L_x, L_y, L_z ^{III}, y su energía en coordenadas rectangulares se expresa en la forma

$$E_{0D} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{n_1^2 \pi^2}{L_x^2} + \frac{n_2^2 \pi^2}{L_y^2} + \frac{n_3^2 \pi^2}{L_z^2} \right), \quad (1.5)$$

dado que los niveles energéticos del punto cuántico dependen de su forma y dimensiones, se dice que este sistema se comporta como un átomo artificial. Así la representación de la función de onda puede entenderse usando la Fig. 1.4, donde los primeros orbitales atómicos son ilustrados y denotados, con la usual nomenclatura s, p, d correspondiente a $l = 1, 2, 3...$

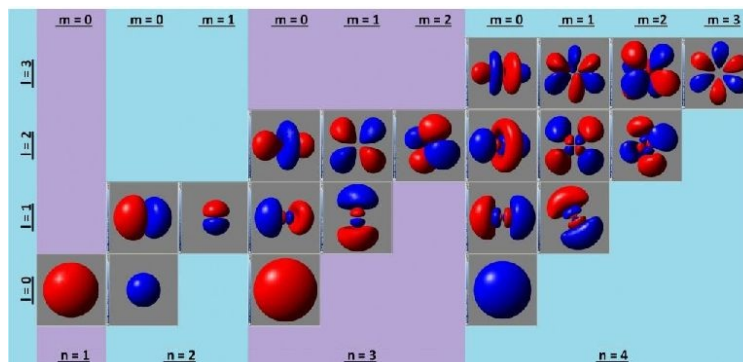


Figura 1.4: Representación de los orbitales electrónicos que surgen de la ecuación de Schrödinger para átomos con un solo electrón. Las funciones de onda son dependientes de los valores (n, l, m) , y muestran la región espacial con mayor probabilidad de encontrar un electrón. Las regiones azul/roja tienen diferente fase de función de onda.

El confinamiento del movimiento del electrón, en por lo menos una dimensión espacial, afecta a los niveles de energía y la densidad de estados, Fig. 1.5. Además, la posición de los niveles energéticos varía sensiblemente con la anchura y la composición del material que origina la barrera potencial, permitiendo sintonizar las transiciones de la estructura variando los parámetros de diseño.

Las correspondientes densidades de estados electrónicos sistemas volumétricos, pozos, hilos y puntos cuánticos, son los siguientes

^{III}En particular, los parámetros y forma explícita considerada en este trabajo se describen en la Secc. 2.3.

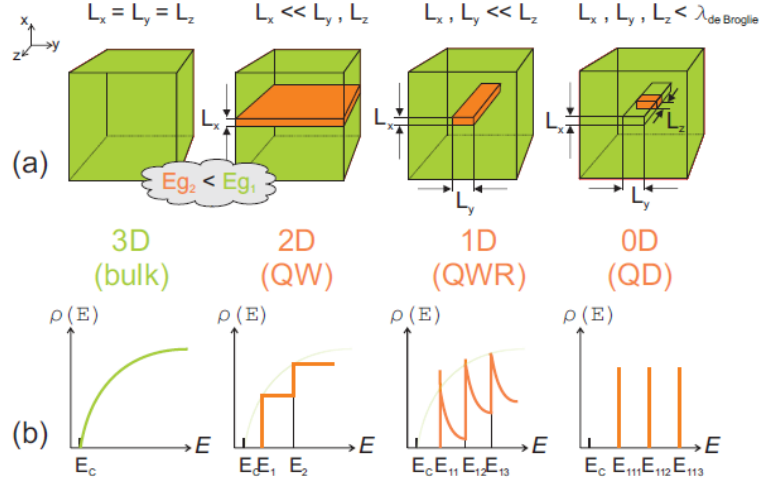


Figura 1.5: (a) Comparación esquemática de las dimensiones típicas de material en bulto (bulk), pozo (QW), hilo (QWR) y punto cuántico (QD). El confinamiento se realiza insertando un semiconductor en otro con mayor ancho de banda. (b) Las densidades de estados correspondientes a las estructuras que se muestran en (a). Las energías están indexadas por los números cuánticos correspondientes n_1, n_2, n_3 .

$$\rho_{3D} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}, \quad (1.6)$$

$$\rho_{2D} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2 L_x} \sum_{n_1} \theta(E - E_{n_1}), \quad (1.7)$$

$$\rho_{1D} = \frac{(2m^*)^{\frac{1}{2}}}{\pi \hbar L_x L_y} \sum_{n_1, n_2} (E - E_{n_1, n_2})^{-\frac{1}{2}}, \quad (1.8)$$

$$\rho_{0D} = \frac{2}{L_x L_y L_z} \sum_{n_1, n_2, n_3} \delta(E - E_{n_1, n_2, n_3}), \quad (1.9)$$

donde las densidades de estados describen los niveles confinados. En las expresiones anteriores $\theta(E - E_n)$ y $\delta(E - E_n)$ son las funciones de Heaviside y Dirac, respectivamente. Uno puede observar que el espectro discreto de energía para QDs, Ec. (1.9), tiene una sorprendente similaridad con el bien conocido espectro de un átomo. Esta similaridad es la razón de que un QD frecuentemente sea referido como un átomo artificial [25, 26].

El entendimiento de las propiedades de las nanoestructuras descritas en este capítulo aún está avanzando, en este recorrido aún queda un largo trecho. El campo de la nanociencia, multidisciplinario por su naturaleza, es la base de lo que será la nanotecnología del siglo XXI. Y la nanofísica juega un rol muy importante en este contexto.

Capítulo 2

Relajación en sistemas de puntos cuánticos interactivos

En este capítulo estudiamos los tiempos de relajación de los estados electrónicos colectivos de una distribución bidimensional de puntos cuánticos cónicos. Suponemos que el sistema de puntos cuánticos es excitado por un haz de electrones que incide paralelamente al plano de la distribución. Mediante el cálculo de la función de pérdida de energía del haz de electrones se calcula el tiempo de relajación. Los puntos tienen un momento dipolar intrínseco y son colocados lo suficientemente cercanos como para que una interacción del tipo interacción de correlación-intercambio ocurra entre ellos. Esto produce una interrelación entre puntos cuánticos con sus vecinos, la cual induce el comportamiento ferroeléctrico. También contribuye a las interacciones que causan el comportamiento ferroeléctrico el hecho de que estemos considerando que los QDs yacen sobre de una capa de mojado [27,28]. Investigamos este comportamiento mediante los llamados modelos de red (*lattice models*). Introducimos la interacción entre los puntos cuánticos por medio de la aproximación de campo promedio. En esta aproximación, suponemos que cada punto es afectado por sus primeros vecinos y que dicha interacción es la misma para cada uno de los puntos cuánticos autoensamblados de la distribución homogénea. Es así que, las propiedades físicas colectivas, modos de polarización y la respuesta dieléctrica del sistema ferroeléctrico las evaluamos mediante la simulación numérica de experimentos de dispersión de electrones en la modalidad de (EELS, *espectroscopía electrónica de pérdida de energía*) [29].

Para calcular las propiedades físicas asociadas a los momentos dipolares de los electrones

confinados en los puntos cuánticos, se requiere del cálculo de los eigenestados y eigenvalores de la distribución de puntos cuánticos. Conociendo los espectros de las excitaciones colectivas, se calculan los momentos dipolares, la respuesta dieléctrica de la distribución, y la función de pérdida de energía de los electrones que viajan paralelamente a la superficie que contiene la distribución [\[1\]](#).

2.1. Puntos cuánticos independientes

Comenzamos nuestro análisis de las propiedades ferroicas de distribuciones de puntos cuánticos, calculando los estados de energía y las funciones de onda correspondientes. Analizamos QDs cónicos de GaAs con radios $R = 15$ nm y $R = 4$ nm, ambos con la misma altura de 17.7 nm. Éstos están embebidos en una matriz cúbica de Al_xGaAs_{1-x} con dimensión $L = 45$ nm. Hemos elegido el potencial de confinamiento cónico y esas dimensiones para los QD, porque estos valores conducen a resultados más claros para la susceptibilidad eléctrica y a una estimación más precisa de la temperatura crítica (ver sección [2.3.2.3](#)) [\[30\]](#), [\[31\]](#). Para calcular las funciones de onda de los estados confinados, resolvemos numéricamente la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, esto lo llevamos a cabo mediante el uso del paquete de software *COMSOL Multiphysics*, el cual resuelve ecuaciones diferenciales mediante la técnica de elemento finito. El operador hamiltoniano del electrón confinado que utilizaremos, considera la conocida aproximación de masa efectiva, dentro del formalismo de una banda. La masa efectiva del electrón en la matriz es $m_2^* = 0.0962$, mientras que $m_1^* = 0.063$ en GaAs (QD). La barrera de potencial entre el punto cuántico y la matriz es $V_0 = 500$ meV. La capa de mojado tiene un ancho de 2.5 nm, mientras que el campo eléctrico externo es de 1 meV/nm y un campo molecular $E_{ef} = 1$ meV/nm en la dirección z . Introducimos el campo E_{ef} en la distribución, pues su efecto sobre los QDs y la capa de mojado [\[11\]](#) es que pierdan simetría y por tanto tengan un momento dipolar intrínseco. El campo eléctrico E_{ext} se aplica para obtener las propiedades dieléctricas de la distribución. Por otro lado, en nuestro hamiltoniano la energía de correlación e intercambio la introduciremos en la aproximación de campo promedio mediante un campo constante E_{mol} .

Aquí suponemos que la densidad superficial del sistema de QDs es $1.5 \times 10^5/cm^2$.

^I En la distribución bidimensional, las transiciones entre estados cuánticos de cada QD se deben a la interacción del haz incidente de electrones con los QDs, donde los estados excitados decaen después de un tiempo de relajación o parámetro de amortiguamiento γ .

^{II} Esta capa de mojado favorece la interacción de correlación e intercambio entre los QDs.

Cabe aquí enfatizar que los valores característicos de los puntos cuánticos, la distribución y los campos aplicados son del todo realistas.

2.1.1. Estados electrónicos

Para obtener la función de onda del electrón confinado en un punto cuántico, se resolvió la ecuación de Schrödinger en la aproximación parabólica de masa efectiva,

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m^*} + V_e(r) \right] \Psi(r) = E\Psi(r), \quad (2.1)$$

y con el momento $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ toma la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left[\frac{1}{m^*} \nabla \Psi(r) \right] + V_e(r) \Psi(r) = E\Psi(r), \quad (2.2)$$

donde \hbar es la constante de Plank, E es la energía, m_i^* y $V_e(r)$ son la masa efectiva y el potencial de confinamiento como función de la posición. La solución de la ecuación (2.2) del QD y el sustrato, debe tomar en cuenta la diferencia de la masa efectiva asociada con cada región Ω_1 y Ω_2 donde la función de onda existe. La masa efectiva tiene los siguientes valores

$$m_j(r) = \begin{cases} m_1^* = 0.063m_e, & \text{si } r \in \Omega_1, \\ m_2^* = 0.0962m_e, & \text{si } r \in \Omega_2, \end{cases}$$

donde $m_e = 5.68 \times 10^{-12} eV/c^2$, Ω_1 representa la región QD-capa de mojado, y Ω_2 representa la región fuera de Ω_1 . Para el sistema de puntos cuánticos con discontinuidad en la interfase entre el punto cuántico y la matriz, el potencial de paredes duras (infinitas) es en las fronteras de la caja de la matriz y blandas (finitas) en el frontera entre materiales, y es descrito por la expresión

$$V_e(r) = \begin{cases} 0, & \text{si } r \in \Omega_1, \\ V_0 = 500 \text{ meV}, & \text{si } r \in \Omega_2, \\ \infty, & \text{si } r \notin \Omega_1 \cup \Omega_2. \end{cases} \quad (2.3)$$

2.2. Estados colectivos

Los fenómenos como el entrelazamiento, la decoherencia y la relajación de estados cuánticos, han atraído la atención durante las últimas décadas, esto, debido a que su comprensión sería de gran relevancia, desde el punto de vista de la ciencia básica y aportaría también un gran potencial de aplicación [32-36]. Dado que muchas de las propiedades físicas y posibles aplicaciones de estos sistemas cuánticos dependen de los estados propios del electrón confinado en el QD [37-39], al controlar las características físicas de los QD interactivos de una distribución, uno puede cambiar el tiempo de decaimiento de los estados colectivos. En este trabajo hemos estudiado el comportamiento colectivo de un sistema compuesto por los dipolos de los estados cuánticos de los QD, mediante una aproximación basada en el modelo de Ising. Este modelo de red abre la posibilidad de investigar teóricamente la física de las transiciones de fase, es decir, los cambios que ocurren cuando una pequeña variación en un parámetro como la temperatura (T) causa un cambio cualitativo a gran escala en el estado del sistema. A temperaturas suficientemente bajas, no hay variación aleatoria significativa en la alineación de los dipolos con el campo aplicado, mientras que a temperaturas suficientemente altas, el movimiento térmico aleatorio destruye gran parte del efecto del campo [40]. Pequeñas perturbaciones al sistema cuántico e interacciones con el medio ambiente, pueden ocasionar que el tiempo de coherencia disminuya. Los electrones confinados en los QDs, se aíslan mejor del ambiente y tienen menos grados de libertad internos que los que tendrían en otros sistemas. Esto podría ser de gran importancia en computación cuántica para incrementar los tiempos de coherencia de los estados (de importancia crucial para los respectivos *qubits*) codificados dentro del QD [41] ^{III}.

Las fluctuaciones en la polarización son determinantes en el comportamiento del sistema en la región crítica. Por lo general, las fluctuaciones se miden por medio de la función de correlación, aquí denotada por $h(r_i, r_j)$. Usualmente, la influencia entre las componentes del sistema se describe por las correlaciones espaciales y temporales. La distancia característica a la que la correlación ' ξ ' es notoria, es conocida como longitud de correlación. Un valor de ξ pequeño significa que los dipolos distantes están muy débilmente correlacionados. La longitud de la correlación se obtiene a partir de la función de correlación $h(r)$, que generalmente depende de la separación espacial ' r ' entre un par de dipolos ' p_i ' y ' p_j ' de acuerdo con la expresión [42]

^{III} La excitación de una sola carga en un QD semiconductor, podría representar un bit cuántico o *qubit*.

$$h(r_i, r_j) = \left\langle (p_i - \langle p_i \rangle)(p_j - \langle p_j \rangle) \right\rangle, \quad (2.4)$$

donde r_i , es el vector de posición del sitio i y $\langle \rangle$ denota un promedio térmico. Si el sistema es invariante translacional $\langle p_i \rangle = \langle p_j \rangle$ y h depende solo de $r_i - r_j$

$$h(r_i - r_j) = \langle p_i p_j \rangle - \langle p_i \rangle \langle p_j \rangle. \quad (2.5)$$

Si los dipolos son independientes, esta cantidad debe ser cero. Lejos del punto crítico, los dipolos no están correlacionados cuando r tiende a infinito, y por lo tanto, la función de correlación decae a cero. De la ecuación (2.4), las correlaciones se miden por medio de las fluctuaciones, es decir, las variaciones de los dipolos respecto de sus valores medios. Cerca de la región crítica, la función de correlación decae a cero exponencialmente en función de la distancia entre los dipolos como

$$h(r) \sim r^{-\alpha} \exp(-r/\xi), \quad (2.6)$$

donde α es una constante. En la región crítica, el orden de largo alcance se desarrolla en el sistema, ξ se vuelve muy grande y la ecuación (2.6) no se cumple. El orden de largo alcance significa que la correlación no desaparece cuando la longitud de la correlación se aproxima al infinito.

La evidencia experimental y los modelos con solución exacta, muestran que en estas condiciones $h(r)$ decae como una ley de potencia

$$h(r) \sim r^{-d-2+\eta}, \quad (2.7)$$

donde η es un exponente crítico y d es la dimensionalidad del espacio. Se ha demostrado que la longitud de correlación depende de la temperatura de acuerdo con (43)

$$\xi = |T - T_c|^{-\nu}, \quad (2.8)$$

donde T_C es la temperatura crítica, y ν es el exponente crítico que describe la longitud de correlación (44).

2.3. Polarización y transiciones de fase en una distribución de QDs

En QDs cuya simetría en el confinamiento produce estados base con una paridad definida, el momento dipolar es nulo, por lo que un campo externo E_{ext} no puede acoplarse y producir desdoblamiento y corrimientos en esos estados (*Efecto Stark*). La energía debida a la interacción entre el momento dipolar del punto cuántico ($\mathbf{d} = -e\mathbf{r} = -e \int \Psi x \Psi d^3x$) y el campo ' E_{ext} ' está dada por $E = -\mathbf{d} \cdot \mathbf{E}_{ext}$. Así entonces en presencia de un campo eléctrico ' \mathbf{E}_{ext} ' los dipolos son rotados por una torca alinéandose éstos al campo eléctrico aplicado ^{IV}, cuando los dipolos no son independientes entre sí, la torca sobre éstos se debe a los campos eléctrico externo y molecular.

2.3.1. Polarización

Partiendo del hecho de considerar que la distribución de puntos cuánticos de nuestro estudio se encuentra en equilibrio con un baño térmico a una cierta temperatura T , se analiza el comportamiento de este ensamble al variar la temperatura del entorno. Físicamente se esperaría que si la temperatura es relativamente alta los dipolos de la distribución estén orientados al azar, mientras que, a bajas temperaturas los dipolos se orienten paralelamente al campo aplicado E_{ext} . Por tanto la polarización tiene un valor controlable modificando T y E_{ext} . Por definición la polarización es el momento dipolar promedio por unidad de volumen

$$P = \frac{N}{A} \langle \mathbf{d} \rangle = n \langle \mathbf{d} \rangle = n \frac{\sum_{i=1}^4 d_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=1}^4 e^{-\beta E_i}}, \quad (2.9)$$

donde $\langle \mathbf{d} \rangle$ es el momento dipolar promedio, E_i y d_i son la energía y el momento dipolar del i -ésimo estado, y $\beta = 1/KT$ es la energía térmica. Para materiales homogéneos e isotrópicos la polarización es

$$P = \chi E_{ext}, \quad (2.10)$$

χ denota la susceptibilidad.

2.3.2. Transición de fase Paraeléctrica - Ferroeléctrica

La interacción entre los puntos cuánticos se introduce (además de los mecanismos discutidos antes), operativamente por medio de modelos de red, específicamente aquí usaremos la

^{IV}El alineamiento de los dipolos en presencia de un campo externo no es perfecto debido a efectos térmicos.

aproximación de campo medio.

Primeramente se considera que la distribución bidimensional de puntos cuánticos independientes y con un momento dipolar intrínseco, está sumergida en un baño térmico, así el sistema puede ser descrito como un ensamble canónico en función de la temperatura. Logrando así que el análisis del espectro de los modos colectivos del sistema ferroico en función de la temperatura, sea realizado variando su temperatura hasta alcanzar la situación en la que la agitación térmica desacopla los momentos dipolares de los puntos, produciendo una transformación al estado paraeléctrico. A continuación se describen las características de estas fases.

2.3.2.1. Paraeléctricos

En el estado paraeléctrico la distribución de QDs ^V se modela mediante un conjunto de momentos dipolares permanentes independientes, los dipolos están apuntando en direcciones aleatorias y por lo tanto la polarización neta es cero. El sistema sólo está polarizado por la interacción de los dipolos con el campo E_{ext} .

2.3.2.2. Ferroeléctricos

Los ferroeléctricos moleculares son materiales cuyas propiedades eléctricas son determinadas por la llamada dinámica de dominios. Éstas son regiones macroscópicas con polarización uniforme. Los ferroeléctricos ^{VI} se caracterizan por tener una dependencia con la temperatura descrita por la bien conocida ley de Curie. Así entonces, la polarización decrece con la temperatura hasta determinada temperatura crítica T_C (temperatura de Curie) donde ocurre una transición de fase ferroeléctrica a una fase paraeléctrica.

2.3.2.3. Susceptibilidad

La transición de fase ferroeléctrico-paraeléctrico es de segundo orden, por tanto se determina la temperatura de transición analizando la susceptibilidad eléctrica en función de la temperatura ^{VII}.

^VLa energía térmica domina en esta fase.

^{VI}El campo molecular domina en esta fase.

^{VII}En materiales superconductores se mide la conductividad eléctrica para determinar la temperatura superconductor.

La susceptibilidad eléctrica es una medida de la facilidad con la que un material se polariza en respuesta a un E_{ext} . En la aproximación lineal y suponiendo que el material es homogéneo e isotrópico, de la ecuación (2.10) se tiene que la susceptibilidad es

$$\chi = \frac{\partial P}{\partial E}. \quad (2.11)$$

La Fig. 2.1 representa la susceptibilidad de la distribución de QDs interactivos bajo un E_{ext} .

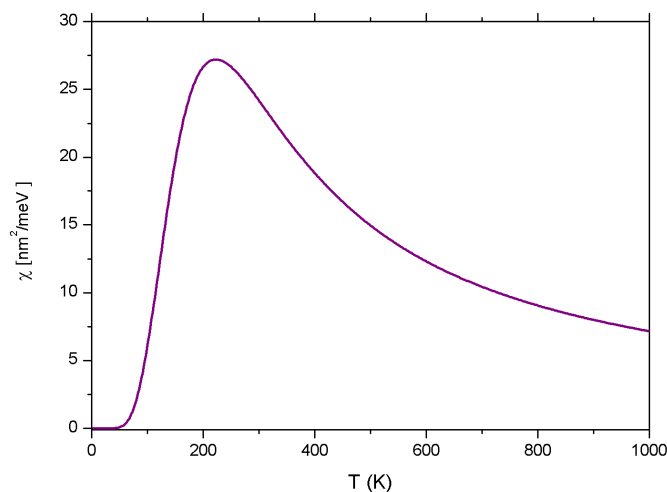


Figura 2.1: Susceptibilidad eléctrica en función de la temperatura, de la distribución de QDs de radio 15nm bajo acción de campos eléctrico $E_{mol} = 1\text{meV/nm}$ y $E_{ext} = E_{ef} = 1\text{meV/nm}$.

La curva tiene un máximo para una temperatura crítica de $T_C = 222.55^\circ K$. $\chi_{max} = 27.205 \frac{\text{nm}^2}{\text{meV}}$ describe la coexistencia de fases ferroeléctrica - paraeléctrica de la distribución, que teóricamente sigue un comportamiento asintótico para estas transiciones. Esta temperatura permitirá describir en secciones posteriores, la interacción de los QDs en la aproximación de Bragg-Williams.

2.4. Modelos de interacción

Para el tratamiento de los fenómenos ferroicos, tomamos como punto de partida el hamiltoniano de Heisenberg. En éste se considera que la dinámica es determinada por dos interacciones. La primera es la interacción de los dipolos con un campo externo, la segunda

contribución es el acoplamiento entre los dipolos a través de la interacción de correlación de intercambio. El Hamiltoniano de Heisenberg H que describe la interacción entre QDs de una distribución representados como dipolos es

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} \left[J_{ij}^x p_i^x p_j^x + J_{ij}^y p_i^y p_j^y + J_{ij}^z p_i^z p_j^z \right] - \vec{E}_{ext} \cdot \sum_i \vec{P}_i, \quad (2.12)$$

donde E_{ext} es el campo externo, y $\vec{P}_i \cdot \vec{P}_j = p_i^x p_j^x + p_i^y p_j^y + p_i^z p_j^z$. Se tiene la Hamiltoniana total que representa la suma de la interacción entre todos los dipolos, más el segundo término representa el acoplamiento de la polarización P con un E_{ext} .

Si $J_{ij} = J$, además si $J > 0$ el hamiltoniano de Heisenberg para un sistema ferroeléctrico de N dipolos, es escrito

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i,j} J \vec{P}_i \cdot \vec{P}_j - \sum_i \vec{P}_i \cdot \vec{E}_{ext}, \quad (2.13)$$

donde la polarización es $P_i = \frac{\sum_{i=4}^4 d_i e^{-\beta E_i}}{\sum_{i=4}^4 e^{-\beta E_i}}$. El momento dipolar d_i , puede apuntar en cualquier dirección, es decir, la dimensión del parámetro de orden del sistema es 3.

Obviamente, el hamiltoniano para un sistema paraeléctrico es

$$H = - \sum_{i=1}^N \vec{P}_i \cdot \vec{E}_{ext}. \quad (2.14)$$

2.4.1. Modelo de Ising

Una simplificación del modelo de Heisenberg es el famoso modelo de Ising. En éste se toma la interacción de un dipolo cualquiera de la distribución únicamente con los vecinos más cercanos. Es decir, si en la ecuación (2.13) suponemos que hay interacciones sólo entre vecinos más cercanos, y adicionalmente suponemos que la dimensionalidad del parámetro de orden es 1, tendremos el modelo de Ising

$$H = \sum_i^N \left(\sum_{j=1}^k \frac{1}{2} J \vec{P}_j z \right) \vec{P}_i z - \sum_{i=1}^N \vec{P}_i \cdot \vec{E}_{ext}, \quad (2.15)$$

donde k es el número de coordinación o de vecinos más cercanos. La solución de este modelo, aún para los casos de sistemas de dimensionalidad reducida es bastante complicada [45].

A continuación se usa el Modelo de Ising para explicar la teoría del Campo Medio, también conocida como aproximación de Weiss.

2.4.1.1. Modelo campo medio (Weiss) en QDs de un sistema ferroeléctrico

La conocida aproximación de campo medio introducida por Weiss, consiste en considerar que el potencial que siente un QD cualquiera debido a la presencia de sus vecinos es un campo constante, el mismo para todos los dipolos, resultante del promedio de las interacciones de intercambio con sus vecinos más cercanos.

Por conveniencia se define

$$E_{mol} = \sum_j^k \frac{1}{2} J P_{jz}, \quad (2.16)$$

tal que así, E_{mol} representa un campo efectivo debido a las fuerzas que actúan sobre un punto cuántico debido a los demás puntos del arreglo.

Así, el hamiltoniano de Ising de la ecuación (2.15) para el sistema de QDs se puede transformar, suponiendo un campo externo paralelo al eje z ,

$$H_W = - \sum_i^N P_{iz} E_{ext} + \sum_i^N P_{iz} E_{mol}, \quad (2.17)$$

que se reduce a

$$H_W = - \sum_i^N P_{iz} (E_{ext} + E_{mol}) = - \sum_i^N P_{iz} E_{tot}, \quad (2.18)$$

éste es el conocido hamiltoniano de Weiss, que posibilita transformar el problema de varios QDs en un problema equivalente de puntos cuánticos independientes afectados por un campo total E_{tot} , conformado por el campo molecular E_{mol} y el campo externo E_{ext} . Este enfoque permite reproducir al menos cualitativamente, la física de las transiciones de fase en un ferroeléctrico.

Por la naturaleza de la aproximación de campo medio, este procedimiento ignora las fluctuaciones, que es bien sabido que juegan un papel de gran relevancia en las transiciones de fase. Para explorar el papel de las fluctuaciones en el comportamiento colectivo de los QD, en este trabajo se utiliza la aproximación de Bragg-Williams. Aquí se hace uso de estas aproximaciones para analizar la transición dipolar orden-desorden en puntos cuánticos.

2.4.2. Aproximación de Bragg-Williams

La aproximación de Bragg Williams introduce el concepto de orden de largo alcance. La interacción entre los QD es introducida definiendo la correlación de corto alcance σ y un

parámetro de largo alcance L , ambos en términos de momentos dipolares paralelos o antiparalelos. El procedimiento cualitativo de la aproximación de Bragg-Williams incorpora fluctuaciones mediante la introducción de σ , y L de manera directa usando el formalismo de la Mecánica Estadística. El procedimiento para utilizar la aproximación de Bragg-Williams es el siguiente: Se establecen las configuraciones de dipolos y sus correspondientes energías E_i , para calcular los promedios canónicos en función de la temperatura. Se calcula el valor de las variables estadísticas hasta la detección de la transición de fase que ocurre a la temperatura T_C .

Para simplificar, se supone que la interacción entre primeros vecinos de QDs es constante (J); los pares de vecinos pueden tener las ordenaciones $(++)$, $(+-)$ y $(--)$, dependiendo si son paralelos o antiparalelos al campo, con número de configuraciones respectivas N_{++} , N_{+-} y N_{--} . Donde N_+ es el número de QDs con momento dipolar a lo largo de la dirección y , N_{++} es el número de QDs vecinos más cercanos, con momento dipolar a lo largo de la dirección y , N es el número total de QDs en el sistema, tal que $N = N_+ + N_{++}$ [45], de modo que la energía de la configuración es

$$E(p_i) = E(N_+, N_-, N_{++}, N_{+-}, N_{--}) = -P_i E_{ext}(N_+ - N_-) - \epsilon(N_{++} - N_{+-} + N_{--}), \quad (2.19)$$

donde ϵ es la energía de interacción de los dipolos. Tomando en cuenta el número de dipolos y de sus vecinos que apuntan en dirección del campo, y de los que apuntan en la dirección opuesta, se pueden escribir

$$\gamma N_+ = 2N_{++} + N_{+-}. \quad (2.20)$$

Análogamente para los dipolos que apuntan en la dirección contraria al campo

$$\gamma N_- = 2N_{--} + N_{+-}, \quad (2.21)$$

donde γ es el número de primeros vecinos. Así se tienen dos números independientes N_+ y N_{++} .

Las cantidades N_+ y N_{++} son también conocidas como parámetros de orden de largo y de corto alcance. En un intervalo $[0, 1]$, las fracciones de las poblaciones de dipolos con configuraciones paralela y antiparalela son N_+/N y $N_{++}/(N\gamma/2)$. Por tanto, en términos de las correlaciones de largo y corto alcance las fracciones se escriben como

$$\frac{N_+}{N} = \frac{1}{2}(L + 1), \quad -1 \leq L \leq 1, \quad (2.22)$$

$$\frac{N_{++}}{\frac{N\gamma}{2}} = \frac{1}{2}(\sigma + 1), \quad -1 \leq \sigma \leq 1. \quad (2.23)$$

Para ferroeléctricos, el efecto de corto alcance debido a las interacciones entre primeros vecinos se mide por el parámetro σ .

Por tanto las cantidades N_+ y N_{++} en función de σ y L , se reducen de las ecuaciones (2.4.2) y (2.23) a la forma

$$N_+ = \frac{N}{2}(L + 1) \quad (2.24)$$

$$N_{++} = \frac{N\gamma}{4}(\sigma + 1). \quad (2.25)$$

La expresión (2.19) para la energía del sistema se modifica de acuerdo con la hamiltoniana de Ising (2.15), a la expresión

$$E_{pi} = -\epsilon \sum_{ij}^N \vec{p}_i \vec{p}_j - E_{ext} \sum_i^N P_i, \quad (2.26)$$

donde E_{ext} es el campo externo, si $J > 0$ entonces el sistema tiene orden de largo alcance, es decir todos los dipolos se orientan en la misma dirección.

Los dos términos de ecuación (2.26) son expresados en función de las ecuaciones (2.20, 2.21, 2.24) y (2.25) como

$$\sum_{ij}^N \vec{p}_i \vec{p}_j = 4N_{++} - 2\gamma N_+ + \frac{\gamma N}{2} \quad (2.27)$$

$$= 4\frac{N\gamma}{4}(\sigma + 1) - 2\gamma\frac{N}{2}(L + 1) + \frac{\gamma N}{2} \quad (2.28)$$

$$= \frac{N\gamma}{2}(2\sigma - 2L + 1), \quad (2.29)$$

la anterior expresión es el término debido a la correlación, y el segundo término de la ecuación (2.26) es

$$\sum_i^N P_i = 2N_+ - N = 2\frac{N}{2}(L + 1) - N = NL, \quad (2.30)$$

donde el parámetro $L = \frac{N_+ - N_-}{N_+ + N_-}$ es la fracción de dipolos alineados con el campo y se puede interpretar como la polarización de los puntos cuánticos, o el promedio en el ensamble

relacionado con el orden de largo alcance^{VIII}.

Sustituyendo las ecuaciones (2.29), (2.30), la ecuación (2.26) resulta en una energía por dipolo

$$\frac{E(L, \sigma)}{N} = -\frac{\epsilon\gamma}{2}(2\sigma - 2L + 1) - E_{ext}L, \quad (2.31)$$

donde la correlación de dipolos ocurre si $N_{++}/(\frac{N\gamma}{2}) = \frac{N\gamma}{4} \frac{2(\sigma+1)}{N\gamma}$, que se puede interpretar observando que la probabilidad $|P(+, +)|$ de encontrar un par de primeros vecinos inter-actantes es igual a la probabilidad de un sistema no correlacionado $|P(N_{++})|^2$, al igualar estas dos probabilidades se hace la hipótesis que lo cercano es igual a lo lejano, entonces esto implica que no hay distinción entre largo y corto alcance, asociados respectivamente con el campo externo E_{ext} y con la interacción J , esto es, $\frac{N_{++}}{\frac{N\gamma}{2}} \approx (\frac{N_+}{N})^2$, donde $\frac{N_{++}}{\frac{N\gamma}{2}} \approx \frac{N^2}{4} \frac{(L+1)^2}{N^2}$, esto implica $\frac{\sigma+1}{2} = \frac{(L+1)^2}{4}$, lo cual lleva a una relación entre la correlación de largo y corto alcance $\sigma = \frac{L^2}{2} + L - \frac{1}{2}$.

De esta manera la hamiltoniana (2.31) puede ser escrita solo en términos de la correlación de largo alcance, en la forma conocida como aproximación de Bragg-Williams

$$\frac{E_{BW}(L, \sigma)}{N} = -\frac{\epsilon\gamma}{2}(2\sigma - 2L + 1) - E_{ext}L. \quad (2.32)$$

Si se incorpora la hipótesis de escalamiento ξ de la ecuación (2.8), tenemos una dependencia implícita de la temperatura para la ecuación (2.32) mediante la expresión

$$\frac{E_{BW}(L)}{N} \approx -\frac{\epsilon\gamma\xi^2}{2} - E_{ext}L, \quad (2.33)$$

donde $\epsilon = -2J$. Físicamente L es la polarización por QD debido a la interacción con E_{ext} . Si L es cero los dipolos del sistema están desacoplados, si $L > 0$ el sistema muestra una respuesta ferroeléctrica.

Por tanto, la energía de interacción y consecuentemente los tiempos de relajación de los modos ferroeléctricos colectivos en la distribución bidimensional de la distribución de QDs, pueden ser afectados por cambios en la densidad superficial de QDs (N). En resumen, el orden de largo alcance significa que la correlación no es cero cuando la longitud de la correlación se aproxima al infinito.

2.4.2.1. Longitud de correlación ξ

La ecuación (2.8), representa la longitud de correlación en la distribución de QDs. A diferencia de la aproximación de Weiss, en la aproximación de Bragg-Williams las correlaciones

^{VIII}Si tenemos interacciones de largo alcance, esto significa que los dipolos interactúan con el campo sea cual sea su ubicación en la red.

de largo alcance y las fluctuaciones son importantes, de manera que la interacción entre QDs se debe a la correlación de largo alcance (ver Fig. 2.2).

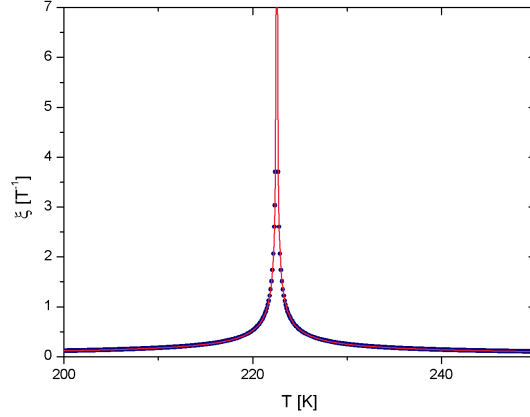


Figura 2.2: Correlación en función de la temperatura de puntos cuánticos cónicos con radio 15nm bajo acción de campos eléctrico $E_{mol} = 1$ meV/nm y $E_{ext} = 1$ meV/nm, $T_C = 222.55$ K.

2.5. Resultados

2.5.1. Función dieléctrica

Brevemente describimos el procedimiento por el cual calculamos la respuesta colectiva dipolar de una distribución 2D de QDs. Suponemos que las transiciones entre los estados cuánticos de la distribución son causadas por la interacción de los momentos dipolares con el campo eléctrico producido por un haz de electrones que viaja paralelo a la distribución. En estas condiciones, se ha demostrado que la función dieléctrica de la distribución se escribe como [46]

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi i}{\hbar} \sum_j |\langle \psi_j | x | \psi_0 \rangle|^2 \left[\frac{1}{\omega + i\gamma - w_j} + \frac{1}{\omega + i\gamma + w_j} \right], \quad (2.34)$$

donde $\langle \psi_j | x | \psi_0 \rangle$ es un elemento de la matriz de la transición entre el estado base y el j -ésimo estado de la distribución, $\hbar\omega$ es la energía de los electrones del haz incidente, γ es el coeficiente de amortiguamiento y w_j es la frecuencia de resonancia. Con el fin de obtener algunas ideas sobre los procesos de excitación y relajación en la distribución, analizamos el comportamiento de las partes real e imaginaria de $\epsilon(\omega)$ de la función dieléctrica.

En los materiales semiconductores, el mecanismo disipativo más importante que lleva a un intercambio de energía entre el sistema electrónico de los puntos cuánticos y las vibraciones de la red, es la interacción electrón-fonón longitudinal óptico. Las características de los fonones longitudinales en el sistema de QDs determinan fuertemente el tiempo de decaimiento de los estados cuánticos electrónicos.

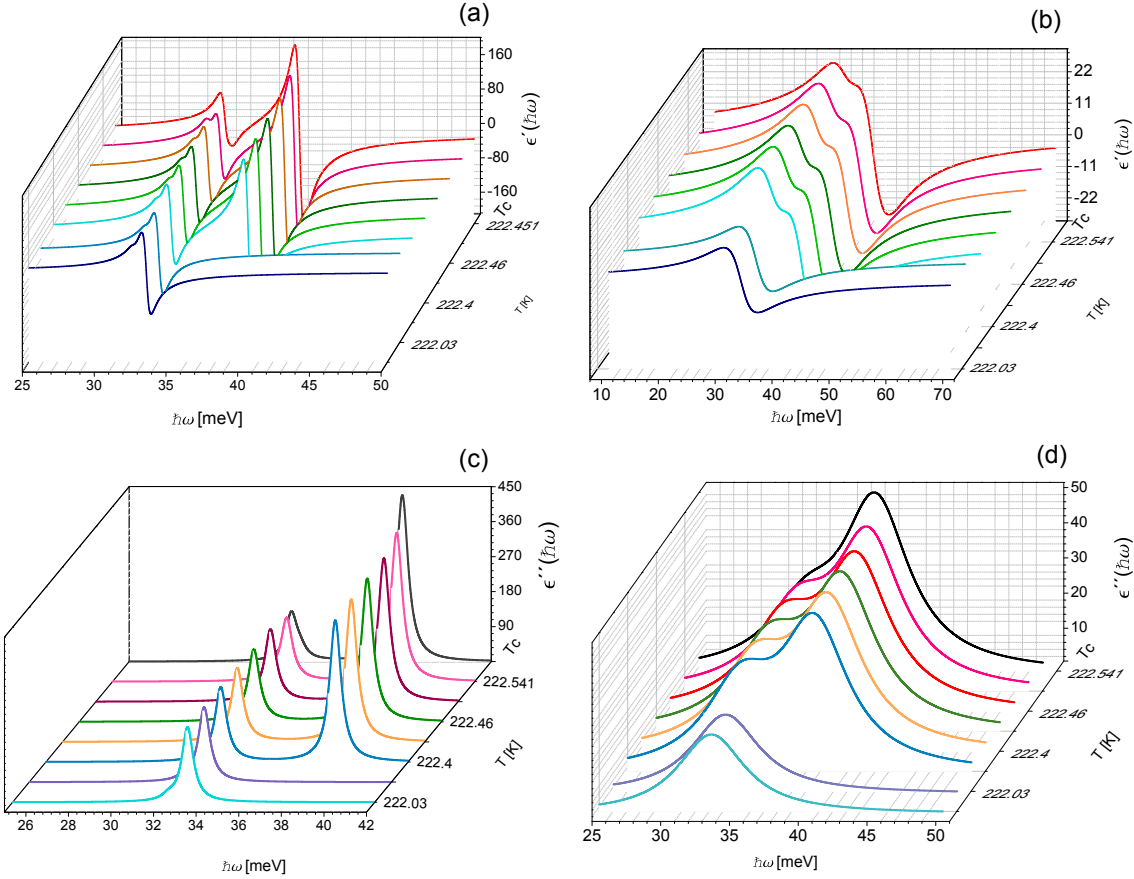


Figura 2.3: El comportamiento real (a)-(b), y (c)-(d) parte imaginaria de la función dieléctrica en función de la frecuencia, para una distribución de QD cónicos en la aproximación de Bragg-Williams. Esta aproximación predice tres bandas de resonancia diferentes, aunque los anchos dependen del parámetro de amortiguamiento γ . (a) - (c) $\gamma = 500 \text{ ns}^{-1}$, (b) - (d) $\gamma = 4500 \text{ ns}^{-1}$.

Los electrones pueden decaer a través de la emisión de fonones ópticos longitudinales (LO). Las características de los fonones LO en el sistema de QDs determinan el tiempo de decaimiento de los estados cuánticos electrónicos. Las características de los mecanismos de

amortiguamiento de este tipo se consideran fenomenológicamente en el parámetro γ . Con el fin de obtener algunas ideas sobre los procesos de excitación y relajación en la distribución, analizamos el comportamiento de las partes real e imaginaria de $\epsilon(\omega)$.

La Fig. 2.3 muestra las partes real e imaginaria de la función dieléctrica en función de la pérdida de energía de los electrones del haz para varios valores de la temperatura T . La función de respuesta dieléctrica en la aproximación de Bragg-Williams muestra únicamente un pico, implicando esto que las fluctuaciones térmicas promedian e impiden potenciales provenientes de deformaciones estáticas.

Observe la diferencia en el número de picos, para diferentes valores de los tiempos de vida de los estados cuánticos de los puntos cuánticos individuales descritos por el inverso del parámetro de amortiguamiento γ . En el intervalo de frecuencias y temperaturas mostradas, se observa claramente que para $\gamma = 500 \text{ ns}^{-1}$, el tiempo de vida es relativamente grande, el comportamiento de las partes real e imaginaria de la función dieléctrica proporciona más información de los procesos de excitación y relajación en la distribución. Al analizar varios detalles en la función dieléctrica, o más precisamente, en una función definida a partir de la función dieléctrica, es posible explorar la influencia de las características de la distribución de QDs en el tiempo de decaimiento de los estados colectivos. En esta línea, a continuación se describe una función de pérdida de energía que depende implícitamente de la función dieléctrica.

2.5.2. Función de pérdida de energía

Una de las técnicas espectroscópicas utilizadas para estudiar excitaciones tanto individuales como colectivas y su dependencia de la frecuencia del haz incidente ω , se basa en la dispersión inelástica de electrones (EELS, *espectroscopía electrónica de pérdida de energía*). La técnica EELS, dicho brevemente, describe la dispersión inelástica del haz ocasionada por las excitaciones elementales del sistema, provocando un cambio en la energía cinética del electrón del haz. El análisis de la pérdida de energía y transferencia de momento del electrón dispersado, proporciona información del espectro de las excitaciones elementales. Esta técnica también brinda información estructural del sistema [47-50].

Para investigar los estados cuánticos colectivos de la distribución, se simularon experimentos de dispersión de electrones en la modalidad EELS [51]. Para hacer esto, consideramos un haz de electrones con energía $E_l = 100 \text{ keV}$, viajando paralelamente al plano que contiene

una distribución de QDs cónicos no centro-simétricos, y calculamos la función de pérdida de energía $F(\hbar\omega)$, es decir, la probabilidad por unidad de longitud, por unidad de intervalo de energía y por unidad de tiempo de la dispersión con pérdida de energía $\hbar\omega$. Para una distribución 2D de QD, esta función es [51](#)

$$F(\hbar\omega) = \frac{1}{a_0 E_l} \frac{1}{\pi} K_0\left(\frac{2z_0 \hbar\omega}{v_l \hbar}\right) \text{Im}\left[\frac{\epsilon_M(w) - 1}{\epsilon_M(w) + 1}\right], \quad (2.35)$$

donde K_0 es la función de Bessel de orden cero, a_0 el radio de Bohr, E_l y v_l son la energía y la velocidad de los electrones, respectivamente, y $z_0 = 1$ nm es el parámetro de impacto.

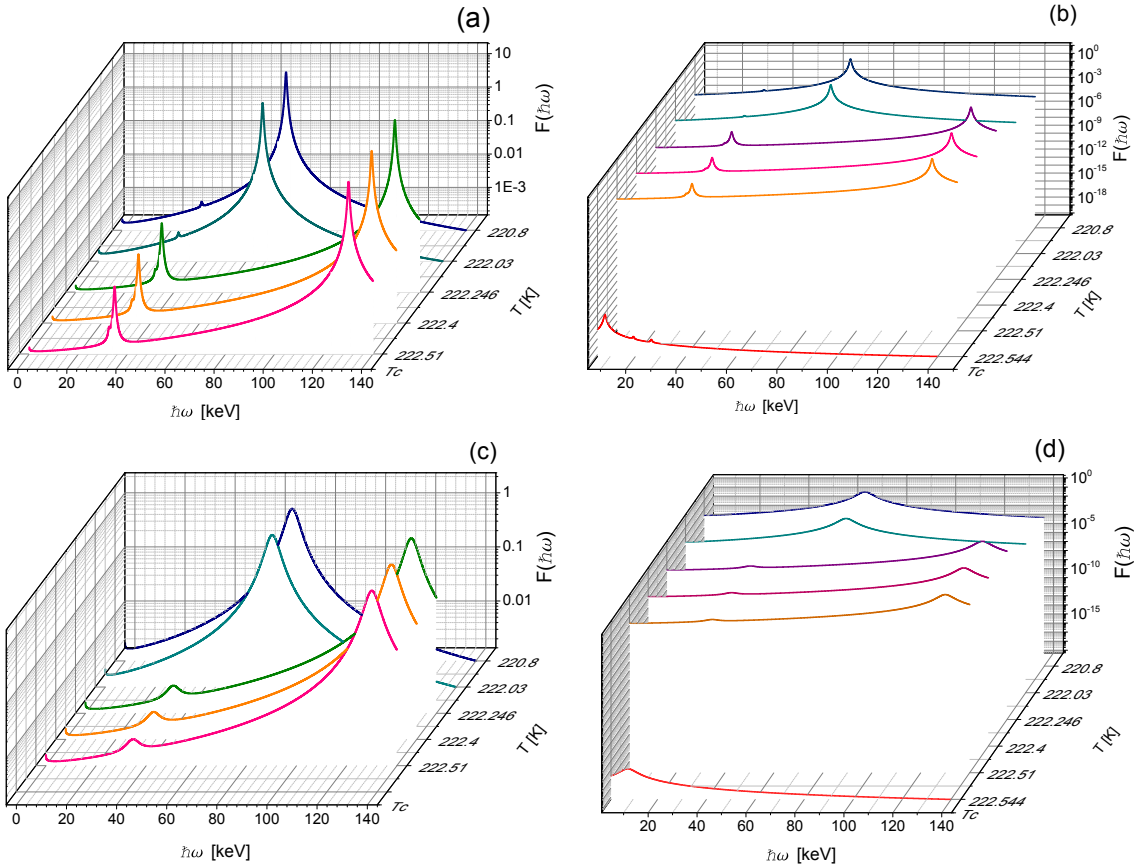


Figura 2.4: Función de pérdida de energía de una distribución de QDs cónicos con un radio de 15 nm, en la aproximación de Bragg-Williams. (a) - (b) $\gamma = 500 \text{ ns}^{-1}$, (c) - (d) $\gamma = 4500 \text{ ns}^{-1}$. b) y d) incluyen la función de pérdida para temperaturas cercanas a T_C . Observe las diferentes escalas.

Representativamente $F(\hbar\omega)$ es una distribución de probabilidad, su comportamiento en función de la pérdida de energía es muy significativo y permitirá calcular los tiempos de relajación de los estados cuánticos de la distribución. $F(\hbar\omega)$ tiene una relación inversa con el tiempo promedio de relajación (τ) de estos estados colectivos. Concretamente, el ancho a altura media (FWHM, *el ancho completo a altura media*) de la distribución de probabilidad, es inversamente proporcional al tiempo de relajación τ .

La función de pérdida muestra picos de resonancia para ciertos valores de pérdida de energía, resultantes del acoplamiento del campo creado por el haz de electrones con los momentos dipolares de la distribución, en valores de energía donde los modos cuánticos colectivos de los QD son excitados.

En la Fig. 2.4 el comportamiento de $F(\hbar\omega)$ se muestra en función de la pérdida de energía de los electrones del haz, y para dos valores de la constante de amortiguamiento γ , como se muestra en la expresión (2.35). Hemos utilizado la aproximación de Bragg-Williams para calcular los detalles de los procesos de dispersión como se describió anteriormente. Aquí, el comportamiento de $F(\hbar\omega)$ nuevamente exhibe una estructura mejor definida y una mayor probabilidad de pérdida para el valor $\gamma = 500$. A medida que la temperatura aumenta, la correlación también lo hace y se requiere mayor energía para mostrar una resonancia, de manera que el haz pierde más energía, y el pico principal se muestra desplazado hacia el azul. Cerca de $T_C = 222.55^\circ$ K (en nuestro caso), los dipolos están tan fuertemente correlacionados que no hay energía de intercambio con el haz de electrones, por lo que la probabilidad de pérdida disminuye, ver Figs. 2.4 (b) y (d). La interpretación de la posición de las bandas de pérdida de energía es completamente consistente con la de las partes real e imaginaria de la función dieléctrica, en el sentido de que la magnitud de los tiempos de relajación de los estados cuánticos de puntos cuánticos individuales, determina de una manera compleja los procesos de relajación y excitación de los estados cuánticos colectivos. La estructura de las partes real e imaginaria de la función dieléctrica y la estructura exhibida por la función de pérdida de energía, reflejan el acoplamiento entre los QDs. El sistema genera estados colectivos cuyos tiempos de relajación dependen consistentemente de los parámetros de la distribución, pero también de los parámetros del campo medio, además al extender esta aproximación para incluir fluctuaciones mediante la aproximación de Bragg-Williams, la estructura de $\epsilon(\omega)$ y $F(\hbar\omega)$ también es afectada. Por lo tanto, examinando el efecto de las características del sistema y de los fonones, sobre el parámetro de amortiguamiento de los estados cuánticos de un QD, por el procedimiento aquí propuesto, se encuentran ten-

dencias generales y características del tiempo de relajación de estados ferroeléctricos de la distribución.

2.5.3. Tiempo de relajación de estados

Para valores pequeños de γ , los estados cuánticos excitados por el haz de electrones tendrán tiempos de vida más grandes. Por lo tanto, los estados colectivos excitados también permanecerán más tiempo. Esto es observado en los picos más nítidos en la función de pérdida, como muestra la Fig. 2.4. En el caso de γ relativamente grande, se produce un ensanchamiento en las curvas $F(\hbar\omega)$, de tal manera que el tiempo de relajación de los estados cuánticos para cualquier energía se ve afectado. Vale la pena mencionar las diferencias con la aproximación del campo medio (Weiss). Para empezar, los tiempos de relajación no dependen de la temperatura en esta aproximación, y muestran un comportamiento de ley de potencia con γ , como muestra la Fig. 2.5, donde el exponente tiene el valor cercano a 1. El tiempo de relajación τ es más grande para QDs con radios pequeños como muestran de manera clara los valores numéricos en la tabla (2.1), graficados en la Fig. 2.5.

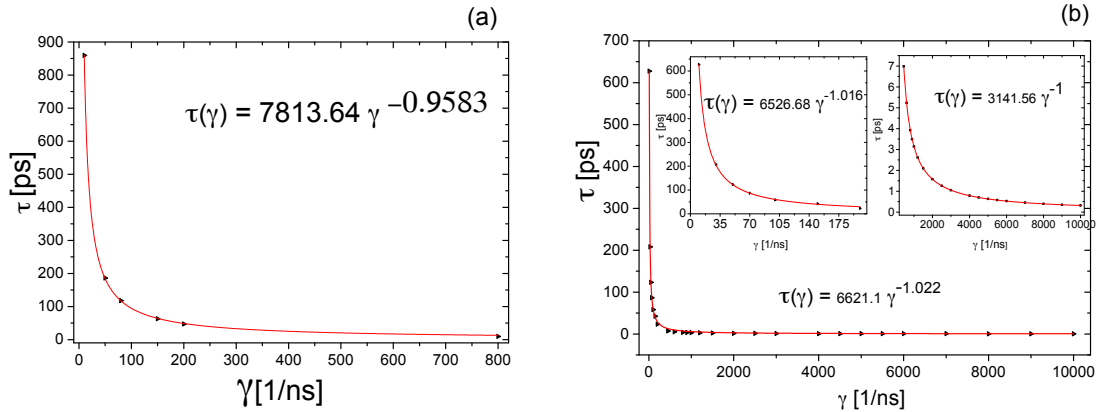


Figura 2.5: Aproximación de Weiss. Tiempos de relajación para diferentes valores de γ de una distribución de QD cónicos con radio (a) 4 nm y (b) 15 nm. Los recuadros b) muestran diferentes rangos de γ .

La Fig. 2.6 muestra en escala logarítmica los tiempos de relajación de la distribución de QDs, donde $\log_{10}\tau = 2.88 - \log_{10}\gamma$ que se reduce a $\gamma\tau = 10^{2.88}$, así $\tau = \frac{10^{2.88}}{\gamma}$.

Cuadro 2.1: Valores numéricos de los tiempos de relajación de QDs interactivos en la aproximación de Weiss.. Radios: Izq. 15 nm. Der. 4nm.

γ	τ	γ	τ
1 / ns	$\times 10^{-3}$ ns	1 / ns	$\times 10^{-3}$ ns
10	627.45	10	859.70
50	123.21	150	62.69
1000	3.14	200	46.93
2500	1.25	800	9.59
4000	0.78		
5500	0.57		
7000	0.44		
10000	0.31		

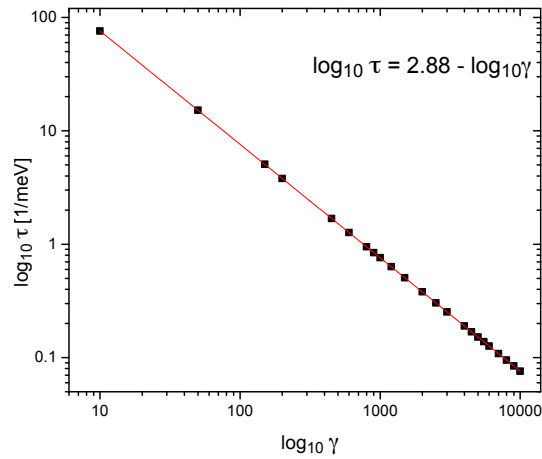


Figura 2.6: Tiempo de relajación para diferentes valores de γ de una distribución de puntos cuánticos cónicos de radio 15nm. Aproximación Weiss.

Por el contrario, los resultados obtenidos para el tiempo de relajación usando la aproximación de Bragg-Williams, muestran una dependencia con la temperatura como se puede observar en la Fig. 2.7. Notamos dos regímenes en el comportamiento del tiempo de relajación: a temperaturas muy por debajo de T_C , se observa una dependencia compleja para valores de γ . A medida que nos acercamos a T_C , aparece una disminución de la ley de potencia cuyo exponente depende de la temperatura, como se observa en la Fig. 2.7(b). El comportamiento en la Fig. 2.7 indica que para temperaturas relativamente más altas, un

número creciente de estados colectivos participan, consecuentemente la respuesta dipolar de la distribución muestra un cambio brusco en la respuesta multipolar dentro de la aproximación de Bragg-Williams. Observe que en ambas aproximaciones los tiempos de relajación son del orden de los picosegundos.

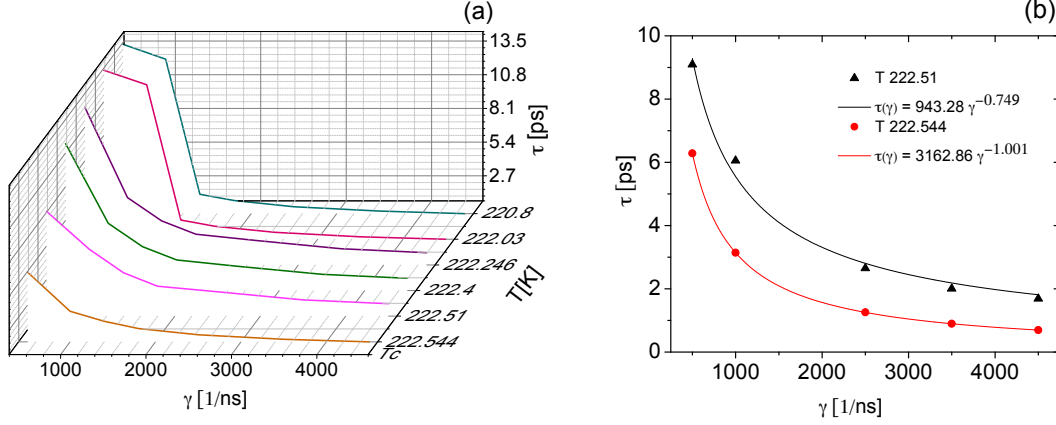


Figura 2.7: Aproximación de Bragg-Williams. Una distribución de QDs cónicos con un radio de 15 nm, tiempos de relajación a) para diferentes valores de γ y temperatura, b) dos valores de temperatura muestran dependencia de ley de potencia diferente.

Un incremento del ancho de la función de pérdida de energía ocurre cuando γ aumenta. La respuesta dipolar para valores de γ pequeños se caracteriza por un cambio de régimen reflejado claramente en la distribución. Su localización está en una región de baja energía, que puede ser atribuida a la excitación de modos individuales independientes no resonantes. Cuando γ aumenta, el sistema tiene transiciones más rápidas entre sus estados, y los dipolos asociados a las transiciones tienen tiempos de transición lentos entre sus estados, por lo que estos dipolos tienen una interacción débil, y las resonancias se superponen.

2.6. Conclusiones

En este capítulo, hemos estudiado los tiempos de relajación de los estados colectivos de una distribución bidimensional de QD cónicos. Los experimentos de *EELS* son simulados numéricamente en condiciones cercanas a la temperatura de transición ferroeléctrico-paraeléctrico. La función de energía de pérdida se calculó dentro de las aproximaciones de Weiss y Bragg-Williams. Encontramos que la respuesta dipolar es muy sensible a la temperatura, las

correlaciones y el tamaño del punto. Los tiempos de relajación dentro de la aproximación de Weiss, no dependen de la temperatura y siguen una dependencia de una ley de potencia del parámetro de amortiguamiento de los estados cuánticos de puntos cuánticos individuales γ , con un exponente de casi 1, que depende del tamaño del punto. Por el contrario, el enfoque de Bragg-Williams muestra la existencia de dos regímenes en el comportamiento del tiempo de relajación en función de la temperatura. Lejos de la transición de fase, se observa un comportamiento complejo de τ , mientras que cerca de T_C , una ley de potencia describe bien el comportamiento de τ , observándose con exponentes alrededor de 1. Como se esperaba, en la aproximación de Weiss, una ley de escalamiento constante describe bien el comportamiento de el tiempo de relajación en función de la temperatura, $\tau(T) \approx \tau^{-1}$. En la aproximación de Bragg-Williams, dos leyes de potencia bien diferenciadas describen el comportamiento de los tiempos de relajación colectiva a diferentes intervalos de temperatura. La solidez de nuestros cálculos, basada en las aproximaciones de Weiss y Bragg-Williams, indica que este procedimiento simple podría ser una herramienta útil para diseñar a conveniencia una distribución de QDs, controlando en cierta medida el tiempo de relajación de los estados colectivos de la distribución.

Capítulo 3

Anillos cuánticos: relajación de estados colectivos

Recientes estudios sobre las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de los anillos cuánticos semiconductores (QRs), han atraído poderosamente la atención de investigadores, tanto experimentales como teóricos, considerándolos elementos estructurales de gran importancia para crear nuevos materiales nanoestructurados [52,53].

Los anillos cuánticos autoensamblados, son un tipo de estructura con confinamiento de electrones en las tres direcciones del espacio (similares a los puntos cuánticos), que presentan propiedades muy particulares debido a su geometría, exhibiendo una gran variedad de fenómenos y propiedades de gran relevancia tanto desde el punto de vista de la ciencia básica como aplicada, como el efecto Aharonov-Bohm, hasta aplicaciones actuales en física tal como computación cuántica, metamateriales con el índice de refracción negativo, magnetismo artificial, etc [53-56]. Sus propiedades hacen que éstos constituyan escenarios magníficos para observar varios fenómenos cuánticos, pues estas estructuras presentan una topología que es no simplemente conexa, y su desarrollo actual en la tecnología permite conseguir un alto confinamiento de portadores de carga. Axel Lorke y sus colaboradores, han mostrado que el número de electrones confinados en estas estructuras puede ser controlado con alta precisión [5].

Las estructuras de QRs son preparadas por técnicas como: Litografía óptica, litografía de haz de electrones ó crecimiento autoensamblado (Stranski-Kastranov) [57]. Experimentalmente se crecen a partir del recubrimiento parcial de puntos cuánticos, y posterior tratamiento

térmico *annealing* de QDs. Requiriendo para su correcta formación evolucionar a partir de QDs de altura h mayor o igual que 8 nm ($h \geq 8$ nm).

Las distintas propiedades de los anillos cuánticos nanométricos se pueden sintonizar por medio del control de su tamaño y forma [58]. Incluso es posible dotarles de propiedades magnéticas, de un modo similar que un solenoide nanométrico de cobre presentaría propiedades magnéticas [59]. Una propiedad observada en estos sistemas son las corrientes. Cuando es inducida la corriente eléctrica en un circuito resistivo, esta decaerá rápidamente en ausencia de un campo aplicado. Este decaimiento refleja la tendencia de los electrones en el circuito a disipar su energía y relajarse a su estado base. Sin embargo, la mecánica cuántica predice que el estado base de los electrones a temperatura finita puede contener una corriente persistente, que fluye a través del circuito resistivo sin disipar energía o alterarse. Consecuentemente, esta corriente induce un momento magnético μ . En presencia de un campo magnético externo \mathbf{B} , la energía debida a la interacción entre el momento magnético con \mathbf{B} , es $\mathbf{E} = \mu \cdot \mathbf{B}$.

El acoplamiento coherente en la formación de estados colectivos en una distribución de nanoestructuras toroidales [60], proporciona muchas más oportunidades para manipular y reconfigurar las funciones de onda de los electrones confinados en un QR individual [59]. Tal acoplamiento entre estados cuánticos electrónicos entre los anillos, se puede ajustar por medio de la distancia entre los anillos. Otra posibilidad para controlar dinámicamente el acoplamiento coherente entre anillos, es la aplicación de campos magnéticos externos.

En este trabajo, con la misma idea y siguiendo un procedimiento análogo al del capítulo anterior, es una base para un futuro estudio de los tiempos de relajación de arreglos bidimensionales de anillos cuánticos. Introducimos también aquí la interacción entre anillos cuánticos por medio de una aproximación de campo medio.

3.1. Partícula libre moviéndose en un anillo de ancho infinitesimal

Antes de investigar las propiedades de sistemas realistas, comenzaremos analizando un problema simplificado que admite una solución analítica. El estado de una partícula libre moviéndose en un anillo es descrito por un paquete de ondas que pertenece a un conjunto

¹En realidad, esta geometría es una idealización de los anillos crecidos o fabricados, pues a menudo ocurren imperfecciones en las estructuras.

de funciones continuas definidas por el ángulo φ , donde

$$\Psi(\varphi, t) = \sum_n g(n) \psi_n(\varphi, t), \quad (3.1)$$

$$\psi_n(\varphi, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi}. \quad (3.2)$$

La función de onda evoluciona como

$$\psi_n(\varphi, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \psi_n(\varphi, 0), \quad (3.3)$$

$$E = (\hbar n)^2 / 2I, \quad (3.4)$$

donde I es el momento de inercia del electrón. La probabilidad de encontrar el sistema en un ángulo $d\varphi$ en el tiempo t es: $|\Psi(\varphi, t)|^2 d\varphi$. Por lo tanto $|\Psi(\varphi, t)|^2$ es la densidad de probabilidad de una partícula libre moviéndose en un anillo unidimensional.

En la descripción clásica, el estado de la partícula en este sistema se define por el ángulo φ y su momento angular l . En la mecánica cuántica, el estado del sistema está definido por una función $\Psi(\varphi)$ en función de φ . Por ejemplo, un sistema con un momento angular l está descrito como

$$\Psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i2\varphi} : n = 2, \quad l = 2\hbar. \quad (3.5)$$

Un sistema con un momento angular l , de valor en el intervalo $l = +1$ y $l = -1$, es

$$\Psi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (\psi_1(\varphi) + \psi_{-1}(\varphi)). \quad (3.6)$$

3.2. Campo magnético perpendicular a un anillo cuántico

Ahora analizamos los espectros de energía de electrones confinados en un anillo cuántico semiconductor de InAs, embebido en una matriz de GaAs. El problema físico se puede modelar de manera tridimensional. Para esto, se resuelve la hamiltoniana de una banda efectiva resuelta en la aproximación de masa efectiva. Los estados electrónicos se obtienen numéricamente resolviendo la ecuación de Schrödinger, bajo las condiciones de contorno periódicas de la función de onda. La solución numérica se discretiza con el método tetraédrico de elemento finito mediante el paquete de *software COMSOL Multiphysics*.

Teóricamente, consideramos los estados de energía de electrones confinados en los QR sintonizando el valor de: Campos magnéticos externos aplicados, o de los radios, alturas y geometría del nanoanillo. Esta investigación numérica es importante para entender los fenómenos magneto-ópticos y las respuestas ópticas cuánticas de un QR, para que enseguida podamos abordar el estudio de las propiedades del autoensamblaje bidimensional.

Un electrón desplazándose por un semiconductor bajo la acción de un campo magnético, se verá afectado en su momento orbital y su espín. Al aplicar un campo magnético perpendicular a un anillo cuántico, la energía de acoplamiento es el conocido hamiltoniano de Zeeman

$$E = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = g_0 \mu_B B \quad (3.7)$$

donde g_0 es el factor giromagnético, $\mu_B = 5.79 \times 10^{-5}$ eV/T es el magnetón de Bohr. En el caso de un electrón confinado en un semiconductor, el factor giromagnético se sustituye por un factor g efectivo dependiente de la estructura electrónica. La acción del campo magnético sobre el momento orbital del electrón, resulta en el desplazamiento diamagnético de la energía E .

El hamiltoniano que describe el comportamiento de un electrón confinado en un potencial $V_e(r)$ es

$$H = \frac{1}{2m^*(r)} \left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + V_e(r), \quad (3.8)$$

donde \mathbf{A} es el potencial vector asociado al campo magnético aplicado \mathbf{B} , tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, m^* es la masa efectiva y \mathbf{p} el momento del electrón.

Para electrones confinados en el anillo, la función de onda envolvente Ψ debería satisfacer la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo

$$H\Psi = E\Psi, \quad (3.9)$$

Para calcular estados de energía electrónicos confinados en un anillo cuántico tridimensional de InAs/GaAs con un potencial de confinamiento de paredes finitas $V_e(r)$, adoptamos el Hamiltoniano de una banda

$$H = \Pi \frac{1}{2m^*} \Pi + V_e(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z, \quad (3.10)$$

donde $\Pi = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}$ es el operador momento del electrón, $V_e(r)$ es el potencial de confinamiento del electrón, y la interacción del momento-campo magnético es $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} =$

$\frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_z$, donde μ_B es el magnetón de Bohr. El potencial de confinamiento de paredes finitas se puede presentar como: $V(r) = 0$, si r está dentro del anillo, y $V(r) = V_0$, si r está fuera del anillo (V_0 es la barrera de potencial entre la heteroestructura InAs/GaAs). Por tanto, la hamiltoniana de la ecuación (3.10) se escribe

$$H = \nabla \cdot \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla + \frac{e^2 B^2}{8m^*} (x^2 + y^2) - \frac{i\hbar e B}{4m^*} (-y, x, 0) \cdot \nabla + V(r) + \frac{1}{2}g\mu_B \sigma_z B \quad (3.11)$$

Los estados electrónicos en las QR en presencia de \mathbf{B} , se pueden describir utilizando un modelo simple de un alambre, doblado en un círculo de radio R . Cuando un flujo magnético $\phi = \pi R^2 B$ se localiza en el interior del QR, se genera una fase adicional en el electrón en su camino alrededor del QR, lo que lleva a que los niveles energéticos permitidos vienen dados por la expresión

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2m^* R^2} \left(l + \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2 \quad (3.12)$$

con ϕ_0 el cuanto de flujo, y $l = 0, \pm 1, \pm 2$ presenta la degeneración debido a las posibles proyecciones del momento magnético en la dirección del campo aplicado ($L_z = \hbar l$). Por lo tanto, al aumentar el campo magnético B , el estado base cambiará del momento angular $l = 0$ a uno con un valor l negativo más alto relacionado con las corrientes persistentes en los anillos mesoscópicos. Además, se producirá una oscilación periódica de tipo Aharonov-Bohm en la energía del estado base. El momento angular total es $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times (-i\hbar \nabla)$ que está cuantificado y sus eigenvalores son descritos por el número cuántico l . Para cada estado a $T = 0$ K, la magnetización M se define por

$$M = -\frac{\partial E}{\partial B}. \quad (3.13)$$

Y el operador de magnetización es

$$M = i \frac{\hbar}{4m^*} (z \nabla_x - x \nabla_z) - \frac{1}{2} \frac{e^2 B^2}{8m^*} (x^2 + y^2) + \mu g \sigma_z. \quad (3.14)$$

El comportamiento de la magnetización en función de la temperatura en un sistema con el número de electrones fijo, se puede describir con el ensamble canónico. La magnetización y la susceptibilidad dependientes de la temperatura se escriben

$$M = \sum_n \frac{\partial E}{\partial B} \frac{e^{-\frac{E_n}{kT}}}{\sum_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}, \quad (3.15)$$

$$\chi(B, T) = \frac{\partial}{\partial B} M(B, T). \quad (3.16)$$

3.3. Resultados

3.3.1. Anillo cuántico bidimensional

Para calcular los estados electrónicos propios del sistema de InAs/GaAs, utilizamos la aproximación de una banda electrónica efectiva. La Hamiltoniana del electrón confinado en el modelo bidimensional es

$$H = \frac{1}{2m^*(r)} \left(p - \frac{eA}{c} \right)^2 + V_e(r), \quad (3.17)$$

donde la masa efectiva $m^*(r)$ es

$$m^*(r) = \begin{cases} m_1, & R_{int}^2 \leq x^2 + y^2 \leq R_{ext}^2, |z| \leq h, \\ m_2, & \text{otra.} \end{cases}$$

El sistema es un disco anular de radios interno R_{int} y externo R_{ext} , de espesor h . El potencial de confinamiento de los QRs es expresado

$$V_e(r) = \begin{cases} 0, & R_{int}^2 \leq x^2 + y^2 \leq R_{ext}^2, |z| \leq h, \\ E_c = 513.41 \text{ meV}, & \text{afuera.} \end{cases}$$

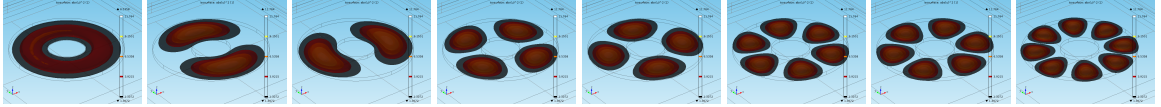


Figura 3.1: Primeros estados confinados para un anillo cuántico bidimensional.

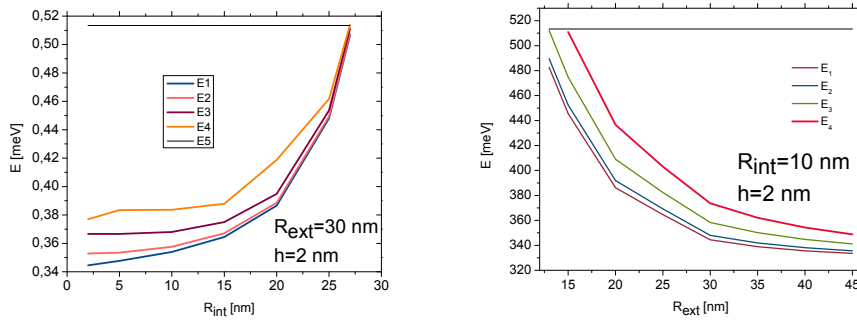


Figura 3.2: Izq. Estados confinados del anillo cuántico con radio externo 30 nm fijo, y para distintos radios internos. Der. Estados confinados para distintos radios externos y radio interno fijo 10 nm.

Los primeros estados confinados en el QR se muestran en la Fig. 3.1. En la Fig. 3.2, consideramos al electrón confinado en un toroides con sección transversal rectangular (con simetría cilíndrica en el plano $x - y$).

3.3.2. Anillo cuántico tridimensional

Para simular la respuesta de un anillo cuántico en un sustrato *InAs/GaAs* tomamos parámetros realistas, para el material del anillo de *InAs* la masa efectiva es $m^* = 0.024m_e$ y el potencial $V = 0$. Los parámetros para el sustrato *GaAs* son $m^* = 0.067m_e$ y $V = 0.77$ eV. Se considera la condición de frontera periódicas en la frontera de la caja de simulación.

La hamiltoniana del electrón confinado en este sistema en una banda es

$$H = \frac{1}{2m^*(r)}\hat{p}^2 + V(r), \quad (3.18)$$

si $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, la hamiltoniana se modifica para tener en consideración la dependencia espacial de la masa efectiva

$$H = -\frac{\hbar^2}{2}\nabla \cdot \frac{1}{m^*(r)}\nabla + V(r). \quad (3.19)$$

Por tanto, la hamiltoniana del electrón en un QR en presencia de un \mathbf{B} perpendicular es

$$H = \Pi\frac{1}{2m^*}\Pi + V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_z, \quad (3.20)$$

con $\Pi = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}$. El tercer término representa la interacción del momento angular con \mathbf{B} .

Bajo las condiciones antes señaladas, la hamiltoniana del electrón confinado se convierte en

$$H = \nabla \cdot \frac{-\hbar^2}{2m^*}\nabla + \frac{e^2 B^2}{8m^*}(x^2 + y^2) - \frac{i\hbar e B}{4m^*}(-y, x, 0) \cdot \nabla + V(r) + \frac{1}{2}g\mu_B \sigma_z B \quad (3.21)$$

Identificando las contribuciones diamagnética y paramagnética la hamiltoniana se transforma en

$$H = \nabla \cdot \frac{-\hbar^2}{2m^*}\nabla + H_{diamagnetico} + H_{paramagnetico} + V(r) + \frac{1}{2}g\mu_B \sigma_z B. \quad (3.22)$$

El efecto AB es una consecuencia física del electrón confinado en el QR que encierra un campo magnético, además el material de los QRs debe ser de alta calidad para evitar procesos de dispersión *scattering* inelástica que produzcan variaciones aleatorias en los estados electrónicos y pérdida de la coherencia de fase cuántica. La Fig. 3.3 describe el comportamiento de los estados de energía como función de la intensidad del campo aplicado, para diferentes valores de l . los números cuánticos $\{n, l\}$. Las transiciones entre estados están relacionadas con las corrientes persistentes y con las oscilaciones de Aharonov-Bohm. La evolución del espectro de energía en función del campo B presenta un cruce entre el estado base $l = 0$ y el primer estado excitado $l = -1$ en $B = 4$ T. Es así que los cruces de los espectros de energía para $l = 0, -1, -2, -3$, indican el efecto Aharonov-Bohm. Mientras aplicamos un campo relativamente bajo, con los electrones en un estado de momento angular $l = 0$, el potencial de confinamiento cobra mayor importancia. En un anillo ideal, la densidad electrónica está concentrada en distancias menores al radio interior del QR, con una barrera de potencial de altura infinita en el centro del anillo.

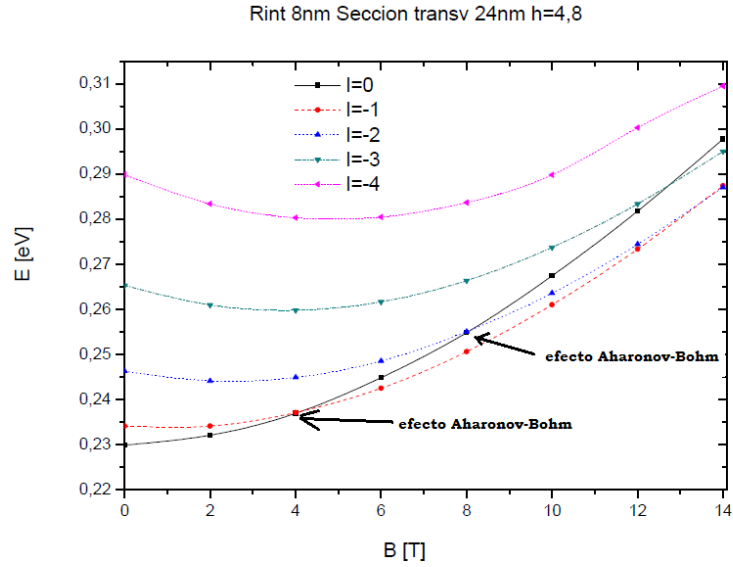


Figura 3.3: Estados confinados con momento angular negativo, para anillos con sección transversal elíptica de $R_{ext} - R_{int} = 32 \text{ nm} - 8 \text{ nm} = 24 \text{ nm}$ y altura 4.8 nm.

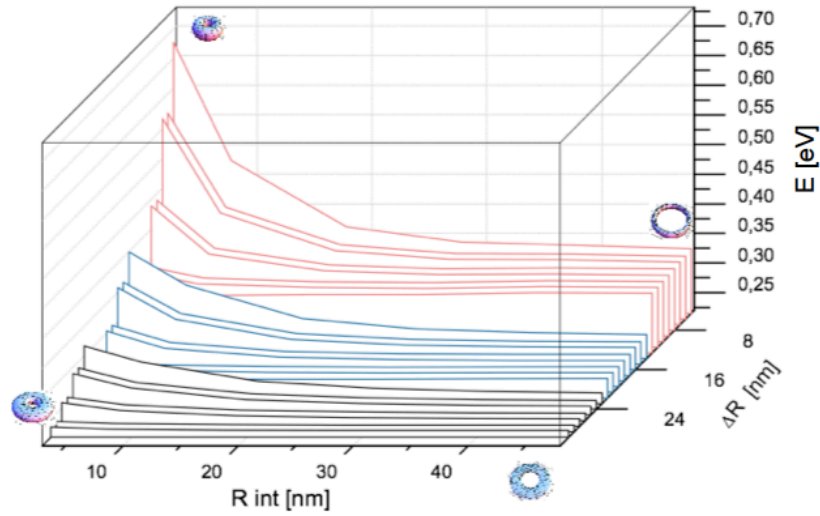


Figura 3.4: Estados confinados de radio externo y radio interno.

La Fig. 3.4 describe el comportamiento de los estados confinados en el anillo en función del radio interno y el radio externo al variar solo uno, o ambos. Por el contrario la Fig. 3.5 Superior describe el comportamiento de los estados confinados en el anillo en función del radio interno $R_{int} = 8 \text{ nm}$, con los radios exteriores $R_{ext} = 18 \text{ nm}$ y $R_{ext} = 32 \text{ nm}$, ambos casos con altura total de la sección

transversal $h = 4.8$ nm. A su vez la Fig. 3.5 Inferior describe el comportamiento de los estados confinados en el anillo en función del radio interior $R_{int} = 8$ nm, con altura total de la sección transversal $h = 4.8$ nm y $h = 2.4$ nm, ambos casos radio exterior $R_{ext} = 32$ nm. Notar además que el desplazamiento a estados con valores más altos es debido a la reducción de la altura.

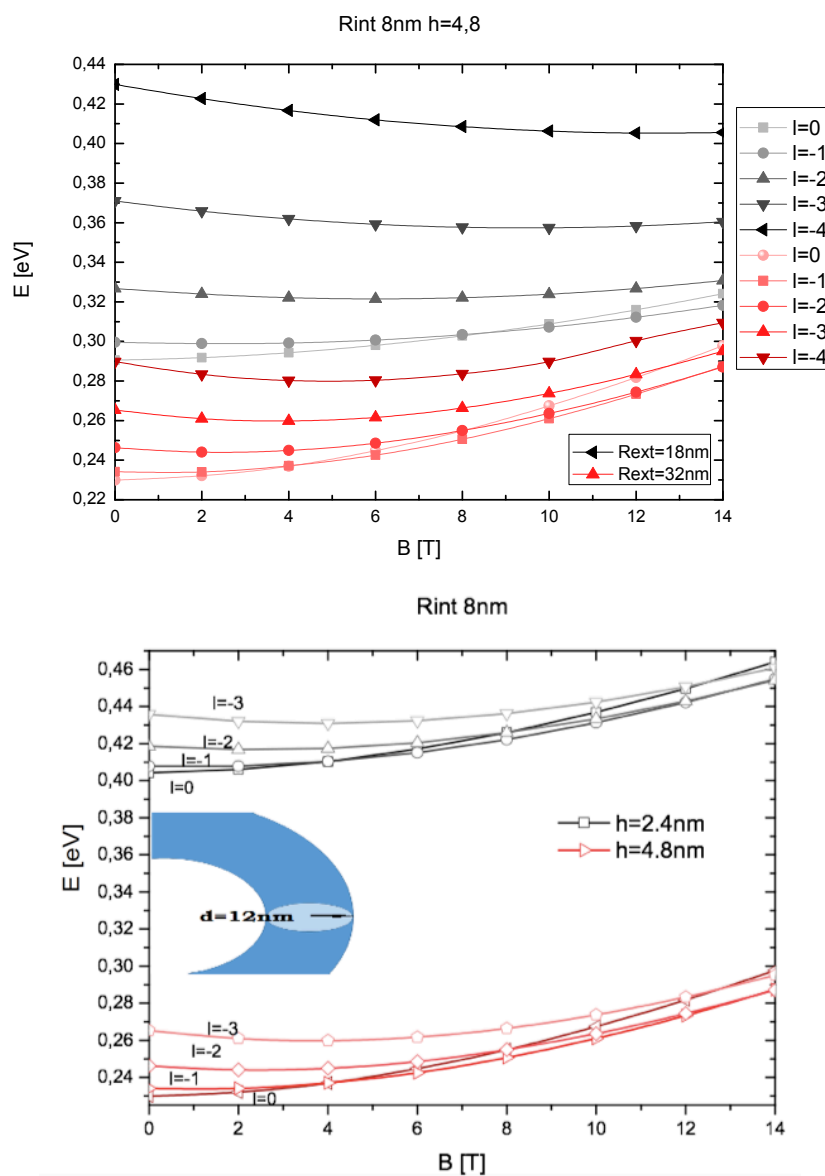


Figura 3.5: Superior. Estados confinados para $R_{ext} = 18$ nm y $R_{ext} = 32$ nm. Altura del eje menor de la sección elíptica ($h = 4.8$ nm). Inferior. Estados confinados para $R_{ext} = 32$ nm. Altura del eje menor de la sección elíptica ($h = 2.4$ nm y $h = 4.8$ nm).

Se ha obtenido la dependencia de los estados energéticos de un electrón confinado en un QR en función del campo magnético y los radios interno R_{int} y externo R_{ext} . Los estados de energía están enumerados por un conjunto de números cuánticos $\{n, l, s\}$ donde $n = 0, 1, 2, \dots$ es el número cuántico principal. Por claridad se grafican solo los primeros estados $E_{n,l}(\mathbf{B})$, donde se puede controlar la diferencia de energía entre $\{0, l\}$ y $\{1, l\}$ cambiando la diferencia $\Delta = R_{ext} - R_{int}$. Se observa un cambio en el momento angular del estado fundamental del electrón confinado en el anillo, de $l = 0$ a $l = -1, \dots$ al aplicar un campo \mathbf{B} .

La oscilación de los estados en el caso tridimensional exhibe la misma tendencia que para el caso unidimensional (ver ecuación 3.12), pero está conforme a los reportados experimentalmente [5, 60]. Puede verse la congruencia de estos resultados analizando el flujo $\frac{\phi}{\phi_0} = n$, $\phi = \pi(R_{int} + \Delta)^2 B$, se puede observar que si Δ tiende a cero podemos obtener la misma situación del caso unidimensional. La excentricidad de la sección transversal, suprime las oscilaciones Aharonov-Bohm de los niveles de energía más bajos.

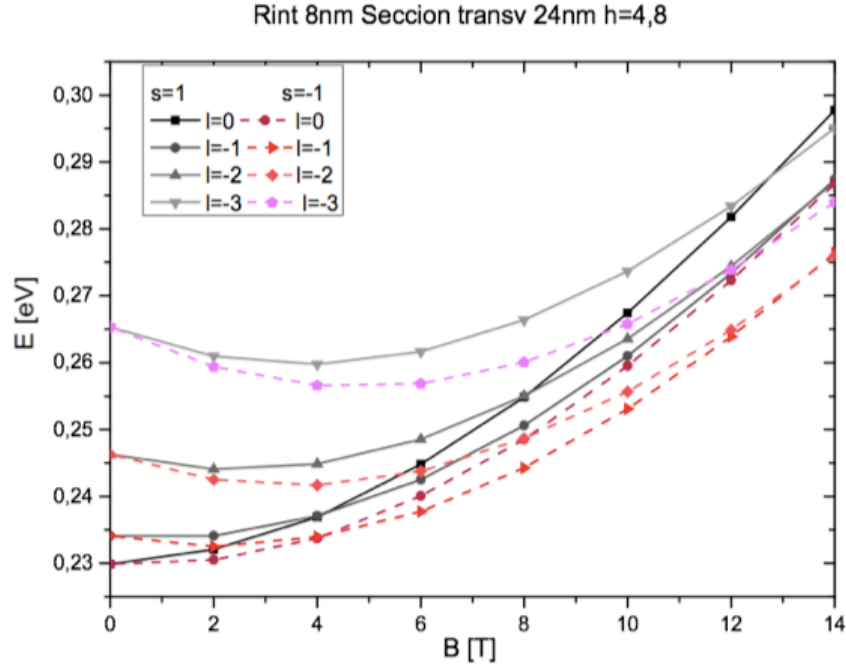


Figura 3.6: Estados confinados para radio $R_{int} = 8$ nm, altura $h = 4.8$ nm y el espín s tiene valores $s = 1$ y $s = -1$, $s = \pm 1$ se refiere a la orientación del espín del electrón a lo largo del eje z .

La Fig. 3.6 describe el comportamiento de los estados confinados en el anillo en función del radio interior $R_{int} = 8$ nm, con altura total de la sección transversal $h = 4.8$ nm, radio exterior $R_{ext} = 32$

nm y del espín con valores ± 1 . Nótese que el desplazamiento a estados con valores mas altos es debido a la reducción de la altura.

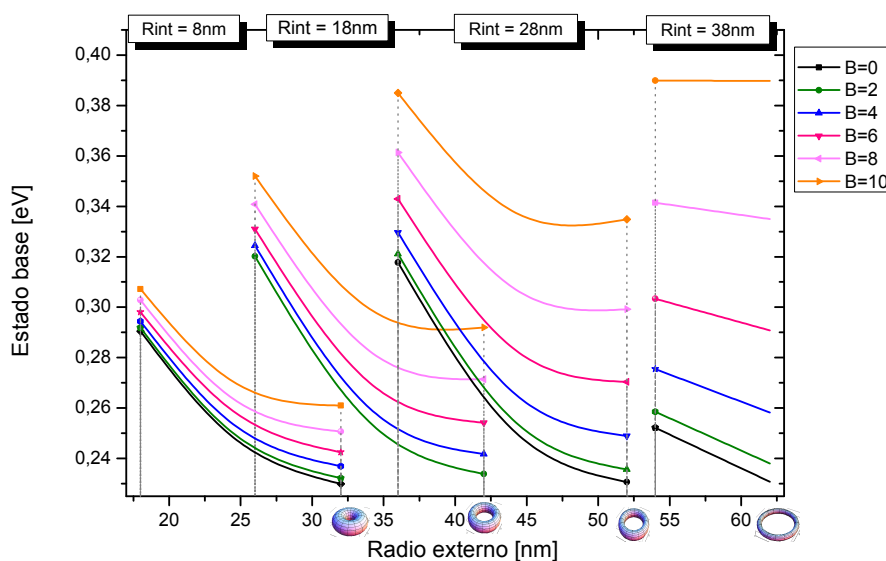


Figura 3.7: Estados confinados para R_{ext} : 8 nm, 18 nm, 28 nm y 38 nm. Altura del eje menor de la sección elíptica ($h = 4.8nm$).

La Fig. 3.7 muestra el comportamiento de la energía del estado base para diferentes radios interno y externo, y diferentes intensidades del campo aplicado. Se detalla el comportamiento de los estados confinados donde del radio interno varía de $R_{int} = 8$ nm - 36 nm y radio exterior $R_{ext} = 32$ nm - 60 nm, con altura total de la sección transversal $h = 4.8$ nm. Variando los radios es posible modelar desde un disco nanométrico, hasta un toroide cada vez con un ancho transversal mas delgado, logrando obtener un confinamiento menor.

3.3.2.1. Densidad de corriente

La mecánica cuántica predice que un electrón confinado en estructuras anulares suficientemente pequeñas atravesadas por un flujo magnético presenta una corriente sin disipación circulando en éste que no requiere una fuente externa. La corriente está asociada con el flujo de la probabilidad, es decir la forma de $\Psi(x, t)$ que describe el estado determina las corrientes.

La densidad de probabilidad es $|\Psi(x, t)|^2 = \Psi\Psi^*$, exploramos como ésta cambia con el tiempo.

Teniendo

$$\frac{\partial |\Psi(x, t)|^2}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi, \quad (3.23)$$

Si usamos la ecuación de Schrödinger $i\hbar \partial \Psi / \partial t = (\hat{p}^2/2m + V)\Psi$, y su complejo conjugado $-i\hbar \partial \Psi^* / \partial t = (\hat{p}^2/2m + V)\Psi^*$ se obtiene

$$\frac{\partial |\Psi(x, t)|^2}{\partial t} = \Psi^* \frac{(\hat{p}^2/2m + V)\Psi}{i\hbar} + \Psi \frac{(\hat{p}^2/2m + V)\Psi^*}{-i\hbar}, \quad (3.24)$$

que se simplifica

$$\frac{\partial |\Psi(x, t)|^2}{\partial t} = \frac{1}{2mi\hbar} (\Psi^* \hat{p}^2 \Psi - \Psi \hat{p}^2 \Psi^*), \quad (3.25)$$

con $\hat{p} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}$ que da

$$\frac{\partial |\Psi(x, t)|^2}{\partial t} = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\frac{1}{2m} (\Psi^* \hat{p} \Psi - \Psi \hat{p} \Psi^*) \right], \quad (3.26)$$

que es semejante a la ecuación de continuidad con la forma $\partial \rho / \partial t = -\nabla_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{j}$, donde ρ es la densidad de la partícula y \mathbf{j} es la densidad de corriente. Así, la densidad de corriente es

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m} (\Psi^* \hat{p} \Psi - \Psi \hat{p} \Psi^*), \quad (3.27)$$

Esta ecuación nos permite calcular el flujo de densidad de probabilidad, o el flujo de corriente directamente desde las funciones de onda mecánico-cuánticas de los estados. Si Ψ es real, $\mathbf{j} = 0$ ^{II}. En presencia de un campo magnético $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, el operador momento mecánico cuántico $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} + q\mathbf{A}$, donde q es la magnitud de la carga del electrón. Esto da entonces un término a la expresión 3.27

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{m} \text{Im} (\Psi^* \nabla \Psi) - \frac{e}{m} \mathbf{A} |\Psi|^2 \quad (3.28)$$

$$\mathbf{J} = \frac{e\hbar}{m} \text{Im} (\Psi^* \nabla \Psi) - \frac{e^2}{m} \mathbf{A} |\Psi|^2 \quad \text{III} \quad (3.29)$$

Conociendo la corriente es posible calcular el momento magnético del QR. Dado un estado determinado del sistema cuántico, se puede encontrar \mathbf{j} .

Una parte de la corriente que circula en el anillo es correspondiente a la magnetización diamagnética. El flujo de corriente sin disipación en un circuito resistivo parece contraintuitivo, pero de hecho es posible si este estado peculiar es el estado base del sistema. Esto es conceptualmente equivalente a

^{II}La unidad de \mathbf{j} es $1/(m^2 s)$ (3D), $1/(m^2 s)$ (2D), $1/s$ (1D).

^{III}Las unidades son A/m^2 (3D), A/m (2D), A (1D), donde $A = C/s$ es la corriente en unidades de amperes.

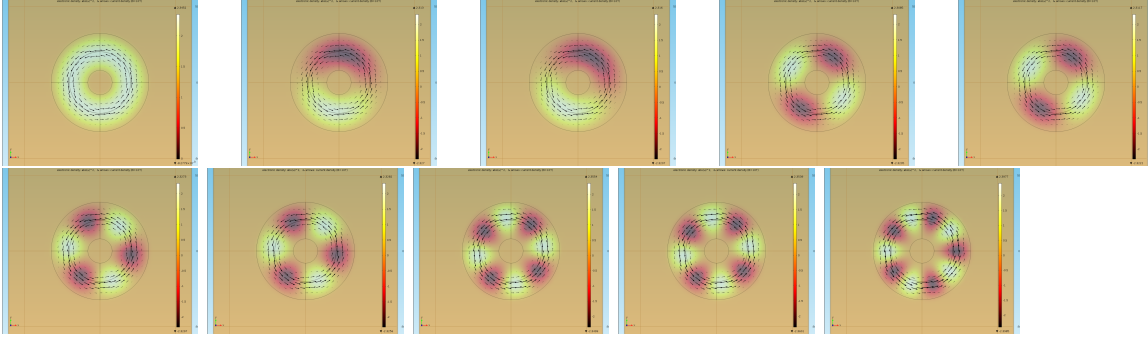


Figura 3.8: Isosuperficies y densidades de corrientes de los estados electrónicos para: Radio interno 8 nm, Diámetro 24 nm, altura 2.4 nm, campo magnético $B = 2$ T.

electrones que orbitan alrededor de los átomos sin perder energía por la radiación de sincrotrón y que generan momentos magnéticos orbitales permanentes, incluso en el estado base. Como se mencionó anteriormente, el circuito no necesita tener resistencia cero y además, la disipación débil o el ruido no resultan en la desaparición de las corrientes persistentes. En cualquier caso, tales corrientes han sido observadas experimentalmente en anillos hechos de Cu, Au, Al y de semiconductores.

3.3.3. Distribución de anillos cuánticos

Se ha observado que heteroestructuras aisladas con geometría toroidal, presentan corrientes persistentes en presencia de un campo magnético. La corriente es una función periódica del flujo que atraviesa al anillo, ésta refleja la periodicidad del movimiento electrónico a lo largo del anillo. Estas corrientes son una consecuencia de la dependencia de los estados confinados de las condiciones geométricas del anillo. Se ha mostrado que las propiedades de transporte en anillos metálicos nanométricos a baja temperatura exhiben características de coherencia cuántica.

Para el estudio de un ensamble de anillos cuánticos, en particular, para un sistema bidimensional de X anillos acoplados. El hamiltoniano para X anillos acoplados en presencia de un flujo ϕ_{ext} debido a un campo externo \mathbf{B} se expresa [52](#)

$$H = \frac{1}{2m^*} \sum_{\lambda} \sum_{\lambda}^{N_{\lambda}} \left(p_{i,\lambda}^0 - \frac{e\phi_{ext}}{2\pi R} \right)^2 - \sum_{\lambda=1, \lambda'=1}^X \sum_{\lambda \neq \lambda'}^X M_{\lambda\lambda'} I_{\lambda} I_{\lambda'}, \quad (3.30)$$

donde A_l es el vector potencial externo, M es la inductancia mutua. Los flujos y corrientes en el anillo están acoplados de acuerdo a: $\phi_i = \sum_{k=1}^N M_{ik} I_k + \phi_{ext}$. Cuando tenemos una distribución bidimensional de anillos, al variar la corriente o los estados se produce un cambio en la inductancia. Los estados colectivos conectados por inductancias mutuas, son centrales en este estudio, dado que son de nuestro interés los tiempos de relajación de estados coherentes de estados colectivos.

Reportes muestran que un sistema bidimensional compuesto por $5 \times 10^9 QRs/cm^2$, presenta diversos efectos en la interacción de la densidad electrónica y en el entrelazamiento de electrones. Este sistema

simple se representa como un conjunto de dipolos, donde cada uno se encuentra en cada sitio en una red, tal que ellos interactúan entre sí. La energía de interacción del par de vecinos es:

$$E_{ij} = -J \cdot (\mathbf{P}_i \cdot \mathbf{P}_j) \quad (3.31)$$

J es la constante de intercambio. La energía total E y la magnetización M para la configuración de dipolos P_1, P_2, \dots, P_N se obtienen por la suma a través de los sitios de la red. En la aproximación de interacción dipolar de Ising solo tienen dos posibles estados. Para $J > 0$ el estado de menor energía corresponde al caso en que todos los dipolos están alineados. Los estados tienen magnetización macroscópica, *i. e.* el sistema es ferromagnético.

Cuando la temperatura T es baja los dipolos minimizan su energía de interacción de Ising, es decir, todos los dipolos se alinean en la misma dirección. Cuando es alta, las fluctuaciones térmicas rompen el orden y los dipolos están orientados aleatoriamente.

3.3.3.1. Respuesta diamagnética

En esta fase el momento total L es cero por la ley de Lenz. Debido a esta condición la magnetización (\mathbf{M}) se opone al campo magnético \mathbf{B} . La respuesta diamagnética que sigue a la geometría de los nanoobjetos de los semiconductores puede ser muy inusual e incluso revertir el signo de la magnetización. Las investigaciones experimentales de la respuesta diamagnética de nano objetos hechos a partir de semiconductores producirán resultados interesantes y pueden ser útiles para la posterior fabricación de materiales con propiedades magnéticas nuevas.

El momento magnético del anillo puede tener la misma dirección que el campo magnético aplicado (respuesta paramagnética), u opuesta (respuesta diamagnética).

Las propiedades magneto-ópticas de una distribución bidimensional de anillos semiconductores a escala nanométrica dispuestos sobre un sustrato *InAs/GaAs* pueden mostrar propiedades magnéticas colectivas interesantes, y por tanto mejoras en el control del tiempo de relajación. Se espera que nuestros resultados preliminares muestren que los tiempos de relajación de los estados colectivos de una distribución bidimensional de QRs, ciertamente como era de esperarse, son afectados por la inductancia mutua. En cuanto dispongamos de resultados que nos permitan obtener conclusiones sólidas serán reportados [Relajación en sistemas de anillos cuánticos interactivos, *Rev Mex de Física*, 2018.]

3.4. Conclusión

En una breve conclusión, hemos investigado los estados de energía de los electrones para un modelo bidimensional y tridimensional de nanoanillos cuánticos de semiconductores en presencia un

campo magnético externo. Encontramos una oscilación no periódica de la energía entre los estados más bajos de energía del electrón en función de los campos magnéticos externos. Presentamos los resultados teóricos en función de la dimensión de confinamiento. Con combinaciones correctas de la sección transversal del anillo y la altura del anillo semiconductor, así se logró obtener un espectro de los estados en función del campo magnético aplicado. Cuando la altura del anillo es aumentada se muestra menor confinamiento del electrón. El resultado es útil para describir las propiedades magneto-ópticas de los anillos cuánticos a escala nanométrica, pues utilizando métodos simplificados reproduce propiedades físicas básicas. Aunque el tratamiento numérico que hemos seguido aquí es muy simple, las tendencias cualitativas que hemos hallado son bastante claras, estos resultados entonces podrían ser de utilidad como guía para posibles aplicaciones. La modificación de las propiedades del arreglo de QR por medio de un campo magnético es un aspecto inherente del efecto AB. Esta característica es un requisito para fabricar materiales artificiales, como los metamateriales de índice de refracción negativo. Hasta ahora, la mayoría de las investigaciones reportadas en el campo de los efectos magneto-ópticos en nanoanillos han sido sobre aproximaciones idealizadas para describir aspectos espectroscópicos en el infrarrojo lejano (FIR) o magneto-fotoluminiscencia (MP). Los resultados aquí discutidos podrían verse como una herramienta complementaria para tener más elementos para entender y diseñar materiales con una respuesta magneto-óptica más realistas.

Capítulo 4

Estados plasmónicos de arreglos de partículas metálicas

En los dos capítulos previos investigamos los modos colectivos en sistemas nanoestructurados semiconductores. Más que un resultado cuantitativo preciso, deseábamos averiguar tendencias cualitativas sobre los tiempos de relajación de estados colectivos. El procedimiento numérico que usamos para ese fin fue suficiente para proporcionarnos las respuestas deseadas. Con la misma idea de profundizar en la comprensión del comportamiento de modos colectivos, se busca ahora una descripción cuantitativamente más precisa, en este capítulo investigamos los modos plasmónicos de diferentes arreglos de nanopartículas metálicas.

Estudiaremos teóricamente la estructura de bandas de los modos plasmónicos colectivos de nanoesferas metálicas embebidas en un dieléctrico en dos arreglos: i) Una red Kagomé bidimensional periódica, y ii) un arreglo *honeycomb* bidimensional. Se analizan los modos colectivos plasmónicos (CPs) originados por la interacción de los modos superficiales localizados (PSL). Los CPs se extienden en toda la red involucrando a todos los PSL al mismo tiempo. Nuestros arreglos muestran una variedad de propiedades que dependen crucialmente de la red y de las interacciones microscópicas entre resonancias PSL [\[1\]](#)

Estos materiales pueden modelarse por medio de sub-redes interactuantes y, variando la configuración geométrica de las partículas, es posible sintonizar las interacciones entre los PSL en cada nanoestructura, pudiendo explotar esto para crear una variedad de nuevos materiales artificiales, que exhiban propiedades que no se pueden encontrar en los materiales que de manera espontánea se producen en la naturaleza.

¹Los resultados de nuestra investigación que se discuten en este capítulo fueron obtenidos bajo la guía y asesoría de la Dra Nancy Sandler y el Dr. Sergio Ulloa, durante una visita por un lapso de siete meses que realicé en la Universidad de Ohio, con el apoyo financiero del CONACyT mediante una beca mixta.

4.1. Plasmones en nanopartículas metálicas

Las nanopartículas metálicas son cúmulos formados por un número relativamente pequeño de átomos, desde unos pocos átomos a nanopartículas grandes con más de 10^5 átomos.

El uso de materiales plasmónicos en la investigación de la interacción de la luz con los metales ha sido profuso, tanto experimental como teóricamente [61–66]. Se han creado nanoestructuras plasmónicas, como nanopartículas metálicas aisladas, que al ser expuestas a radiación electromagnética externa, ésta se acopla con el plasma formado por los electrones de conducción y con el fondo iónico positivo, ocasionando un modo colectivo resonante [67]. Estas oscilaciones cuantizadas de la densidad electrónica son llamadas plasmones [68]. El campo evanescente en la superficie de la nanopartícula aumenta el campo óptico local en la región de sublongitud de onda [i], permitiendo superar el límite de difracción [iii] [69].

Las características de estas resonancias (PSL) [iv] dependen del material, dimensión y forma [69–71]. Por ejemplo, para nanopartículas de oro y plata elaboradas con diámetros aproximadamente entre 5–150 nm, la resonancia de plasmón está localizada en la región visible del espectro electromagnético [72, 73] [v]. Una consecuencia de esto, son los colores exhibidos por las partículas tanto en la luz transmitida como reflejada, debido a una absorción y dispersión que son amplificadas por la resonancia. Este efecto ha encontrado aplicaciones empíricas durante muchos cientos de años, por ejemplo, en el entintado de vidrio para ventanas o copas ornamentales. La intensificación del campo eléctrico local, ha sido aplicada en semiconductores convencionales para aumentar la fotocorriente inducida [74], y para mejorar dispositivos fotovoltaicos [74, 75].

El límite de difracción restringe que el tamaño de la partícula r sea mucho menor que la longitud de onda del campo aplicado λ ($\lambda \gg r$). Bajo tal restricción de tamaño, la energía de interacción de los PSL es de naturaleza dipolar [76], y todas las oscilaciones de orden superior son insignificantes. Una forma simple de visualizar esta resonancia es considerar un campo eléctrico externo y estático, aplicado de modo que el centro de masa electrónico se mueva en la dirección opuesta a la del campo. Esto resulta en una acumulación de carga negativa en un lado de la partícula y una carga positiva resultante en el otro lado, que se puede considerar como un dipolo. Los dos lados opuestos de la nanopartícula se atraen entre sí y la fuerza de atracción resultante actúa como una fuerza restauradora de los electrones, por lo que puede existir una condición resonante y oscilante. Por lo tanto, la nube de electrones se desplaza a través de una distancia h con respecto al fondo positivo estático de iones [69]. La condición de oscilación para estos dipolos es análoga a un oscilador armónico. Para

ⁱⁱEsto significa que la probabilidad de que la radiación sea dispersada o re-radiada es muy alta.

ⁱⁱⁱEl límite de difracción prohíbe enfocar luz en objetos más pequeños que la longitud de onda de la luz utilizada

^{iv}El número de átomos en la superficie es mayor que el número de átomos en el volumen, esto implica que los efectos de la superficie dominan la respuesta óptica.

^vPara los metales comunes se observan generalmente en el rango visible (Ag, Au o Cu) y UV (Al).

partículas esféricas en un medio dieléctrico con permitividad ϵ_m , el campo eléctrico inducido por el desplazamiento electrónico en el interior es $\mathbf{E} = \frac{3\epsilon_m}{2\epsilon_m+1} \frac{4\pi n_e e}{3\epsilon_m} \mathbf{h}$, conduciendo a que la fuerza de restauración del plasma sea $Nm_e \ddot{h} = N \frac{4\pi n_e e^2}{1+2\epsilon_m} h$, esto resulta en una ecuación de movimiento de oscilador armónico $Nm_e \ddot{h} + \omega_0^2 h = 0$, $\omega_0 = w_p / \sqrt{1+2\epsilon_m}$ es la frecuencia Mie de la densidad electrónica respecto al centro de masa,^[VI] con $\omega_p = \sqrt{4\pi n_0 e^2 / m_0}$ la frecuencia de plasma^[VII], $M = N_e m_0$ es su masa, con N_e el número de electrones de valencia en cada nanopartícula y $n_0 = N_e / (\frac{4\pi}{3} r^3)$ es la densidad electrónica.

La interacción entre PSL genera modos CPs extendidos sobre todo el arreglo^[VIII]. Los CPs forman un modo bosónico que depende del tamaño, tipo de nanopartícula, disposición geométrica e incluso de la orientación dipolar^[77-79]. Se han reportado experimentalmente y teóricamente propiedades colectivas resultado de las interacciones de sus componentes individuales^[77,78,80,81].

4.1.1. Aproximación cuasiestática: Interacción dipolo-dipolo

En nuestro modelo de partículas metálicas, la red tiene una constante de red a y está embebida en un medio dieléctrico con una constante dieléctrica ϵ_m . Cada nanopartícula esférica de radio r soporta una resonancia PSL, que es inducida por un campo eléctrico externo oscilante con longitud de onda $\lambda \gg r$, esto permite que la radiación incidente externa interactúe con la red como si su comportamiento fuese homogéneo. Bajo tal condición, la excitación electrónica colectiva asociada con el PSL se puede modelar como un dipolo puntual $\mathbf{p} = -eN_e h(\mathbf{R}) \hat{p}$ con una frecuencia natural de oscilación ω_0 , donde $h(\mathbf{R})$ es el desplazamiento asociado con el movimiento del centro de masa electrónico que corresponde al PSL en la posición \mathbf{R} y \hat{p} es el vector unitario del dipolo. Se supone que todos los dipolos apuntan en la misma dirección $\hat{p} = \sin\theta(\sin\varphi\hat{x} - \cos\varphi\hat{y}) + \cos\theta\hat{z}$. Los ángulos de polarización θ y φ , representan parámetros de interacción sintonizables que influyen de forma crucial en la estructura de bandas de los plasmones colectivos θ es el ángulo entre \hat{p} y \hat{z} y φ es el ángulo entre la proyección de \hat{p} en el plano $x(-\hat{y})$, ver Fig. 4.1.

Los PSL en cada partícula de la red se expresan como osciladores cuánticos

$$H_{PSL} = \frac{\Pi^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega_0^2 h^2 = \hbar\omega_0 (b^\dagger b + \frac{1}{2}), \quad (4.1)$$

donde $b = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}} h(\mathbf{R}) + i \frac{\Pi}{\sqrt{2\hbar M \omega_0}}$ ^[82].

^{VI}La resonancia ocurre en la frecuencia de Mie sin embargo cambia debido a las interacciones.

^{VII}Frecuencia necesaria para considerar al metal transparente y permita que la radiación pueda propagarse.

^{VIII}Entre los efectos de retardación y procesos de disipación, lo más probable es que los CPs se propaguen a distancias del orden de λ (quizá 2 o 3 λ), que es mucho más grande que la constante de red, pero no se considera que la propagación es microscópica, claro que a bajas temperaturas (sin fonones) y sin defectos (sin dispersión), puede ser que la propagación alcance 10 o 100 λ .

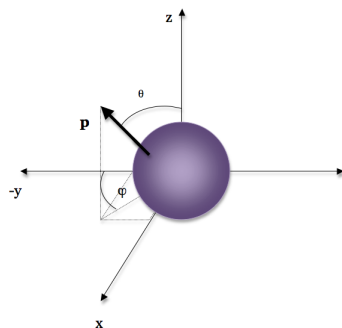


Figura 4.1: Orientaciones de los dipolos en coordenadas esféricas, mostrando los ángulos θ y φ .

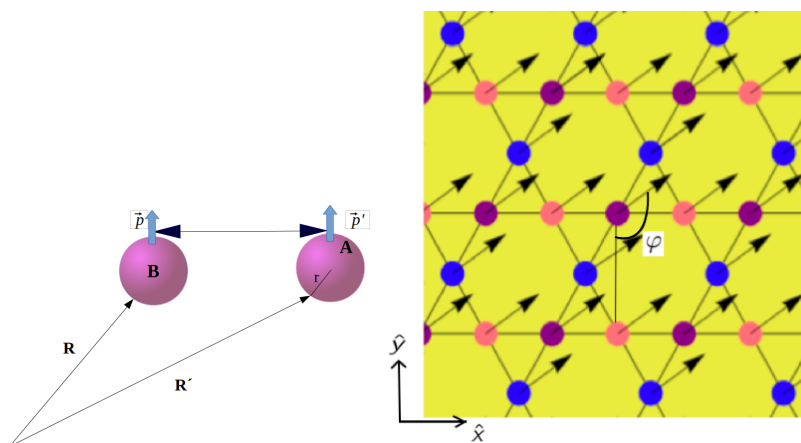


Figura 4.2: Izq. Interacción de dos dipolos puntuales \mathbf{p} y \mathbf{p}' . Der. Red Kagomé infinita de nanopartículas metálicas, con momentos dipolares oscilatorios. (Se muestra el ángulo φ en el plano.)

Para el arreglo de nanopartículas, el acoplamiento de campo cercano domina bajo las condiciones en que los dipolos están separados por una distancia mucho menor que λ ($\lambda \gg r$) [83]. Cuando las nanopartículas están suficientemente cerca, el acoplamiento de campo cercano domina y el campo eléctrico irradiado se aproxima como cuasi-estático, permitiendo que las interacciones se describan mediante interacciones dipolo-dipolo [84]. La aproximación cuasiestática es confiable si la longitud de onda asociada con cada PSL es mucho mayor que la distancia entre partículas $\lambda \gg a$ [80]. Bajo la condición $r \lesssim a/3 \ll \lambda$, cada partícula interactúa con sus vecinos a través de interacciones dipolo-dipolo (ver Fig. 4.2), y solo se considera el campo cercano generado por cada dipolo (sin multipolos, ya que las excitaciones multipolares son importantes para partículas de mayor dimensión, pues afectan a la frecuencia de resonancia), ignorando así efectos de retardación.

Dentro de esta aproximación, las sub-redes están conectadas por interacción dipolo-dipolo y la interacción entre los dipolos puntuales \mathbf{p} y \mathbf{p}' , ubicados en \mathbf{R} y \mathbf{R}' respectivamente, es

$$\nu = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' - 3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{n})}{\epsilon_m |\mathbf{R} - \mathbf{R}'|^3}, \quad (4.2)$$

donde $\mathbf{n} = (\mathbf{R} - \mathbf{R}')/|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|$, es el vector unitario que conecta dos partículas [84].

Cada dipolo responde al campo total, que es el externo más el local, donde el campo local es causado precisamente por la interacción entre dipolos. La interacción dipolo-dipolo decae como uno sobre el cubo de la distancia entre partículas. El uso de esta aproximación reproduce cualitativamente los resultados de simulaciones más sofisticadas que incluyen efectos de retardación [85].

4.2. Plasmones en red Kagomé

Durante décadas en la física de la materia condensada, las redes Kagomé han sido objeto de diferentes estudios teóricos. Esta red está compuesta por una celda unitaria que encierra tres átomos [IX]. Recientemente, se han estudiado varios esquemas de redes de Kagomé, que presentan puntos de Dirac en algunas estructuras como: *Quantum Kagome Spin Ice* [86], [24], [87], sistemas atómicos fríos [88], cristales fotónicos [89], entre otros. Dentro del estudio de estos materiales, la creación de bandas planas [X] han sido propuestas utilizando guías de ondas metalo-fotónicas, o usando estructuras de cristal fotónico [89]. La incorporación de acoplamiento spin-órbita en el estudio de las redes Kagomé ha demostrado que rompe la simetría en los puntos de Dirac, ocasionando un gap en estos puntos [90].

4.2.1. Descripción del arreglo

La geometría de la red Kagomé está descrita como la Fig. 4.3, donde los vectores unitarios primitivos son $\vec{a}_1 = a(2, 0)$ y $\vec{a}_2 = a(1, \sqrt{3})$, a es el parámetro de red. La posición de cada sub-red está dada por los vectores $\mathbf{R}_B = (0, 0)$, $\mathbf{R}_A = \mathbf{R}_B + \hat{e}_1$, y $\mathbf{R}_C = \mathbf{R}_B + \hat{e}_2$. Las celdas unitarias tienen las posiciones $\mathbf{R}_i = m_i \vec{a}_1 + n_i \vec{a}_2$, $m_i, n_i \in \mathbb{Z}$. La dispersión colectiva está confinada a la primera ZB según la definición de la celda de Wigner-Seitz con respecto a los vectores de la red recíproca $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{c}(1, -1/\sqrt{3})$ y $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{c}(0, 2/\sqrt{3})$.

^{IX} Kagomé denota originalmente cestas de bambú japonesas precisamente con este patrón.

^X Recientes estudios en las llamadas redes de bandas planas, han abierto nuevas vías para la manipulación de la luz y la transmisión de imágenes controladas.

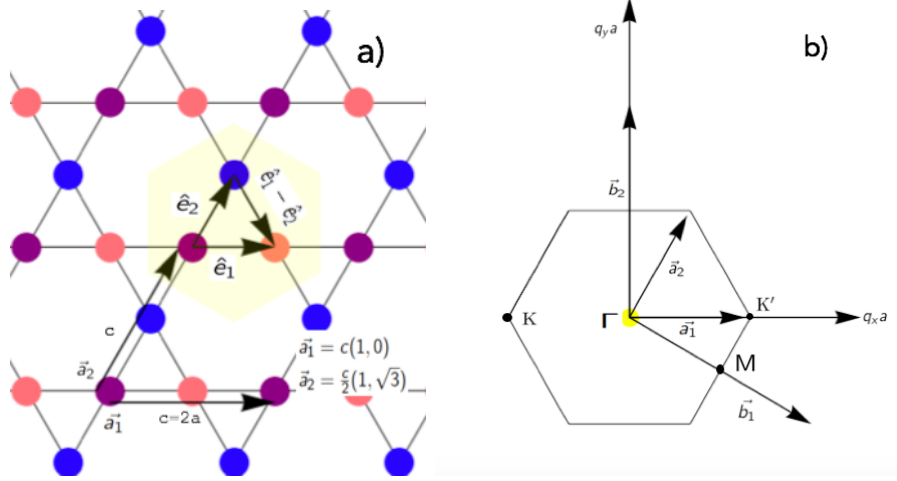


Figura 4.3: a) Estructura de Kagomé con constante de red a , que consta de tres sub-redes, etiquetadas como A, B y C, conectadas por los vectores entre vecinos más cercanos: $\hat{e}_1 = a(1,0)$, $\hat{e}_2 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$ y $\hat{e}_0 = \hat{e}_1 - \hat{e}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3})$ en cada celda Wigner-Seitz (amarillo). b) Primera zona de Brillouin (ZB) en el espacio recíproco con los vectores primitivos \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 .

4.2.2. Arreglo de nanopartículas

Las interacciones dipolares entre plasmones de superficie localizados en diferentes nanopartículas, originan plasmones colectivos que se extienden por toda la red. El mecanismo que acopla las tres sub-redes, (ver Fig. 4.4), es puramente inducido por las interacciones dipolares de campo cercano (campo local).

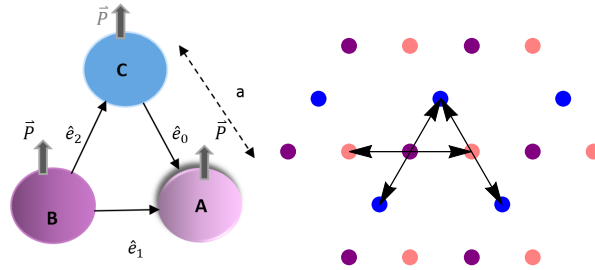


Figura 4.4: Representación de la interacción de partículas en la celda unidad. Se puede notar que los vecinos más cercanos de cada partícula pertenecen a las otras sub-redes.

La Hamiltoniana debido a la interacción total entre las partículas en la red es

$$H_0 = \sum_{A,B,C} \sum_{R_S} \left[\frac{\pi_S^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega_0^2 h_S^2(R) \right], \quad (4.3)$$

la cual describe a los PSL, y

$$\begin{aligned}
 H_{int} = \frac{(eN_e)^2}{\epsilon_m a^3} \sum_{R_B} \left[\left\{ h_B(R_B) h_A(R_B + \hat{e}_1) + h_B(R_B) h_A(R_B - \hat{e}_1) \right\} C_1 + \right. \\
 \left. \left\{ h_B(R_B) h_C(R_B + \hat{e}_2) + h_B(R_B) h_C(R_B - \hat{e}_2) \right\} C_2 + \right. \\
 \left. \left\{ h_A(R_B + \hat{e}_1) h_C(R_B + \hat{e}_1 + \hat{e}_0) + h_C(R_B + \hat{e}_2) h_A(R_B + \hat{e}_1) \right\} C_0 \right], \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

donde $C_j = 1 - 3\text{sen}^2\theta\text{sen}^2[\varphi - \frac{\pi}{3}(j-1)]$, ($j = 0, 1, 2$) son las funciones de polarización. El Hamiltoniano total del sistema, incluidas solo interacciones de vecinos más cercanos, es $H = H_0 + H_{int}$, por lo tanto, el sistema se reduce a un sistema de osciladores acoplados.

Los PSL correspondientes a la excitación electrónica del centro de masa puede considerarse generalmente como un modo bosónico cuántico [91]. Así tendríamos una descripción cuántica de la red de nanopartículas metálicas que forma este metamaterial introduciendo los siguientes operadores escalera

$$\begin{aligned}
 a_{\mathbf{R}} = \sqrt{\frac{M\omega_0}{2\hbar}} h_A(\mathbf{R}) + \frac{i\Pi_A(\mathbf{R})}{\sqrt{2\hbar M\omega_0}}, \quad b_{\mathbf{R}} = \sqrt{\frac{M\omega_0}{2\hbar}} h_B(\mathbf{R}) + \frac{i\Pi_B(\mathbf{R})}{\sqrt{2\hbar M\omega_0}}, \\
 c_{\mathbf{R}} = \sqrt{\frac{M\omega_0}{2\hbar}} h_C(\mathbf{R}) + \frac{i\Pi_C(\mathbf{R})}{\sqrt{2\hbar M\omega_0}}. \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

Los operadores dan acceso a la dispersión de plasmones colectivos y a la naturaleza de los estados cuánticos de plasmones colectivos. Estos operadores obedecen las propiedades de conmutación

$$[a_{\vec{R}}, a_{\vec{R}'}^\dagger] = [b_{\vec{R}}, b_{\vec{R}'}^\dagger] = [c_{\vec{R}}, c_{\vec{R}'}^\dagger] = \delta_{\vec{R}, \vec{R}'} \quad y \quad [a_{\vec{R}}, b_{\vec{R}'}^\dagger] = 0. \quad (4.6)$$

La Hamiltoniana de los PSL en las sub-redes es en función de los operadores cuánticos es

$$H_0 = \hbar\omega_0 [a_R^\dagger a_R + b_R^\dagger b_R + c_R^\dagger c_R], \quad (4.7)$$

y la Hamiltoniana de interacción que describe a los plasmones colectivos es

$$\begin{aligned}
 H_{int} = \frac{(eN_e)^2}{\epsilon_m a^3} \frac{\hbar}{2M\omega_0} \sum_R \left\{ C_1 b_{R_B}^\dagger [a_{R_A} + a_{R_A}^\dagger] + C_2 b_{R_B}^\dagger [c_{R_C} + c_{R_C}^\dagger] + C_0 a_{R_A}^\dagger [c_{R_C} + c_{R_C}^\dagger] + \mathbf{h.c.} \right\} \\
 = \hbar\Omega \sum_{R_B} \left\{ \left(C_1 \left\langle b_{\vec{R}_B}^\dagger [a_{\vec{R}_B + \hat{e}_1} + a_{\vec{R}_B + \hat{e}_1}^\dagger] \right\rangle \right) + \left(C_2 \left\langle b_{\vec{R}_B}^\dagger [c_{\vec{R}_B + \hat{e}_2} + c_{\vec{R}_B + \hat{e}_2}^\dagger] \right\rangle \right) \right. \\
 \left. + \left(C_0 \left\langle a_{\vec{R}_B + \hat{e}_1}^\dagger [c_{\vec{R}_B + \hat{e}_2} + c_{\vec{R}_B + \hat{e}_2}^\dagger] \right\rangle \right) + \mathbf{h.c.} \right\}. \quad (4.8)
 \end{aligned}$$

Si definimos $\kappa = \frac{(eN_e)^2}{\epsilon_m a^3} \frac{\hbar}{2M\omega_0} = \frac{(eN_e)^2}{M} \left(\frac{\hbar}{\epsilon_m a^3} \frac{1}{2\omega_0} \right)$, podemos deducir fácilmente que $\omega_0^2(1 + 2\epsilon_m) \frac{r^3}{3} = \frac{(eN_e)^2}{M}$, por lo tanto $\kappa = \omega_0 \left(\frac{r}{a} \right)^3 \frac{(1+2\epsilon_m)\hbar}{6\epsilon_m} = \hbar\Omega$, que es el parámetro de acoplamiento, lo que lleva a la creación de una excitación PSL en un sitio de red R_B y la aniquilación de otro PSL en una nanopartícula ubicada en la posición $R_B + \hat{e}_j$ que pertenece a la sub-red A , B o C .

La función $\hbar\Omega C_j$ es el acoplamiento sintonizable, su valor puede ajustarse mediante la dirección de la polarización \mathbf{p} de los plasmones colectivos, que se puede controlar a su vez por medio de un campo de radiación externa. Para materiales dieléctricos, *e.g.* plata, la constante dieléctrica $\epsilon_m = 10$. Tomando en cuenta la interacción entre nanopartículas con la condición de dipolos puntuales ($r/a \leq 1/3$), se tiene que $\Omega = \omega_0 \left(\frac{r}{a}\right)^3 \frac{(1+2\epsilon_m)}{6\epsilon_m} \leq \omega_0 \left(\frac{21}{60}\right) \frac{1}{27}$, por lo tanto $\frac{\Omega}{\omega_0} \leq \frac{1}{80} \simeq 0.013$ XI.

Los operadores bosónicos se pueden convertir al espacio de momento y así la Hamiltoniana se convierte en

$$H = \hbar\omega_0 \sum_{\mathbf{q}} \left[a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + c_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} \right] + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega \left[\left\{ f_{\mathbf{q1}} b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q1}} b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \left\{ f_{\mathbf{q2}} b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q2}} b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \left\{ f_{\mathbf{q0}} a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q0}} a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \mathbf{h.c.} \right], \quad (4.9)$$

donde $\mathbf{q} = (q_x a, q_y a)$ es el vector de onda en el espacio recíproco, $\Omega = \omega_0 \left(\frac{r}{a}\right)^3 \frac{(1+2\epsilon_m)}{6\epsilon_m} \ll \omega_0$ y $\Omega \approx 0.01\omega_0$, mientras que la información sobre la polarización del PSL está codificada en las funciones: $f_{\mathbf{q}i} = C_i 2\cos[\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_i]$, $i = 0, 1, 2$.

Para encontrar los modos normales del sistema, es necesario diagonalizar la Hamiltoniana 4.9 a través de la transformación de Bogoliubov $\beta_{\mathbf{q}}^l = \omega_{\mathbf{q}}^l a_{\mathbf{q}} + x_{\mathbf{q}}^l b_{\mathbf{q}} + u_{\mathbf{q}}^l c_{\mathbf{q}} + y_{\mathbf{q}}^l a_{-\mathbf{q}}^\dagger + z_{\mathbf{q}}^l b_{-\mathbf{q}}^\dagger + v_{\mathbf{q}}^l c_{-\mathbf{q}}^\dagger$, este operador de Bogoliubov describe el sistema diagonalizado y obedece $[\beta_{\mathbf{q}}^l, \beta_{\mathbf{q}'}^{l\dagger}] = [\omega_{\mathbf{q}}^l \omega_{\mathbf{q}'}^{l\dagger} + x_{\mathbf{q}}^l x_{\mathbf{q}'}^{l\dagger} + u_{\mathbf{q}}^l u_{\mathbf{q}'}^{l\dagger} + y_{\mathbf{q}}^l y_{\mathbf{q}'}^{l\dagger} + z_{\mathbf{q}}^l z_{\mathbf{q}'}^{l\dagger} + v_{\mathbf{q}}^l v_{\mathbf{q}'}^{l\dagger}] = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}$.

Por tanto $H = H_0 + H_{int}$ es diagonal en la nueva base, obteniendo la forma diagonal: $H = \sum_{\mathbf{q}} \sum_l \hbar\lambda_{\mathbf{q}}^l \beta_{\mathbf{q}}^{l\dagger} \beta_{\mathbf{q}}^l$. (Este caso es análogo al problema electrónico de enlace fuerte). La ecuación de movimiento de Heisenberg $[\beta_{\mathbf{q}}^l, H] = \hbar\lambda_{\mathbf{q}}^l \beta_{\mathbf{q}}^l$ conduce al problema de eigenvalores

$$\begin{pmatrix} \omega_0 & \Omega f_{\mathbf{q1}} & \Omega f_{\mathbf{q0}} & 0 & -\Omega f_{\mathbf{q1}} & -\Omega f_{\mathbf{q0}} \\ \Omega f_{\mathbf{q1}} & \omega_0 & \Omega f_{\mathbf{q2}} & -\Omega f_{\mathbf{q1}} & 0 & -\Omega f_{\mathbf{q2}} \\ \Omega f_{\mathbf{q0}} & \Omega f_{\mathbf{q2}} & \omega_0 & -\Omega f_{\mathbf{q0}} & -\Omega f_{\mathbf{q2}} & 0 \\ 0 & \Omega f_{\mathbf{q1}} & \Omega f_{\mathbf{q0}} & -\omega_0 & -\Omega f_{\mathbf{q1}} & -\Omega f_{\mathbf{q0}} \\ \Omega f_{\mathbf{q1}} & 0 & \Omega f_{\mathbf{q2}} & -\Omega f_{\mathbf{q1}} & -\omega_0 & -\Omega f_{\mathbf{q2}} \\ \Omega f_{\mathbf{q0}} & \Omega f_{\mathbf{q2}} & 0 & -\Omega f_{\mathbf{q0}} & -\Omega f_{\mathbf{q2}} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}^l = \lambda_{\mathbf{q}}^l \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}^l, \quad (4.10)$$

donde $\Psi \mathbf{M} \Phi = \lambda_{\mathbf{q}}^l \Psi \Phi$, $\Psi = (a_{\mathbf{q}}, b_{\mathbf{q}}, c_{\mathbf{q}}, a_{-\mathbf{q}}^\dagger, b_{-\mathbf{q}}^\dagger, c_{-\mathbf{q}}^\dagger)$, $\Phi = (w_{\mathbf{q}}, x_{\mathbf{q}}, u_{\mathbf{q}}, y_{\mathbf{q}}, z_{\mathbf{q}}, v_{\mathbf{q}})^T$, y \mathbf{M} es la matriz 6×6 . Los eigenvalores $\lambda_{\mathbf{q}}^l$ se obtienen resolviendo la ecuación $\lambda_{\mathbf{q}}^6 - a\lambda_{\mathbf{q}}^4 + b\lambda_{\mathbf{q}}^2 + d = 0$, donde los parámetros a , b y d son funciones dependientes de $f_{\mathbf{q1}}$, $f_{\mathbf{q2}}$, y $f_{\mathbf{q0}}$, por tanto dependen de las condiciones de polarización θ y φ .

^{XI}El valor $\Omega/\omega_0 = 0.01$ es usado para todas las gráficas en este capítulo.

Si A es

$$A = \begin{pmatrix} \omega_0 & \Omega f_{\mathbf{q}\mathbf{1}} & \Omega f_{\mathbf{q}\mathbf{0}} \\ \Omega f_{\mathbf{q}\mathbf{1}} & \omega_0 & \Omega f_{\mathbf{q}\mathbf{2}} \\ \Omega f_{\mathbf{q}\mathbf{0}} & \Omega f_{\mathbf{q}\mathbf{2}} & \omega_0 \end{pmatrix},$$

el sistema (4.10) se puede diagonalizar resolviendo un sistema por bloques tal que

$$H = -\omega_0^2 + 2\omega_0 A = \omega_0^2 \begin{pmatrix} 1 & 2t f_{\mathbf{q}\mathbf{1}} & 2t f_{\mathbf{q}\mathbf{0}} \\ 2t f_{\mathbf{q}\mathbf{1}} & 1 & 2t f_{\mathbf{q}\mathbf{2}} \\ 2t f_{\mathbf{q}\mathbf{0}} & 2t f_{\mathbf{q}\mathbf{2}} & 1 \end{pmatrix}, \quad t = \frac{\Omega}{\omega_0}. \quad (4.11)$$

4.2.3. Dispersión de plasmones ($\varphi = 0^\circ$)

Los puntos de alta simetría mostrados en la Fig. 4.3 b) de la zona de Brillouin son $\Gamma = (0, 0)$, $M = (\frac{\pi}{3a}, -\frac{\pi}{a\sqrt{3}})$, $K' = (\frac{2\pi}{3a}, 0)$. El espectro completo de la dispersión colectiva a lo largo de estos puntos de alta simetría considerando ($\varphi = 0^\circ$), se obtiene si se sigue el camino $\Gamma \rightarrow K' \rightarrow M \rightarrow \Gamma$. Este espectro es mostrado en la Fig. 4.5, donde las tres bandas de dispersión están determinadas por

i) A lo largo de $\Gamma \rightarrow K' \rightarrow M$

$$\frac{\lambda_1}{\omega_0}(q_x a, \theta) = \sqrt{1 - 4 \frac{\Omega}{\omega_0} \text{Cos}[q_x a]}, \quad (4.12)$$

$$\frac{\lambda_{2,3}}{\omega_0}(q_x a, \theta) = \sqrt{1 + 2 \frac{\Omega}{\omega_0} \text{Cos}[q_x a] \pm \frac{\Omega}{4\omega_0} \sqrt{\Delta(q_x a, \theta)}}, \quad (4.13)$$

donde $\Delta(q_x a, \theta) = 198 + 166 \text{Cos}[q_x a] + 32 \text{Cos}[2q_x a] - 72 \text{Cos}[2\theta] + 162 \text{Cos}[4\theta] + 162 \text{Cos}[q_x a] \text{Cos}[4\theta] - 72 \text{Cos}[q_x a] \text{Cos}[2\theta]$.

ii) A lo largo de $M \rightarrow \Gamma$

$$\frac{\lambda_1}{\omega_0}(q_y a, \theta) = \sqrt{1 - 4 \frac{\Omega}{\omega_0}}, \quad (4.14)$$

$$\frac{\lambda_{2,3}}{\omega_0}(q_y a, \theta) = \sqrt{1 + 2 \frac{\Omega}{\omega_0} \pm \frac{\sqrt{2}\Omega}{4\omega_0} \sqrt{\Xi(q_y a, \theta)}}, \quad (4.15)$$

donde $\Xi(q_y a, \theta) = 115 - 2 \text{Cos}[\sqrt{3}q_y a] \left\{ 1 - 9 \text{Cos}[2\theta] \right\}^2 - 36 \text{Cos}[2\theta] + 81 \text{Cos}[4\theta]$.

El estudio de la estructura de bandas de plasmones colectivos revela su capacidad de sintonizabilidad en función de la orientación de los momentos dipolares asociados con los plasmones de superficie localizados, ilustrando el comportamiento isotrópico de los modos plasmónicos colectivos en función de la polarización. Dependiendo de la orientación del dipolo, identificamos el desplazamiento de los puntos de Dirac en el momento (y/o) en la energía sobre la frecuencia ω_0 ($\lambda_{\mathbf{q}}^{1,2,3}/\omega_0$). Las bandas planas son no dispersivas y topológicamente triviales, lo que corresponde a estados propios totalmente

degenerados. Dado que los estados son degenerados, están fuertemente correlacionados y conducen a una mayor interacción entre la luz y las nanopartículas.

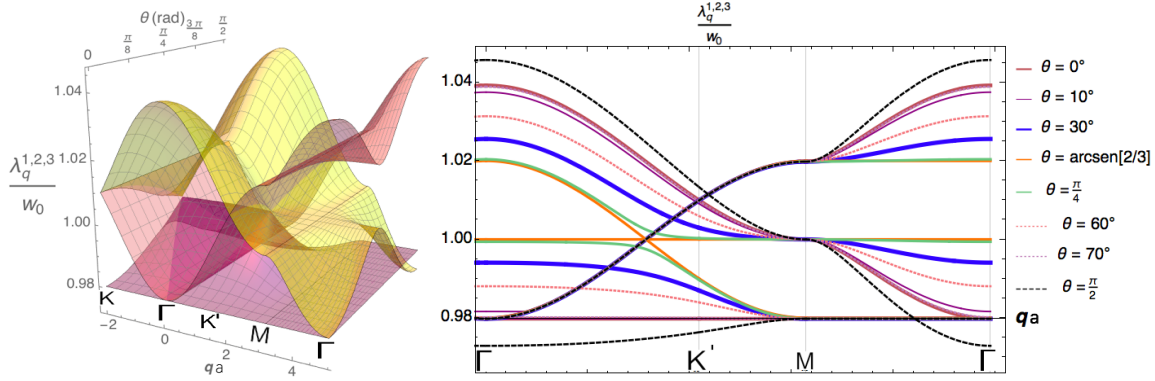


Figura 4.5: Dispersión de plasmones colectiva tridimensional y proyección bidimensional para $\varphi = 0$.

4.2.3.1. Análisis de los modos colectivos cerca del punto \mathbf{K}

Cerca del punto de Dirac \mathbf{K} , las bandas de dispersión descritas en las ecuaciones (4.12) (4.13), se analizan considerando $\mathbf{K} + a\delta\mathbf{q}$, donde $|a\delta\mathbf{q}| \ll 1$.

La dispersión alrededor del punto \mathbf{K} resulta en las tres siguientes bandas

$$\lambda_1(\mathbf{K} + (a\delta q_x, 0), \theta) \simeq \omega_0 + \Omega + \Omega\sqrt{3}a\delta q_x, \quad (4.16)$$

$$\lambda_{2,3}(\mathbf{K} + (a\delta q_x, 0), \theta) \simeq \omega_0 - \frac{\Omega}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}\Omega a\delta q_x \pm \frac{\Omega}{8}\sqrt{\Delta(\mathbf{K} + a\delta q_x, \theta)}, \quad (4.17)$$

donde $\Delta(\mathbf{K} + (a\delta q_x, 0), \theta) = 9(11 - 4\text{Cos}[2\theta] + 9\text{Cos}[4\theta]) - 3\sqrt{3}(17 - 12\text{Cos}[2\theta] + 27\text{Cos}[4\theta])a\delta q_x + \frac{3}{2}(49 - 12\text{Cos}[2\theta] + 27\text{Cos}[4\theta])a^2\delta q_x^2$.

Esto nos permite identificar el comportamiento de las tres bandas de dispersión alrededor de los puntos K en función del ángulo θ . La primera ecuación es claramente lineal en δq_x , la segunda, por el contrario, depende del valor de $\Delta(\mathbf{K}, \theta)$. En particular, cuando $\theta = 0$ la función Δ es aproximada como $\Delta(\mathbf{K} + a\delta q_x, 0) \approx 144$.

4.2.4. Dispersión colectiva de plasmones en el modo $0 < \theta \leq \pi/2, \varphi = 0^\circ$. Armchair

Los parámetros de interacción están relacionados con los ángulos de polarización y están descritos con la función $C_j = 1 - 3\text{sen}^2\theta\text{sen}^2[\varphi - \frac{\pi}{3}(j-1)]$. Las dispersiones para diferentes polarizaciones de θ , y $\varphi = 0^\circ$ están descritas en la Fig. 4.6.

Se observa cómo es posible modificar las bandas de dispersión colectiva cambiando la dirección de la polarización. Fig. 4.6 a), b) y c) muestran los modos colectivos en función de $\theta = 30^\circ$, $\theta = \pi/2$, $\theta = 60^\circ$ y $\theta = \arcsen[2/3]$. La Fig. 4.6 d) para $C_2 = C_0 = 0$ ilustra que existe una triple degeneración de las dos bandas y una banda plana, en dos líneas de cruce. En este último caso, dos enlaces entre partículas de las sub-redes son completamente inefectivos, es decir, las dispersiones son completamente invariantes y constantes en $q_y a$.

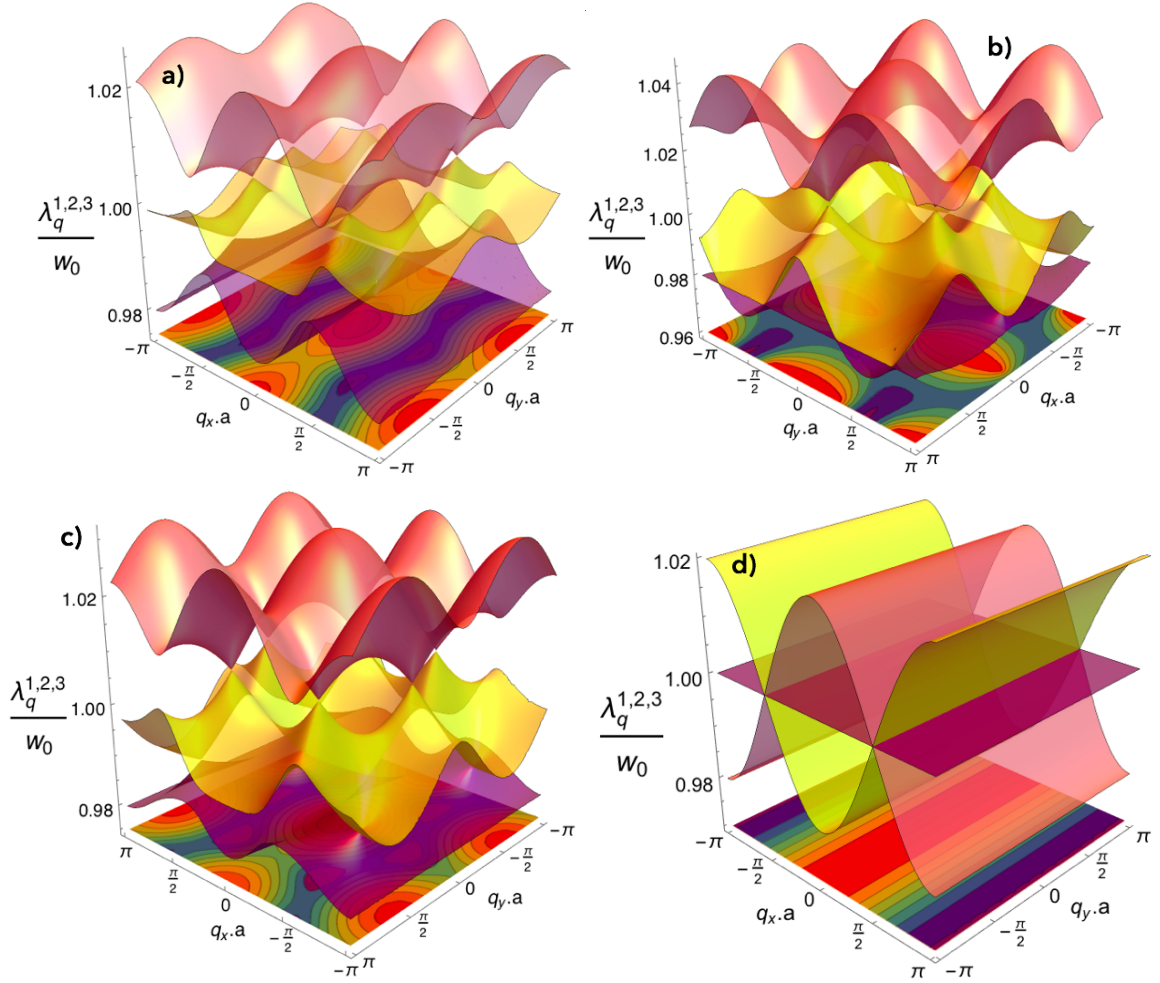


Figura 4.6: Dispersión colectiva de plasmones para: a) $\theta = 30^\circ$, $C_1 = 1, C_2 = C_0 = \frac{7}{16}$. b) $\theta = \pi/2$, $C_1 = 1, C_2 = C_0 = -\frac{5}{4}$. c) $\theta = 60^\circ$, $C_1 = 1, C_2 = C_0 = -11/16$. d) $\theta = \arcsen[2/3]$, $C_1 = 1, C_2 = C_0 = 0$.

La energía entre la frecuencia ω_0 de los CPs de la banda plana puede ser desplazada y puede obtenerse a partir de una configuración particular. La aparición de gaps entre las bandas en las redes Kagomé solo son inducidos debido a la interacción espín órbita (que no hemos incluido). En particular, la degeneración de estados en los puntos de Dirac se origina por una protección topológica causada por

la simetría de inversión y por la inversión temporal, pero en la red Kagomé es imposible originar brechas de energía sin perturbar los modos de energía, por tanto, como veremos más adelante, aunque se rompa la simetría de inversión, no puede originarse ninguna transición topológica.

4.2.5. Polarización perpendicular al plano de la distribución $\theta = 0$ y $\varphi = 0^\circ$

Cuando la polarización de PSL apunta perpendicular al plano de la red ($\theta = 0$), los parámetros de interacción, $C_j = 1 - 3\text{sen}^2\theta\text{sen}^2[\varphi - \frac{\pi}{3}(j-1)]$ son todos iguales a 1, $C_1 = C_2 = C_0 = 1$.

La solución del sistema (4.10) para la dispersión colectiva, está definida por la polarización descrita por los factores de estructura $f_{\mathbf{q}i}$.

Los plasmones colectivos se obtienen simplemente diagonalizando el Hamiltoniano en el espacio de momentos resolviendo $\lambda_{\mathbf{q}}^6 - a\lambda_{\mathbf{q}}^4 + b\lambda_{\mathbf{q}}^2 + d = 0$. Los coeficientes resultan ser $a = 3\omega_0^2$, $b = 3\omega_0^4 - 16\omega_0^2\Omega^2 F(\mathbf{q}, 0)$, $d = 16\omega_0^4\Omega^2 F(\mathbf{q}, 0) - \omega_0^6 - 128\omega_0^3\Omega^3 \cos(\mathbf{q} \cdot \hat{e}_0)\cos(\mathbf{q} \cdot \hat{e}_1)\cos(\mathbf{q} \cdot \hat{e}_2) = 16\omega_0^4\Omega^2 F(\mathbf{q}, 0) - \omega_0^6 - 64\omega_0^3\Omega^3(F(\mathbf{q}, 0) - 1)$, y donde $F(\mathbf{q}, \theta = 0^\circ) \equiv F_{\mathbf{q}}$ es el factor de estructura, y se escribe $F_{\mathbf{q}i} = \sum_{i=0}^2 \cos^2(\mathbf{q} \cdot \hat{e}_i)$.

El espectro de dispersión consta de tres bandas en la primera ZB, una de ellas es una banda plana y las otras dos son dispersivas, éstas son las siguientes

$$\frac{\lambda_{1\mathbf{q}}}{\omega_0} = \sqrt{1 - 4\frac{\Omega}{\omega_0}}, \quad (4.18)$$

$$\frac{\lambda_{2\mathbf{q},3\mathbf{q}}}{\omega_0} = \sqrt{1 + 2\frac{\Omega}{\omega_0}[1 \pm \sqrt{4F_{\mathbf{q}} - 3}]}. \quad (4.19)$$

El parámetro $t = \frac{\Omega}{\omega_0}$ obedece $t \ll 1$, así la dispersión colectiva de plasmones puede ser aproximada como: $\lambda_{1\mathbf{q}} \simeq \omega_0 - 2\Omega$, $\lambda_{2\mathbf{q},3\mathbf{q}} \simeq \omega_0 + \Omega(1 \pm \sqrt{4F_{\mathbf{q}} - 3})$. La primera ZB es un hexágono con las esquinas (puntos de Dirac) identificados por: $K1 = \pm \frac{2\pi}{3a}\hat{e}_1$, $K2 = \pm \frac{2\pi}{3a}\hat{e}_2$, $K3 = \pm \frac{2\pi}{3a}\hat{e}_0$. Las bandas dispersivas son degeneradas en los puntos K y K' .

La Fig. 4.7 muestra que el comportamiento en el espacio recíproco de los modos colectivos presenta dispersión cónica, una característica típica que revela la presencia de partículas sin masa. Las dos bandas dispersivas se tocan en los puntos de Dirac (punto de transición topológica) en la ZB, y exhiben espectros de energía tipo Dirac (ver Fig. 4.7). Los conos de Dirac ocurren en la frecuencia ω_0 . De acuerdo a la ecuación (4.18), para los valores $t \geq \frac{1}{4}$, la dispersión colectiva decae como $e^{-i\omega t}$ (los modos son evanescentes), *i. e.* los modos colectivos no existen o desaparecen.

La banda plana parece tener la dispersión más baja $\lambda_{1\mathbf{q}} = 1 - 2t$ y significa que la masa efectiva (m^*) de la partícula es infinita, *i. e.* la partícula es masiva de modo que no puede moverse y, por lo tanto, no es dispersiva. Esta degeneración en los puntos de Dirac está protegida tanto por inversión temporal como por simetría de inversión. Se debe a la interferencia local de plasmones causada por la naturaleza topológica de la red del Kagomé. La banda plana puede ser aplicada a la ralentización de la luz, que es útil para el control de la velocidad de grupo, detección de alta sensibilidad y otras

aplicaciones. En la banda plana, la masa efectiva de fotones se vuelve muy pesada y su correlación tiene un papel importante.

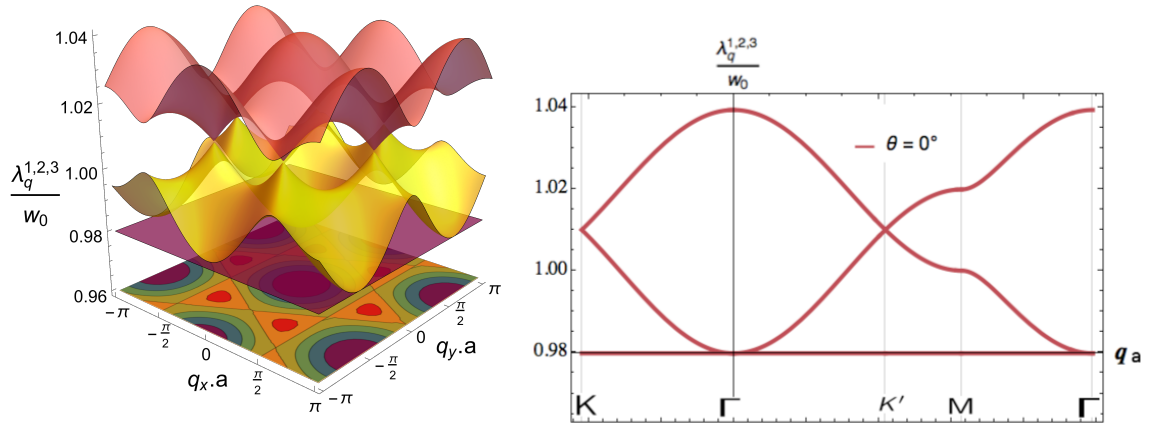


Figura 4.7: Izq: Dispersión colectiva de plasmones $\theta = 0^\circ$. Der: Estructura de bandas a lo largo de los puntos de alta simetría $K-\Gamma-K'-M-\Gamma$.

4.2.5.1. Aproximación alrededor del punto K

Ya que el parámetro $t \ll 1$, las bandas de dispersión de las ecuaciones (4.18) y (4.19) pueden aproximarse como

$$\lambda_{1\mathbf{q}} \simeq \omega_0 - 2\Omega, \quad (4.20)$$

$$\lambda_{2\mathbf{q},3\mathbf{q}} \simeq \omega_0 + \Omega \left(1 \pm \sqrt{4F_{\mathbf{q}} - 3} \right). \quad (4.21)$$

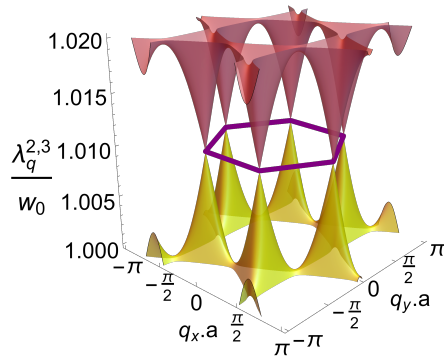


Figura 4.8: Dispersión de los modos colectivos cerca de los puntos K . Se puede notar el comportamiento lineal de las bandas cerca de estos puntos de alta simetría.

Cerca del punto \mathbf{K} (o \mathbf{K}'), el vector se puede escribir como $\mathbf{k}a = \mathbf{K}a + \mathbf{p}$, donde $|\mathbf{p}| \ll |\mathbf{K}|$. Tomando $\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a}\hat{e}_1 = \frac{2\pi}{3a}(1,0)$, $\mathbf{k}a = \mathbf{K}a + \mathbf{p}a = \frac{2\pi}{3a}(1,0)a + (p_x a, p_y a)$, con $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$, el factor de estructura se transforma como

$$F_{\mathbf{q}i} = \sum_{i=0}^2 \text{Cos}[\mathbf{q} \cdot \hat{e}_i] \quad (4.22)$$

$$= \text{Cos}^2\left(\frac{q_x a}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) + \text{cos}^2(q_x a) + \text{Cos}^2\left(\frac{q_x a}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}q_y a\right) \quad (4.23)$$

$$= \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\text{Cos}[2q_x a] + 2\text{Cos}[q_x a]\text{Cos}[p_y a] \quad (4.24)$$

$$F(\mathbf{k}a) = F(\mathbf{K}a + \mathbf{p}a) \approx \frac{3}{4} + a^2 \frac{3}{4} \mathbf{p}^2,$$

Por consiguiente, la dispersión de los plasmones colectivos se reduce a

$$\lambda_1 \simeq \omega_0 - 2\Omega, \quad (4.25)$$

$$\frac{\lambda_{2,3}}{\omega_0}(\mathbf{k}) \simeq 1 + t \pm t\left(\sqrt{3}a\mathbf{p}\right) + O[p^2] = 1 + t + v\mathbf{p} + O[p^2], \quad (4.26)$$

donde $v = \sqrt{3}a\Omega$ es la velocidad del grupo y p es el momento medido en relación con los puntos de Dirac. Los plasmones se comportan como bosones de Dirac con una relación de dispersión aproximadamente lineal (ver Fig. 4.8). Por lo tanto, a excepción de la banda plana, las dos bandas de energía dispersiva 2 y 3 son similares a las del Grafeno.

4.2.6. Dispersión colectiva de plasmones en el modo $0 < \theta \leq \pi/2$, $\varphi = \frac{\pi}{2}$. Zigzag

Podemos suponer que todos los dipolos $\mathbf{p} = -eN_e h(\mathbf{R})\hat{p}$ apuntan en la misma dirección y parametrizar su orientación como $\hat{p} = \text{sen}\theta(\text{cos}\varphi'\hat{x} + \text{sen}\varphi'\hat{y}) + \text{cos}\theta\hat{z}$.

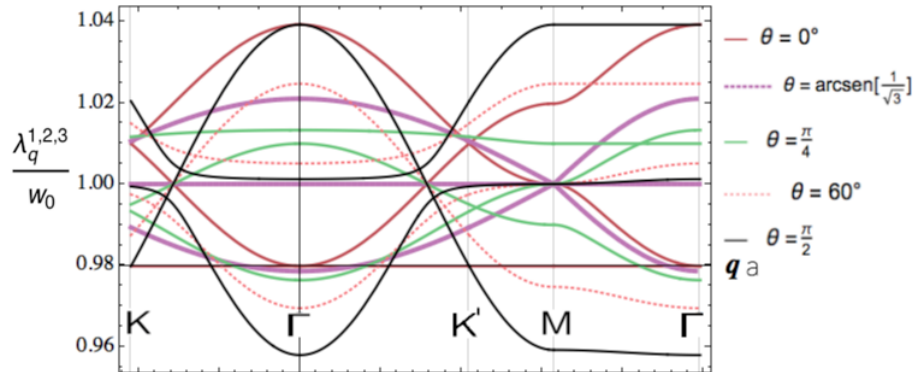


Figura 4.9: Dispersión colectiva de plasmones a lo largo de $\text{K}-\Gamma-\text{K}'-\text{M}-\Gamma$ para el modo $0 < \theta \leq \pi/2$, y $\varphi = \frac{\pi}{2}$.

Los parámetros de interacción son $C_j(\theta, \varphi = \frac{\pi}{2}) = 1 - 3\text{sen}^2\theta\text{cos}^2[\varphi' - \frac{\pi}{3}(j-1)]$, donde $j = 0, 1, 2$, donde $\varphi' = \varphi - 90^\circ$. La solución para las bandas dispersivas con $F(\mathbf{q}, \theta, \varphi = 90^\circ) = \frac{f_{q_0}^2 + f_{q_1}^2 + f_{q_2}^2}{4} = \sum_{i=0}^2 C_i^2 \text{Cos}^2[q \cdot \hat{e}_i]$. Estas bandas se ilustran en la trayectoria de los puntos de alta simetría se ilustran en la Fig. 4.9.

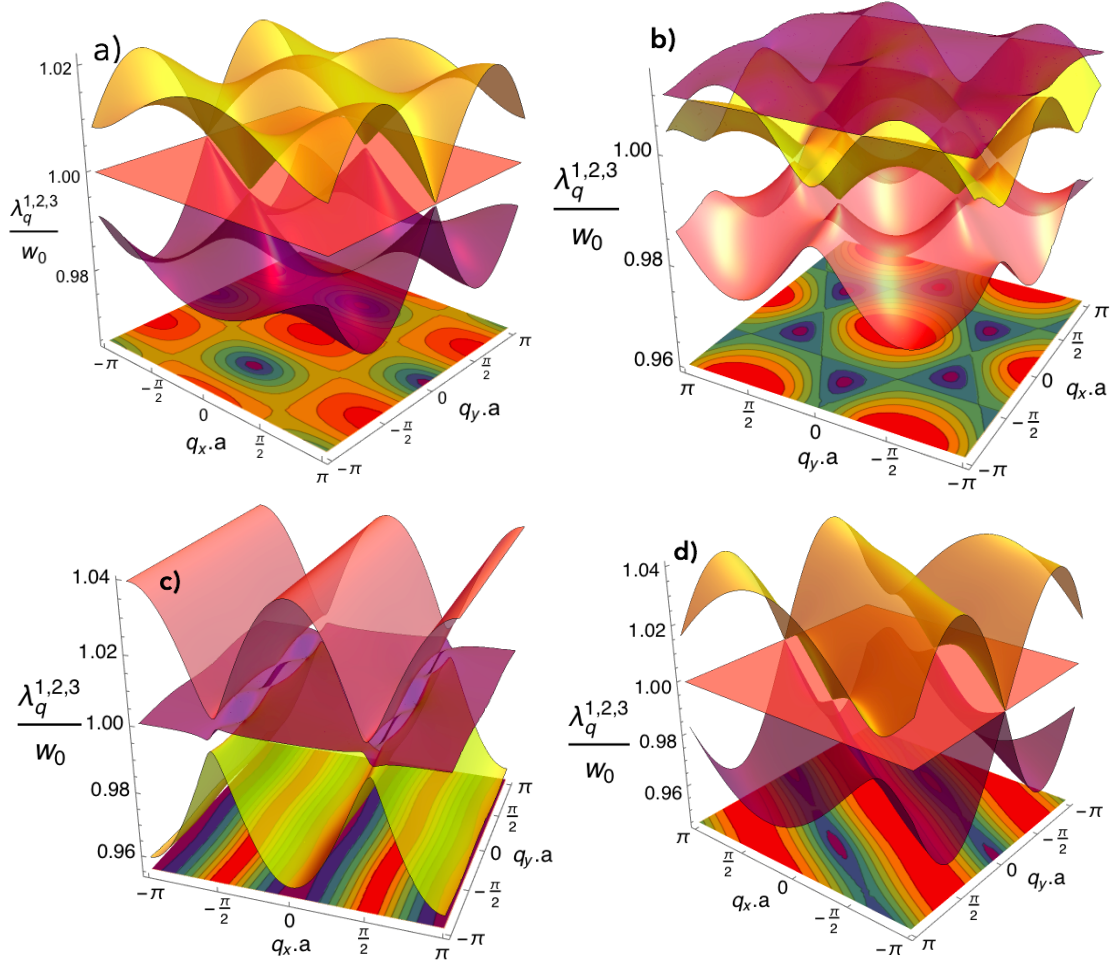


Figura 4.10: CPs para: $\varphi = 90^\circ$. a) $\theta = \arcsen[1/\sqrt{3}]$, $C_0 = C_2 = 3/4$ y $C_1 = 0$. b) $\theta = \pi/4$, $C_0 = C_2 = 7/16$ y $C_1 = 1$. c) $\theta = \pi/2$, $C_0 = C_2 = 1/4$ y $C_1 = -2$. d) $\varphi = \arccos[1/\sqrt{3}] + 90^\circ$, y $\theta = \pi/2$, $C_{0,2} = 1 - 3\text{sen}^2(\pi/6 \pm \arccos(1/\sqrt{3}))$ y $C_1 = 0$.

En la Fig. 4.10 a) $\theta = \arcsen[1/\sqrt{3}]$ el espectro consiste de tres bandas, dos de las bandas dispersivas se tocan en la banda plana que está a la mitad de ellas, comportándose como bandas dispersivas lineales en el punto M . Fig. 4.10 b) la sintonización para $\theta = \pi/4$, donde la banda que era plana, presenta perturbaciones ubicándose en la parte superior de las dos bandas, que muestran comportamiento cónico lineal alrededor de los puntos de Dirac. Fig. 4.10 c) Bandas de dispersión para polarización $\varphi = \pi/2$ y $\theta = \pi/2$, dos bandas se aproximan a líneas de cruce. La tercera banda,

muestra un comportamiento plano en todo el espacio de momentos de la ZB, sin embargo cerca de las líneas de aproximación se perturba presentando varias curvas. Fig. 4.10(d) Representa la CPs para $\varphi = \arccos[1/\sqrt{3}] + \pi/2$, y $\theta = \pi/2$. Estas figuras muestran la fuerte dependencia de los espectros respecto a la orientación de los dipolos.

4.2.6.1. Fase relativa de los dipolos

Las distribuciones de fase relativa de los momentos dipolares para diferentes puntos de alta simetría, Γ , K' y M en la primera ZB están graficados en la Fig 4.11.

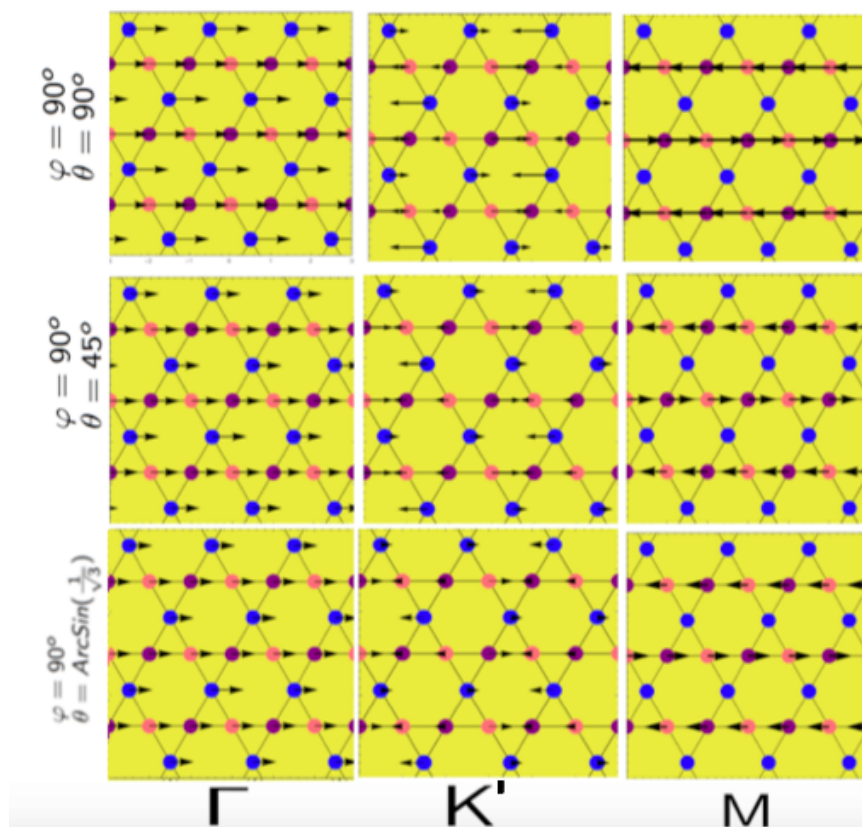


Figura 4.11: Distribución de fase de los dipolos para los modos $\varphi = 90^\circ$ y $(\theta = 90^\circ, \theta = 45^\circ, \theta = \text{Arcos}[1/\sqrt{3}])$.

La Fig. 4.11 representa la proyección en el plano $x - y$ de la fase de los dipolos en cada punto de alta simetría, es notable ver que en el punto M los dipolos son cero. En el punto Γ todos tienen momento $q_x a = q_y a = 0$ dependiendo la fase solo de la polarización de los dipolos.

4.2.7. Estructura de Kagome con simetría de inversión rota (diferentes tamaños y/o materiales)

Se ha estudiado el caso de 3 osciladores con la misma frecuencia y cómo la frecuencia de resonancia PSL depende del tamaño de partícula, la forma y el material. Las partículas en cada sub-red pueden tener diferentes frecuencias de resonancia ω_0 , si alguno de estas resonancias es desigual en alguna de las sub-redes. Este rompimiento de la simetría podría realizarse experimentalmente ya sea fabricando las 3 sub-redes de diferentes materiales o construyéndolas de diferente tamaño.

En esta sección, consideramos la red Kagomé de nanopartículas con una simetría de inversión rota, considerando que el plasmón superficial local en las sub-redes **A**, **B** y **C** tiene frecuencias de resonancia inequivalentes ω_1 (**A**, **B**) y ω_2 (**C**) (ver Fig. 4.12).

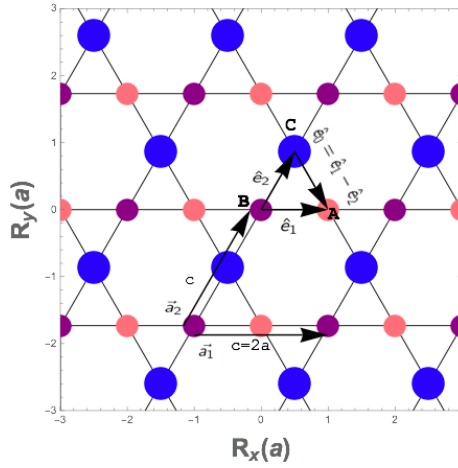


Figura 4.12: Red Kagomé infinita con inversión de simetría rota. Las sub-redes A,B tienen radio r_1 , y la sub-red C tiene radio r_2 .

Utilizamos la Hamiltoniana que describe el comportamiento general ya descrito antes para la red Kagomé $H_0 + H_{int}$

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \sum_{A,B,C} \sum_{R_S} \left[\frac{\pi_S^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega_{\omega_0}^2 h_S^2(R) \right], \\
 H_{int} &= \frac{(eN_e)^2}{\epsilon_m a^3} \sum_{R_B} \left[\left\{ h_B(R_B) h_A(R_B + \hat{e}_1) + h_B(R_B) h_A(R_B - \hat{e}_1) \right\} C_1 + \right. \\
 &\quad \left. \left\{ h_B(R_B) h_C(R_B + \hat{e}_2) + h_B(R_B) h_C(R_B - \hat{e}_2) \right\} C_2 + \right. \\
 &\quad \left. \left\{ h_A(R_B + \hat{e}_1) h_C(R_B + \hat{e}_1 + \hat{e}_0) + h_C(R_B + \hat{e}_2) h_A(R_B + \hat{e}_1) \right\} C_0 \right]. \quad (4.27)
 \end{aligned}$$

Los nuevos operadores bosónicos correspondientes son

$$a_{\mathbf{R}_A}/b_{\mathbf{R}_B} = \sqrt{\frac{M\omega_1}{2\hbar}} h_{A/B}(\mathbf{R}_{A/B}) + \frac{i\Pi_{A/B}(\mathbf{R}_{A/B})}{\sqrt{2\hbar M\omega_1}}, \quad c_{\mathbf{R}_C} = \sqrt{\frac{M\omega_2}{2\hbar}} h_C(\mathbf{R}_C) + \frac{i\Pi_C(\mathbf{R}_C)}{\sqrt{2\hbar M\omega_2}}, \quad (4.28)$$

éstos obedecen las reglas de conmutación de la ecuación (4.6).

Convirtiendo la ecuación (4.27) en función de los operadores escalera y el espacio de momento, los componentes del hamiltoniano resultan

$$H_0 = \hbar\omega_0 \sum_{\mathbf{q}} \left[a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} + c_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} \right] \quad (4.29)$$

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega' \left[\left\{ f_1 b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + f_1 b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \left\{ f_2 b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} + f_2 b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \left\{ f_0 a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} + f_0 a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \mathbf{h.c} \right], \quad (4.30)$$

donde $\Omega' = (\omega_1\omega_2/\omega_0^2)^{1/2}(r_1r_2/r^2)^{3/2}\Omega = \sqrt{\omega_1\omega_2} \left(\frac{r_1r_2}{a^2} \right)^{3/2} \frac{1+2\epsilon_m}{6\epsilon_m}$, mientras que la información de los PSL está relacionados en las funciones

$$f_{\mathbf{q}i} = \sum_{i=0}^2 C_i 2\cos[\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_i], \quad (i = 0, 1, 2), \quad (4.31)$$

siendo ω_0 la frecuencia de Mie que depende del radio de la nanopartícula de la esfera y de la densidad electrónica, por lo tanto, seguimos la misma idea que en la sección anterior, es decir, el hamiltoniano es $H = H_0 + H_{int}$, el operador de Bogoliubov es $\beta_{\mathbf{q}}^l = \omega_{\mathbf{q}}^l a_{\mathbf{q}} + x_{\mathbf{q}}^l b_{\mathbf{q}}^l + u_{\mathbf{q}}^l c_{\mathbf{q}} + y_{\mathbf{q}}^l a_{-\mathbf{q}}^\dagger + z_{\mathbf{q}}^l b_{-\mathbf{q}}^\dagger + v_{\mathbf{q}}^l c_{-\mathbf{q}}^\dagger$, con $\omega_{\mathbf{q}}$, $x_{\mathbf{q}}$, $u_{\mathbf{q}}$, $z_{\mathbf{q}}$, $y_{\mathbf{q}}$, y $v_{\mathbf{q}}$ números complejos. La hamiltoniana H es diagonal de la forma

$$H = \sum_{\mathbf{q}} \sum_l \hbar\lambda_{\mathbf{q}}^l \beta_{\mathbf{q}}^{l\dagger} \beta_{\mathbf{q}}^l. \quad (4.32)$$

La forma diagonal de la ecuación de movimiento de Heisenberg $[\beta_{\mathbf{q}}^l, H] = \hbar\lambda_{\mathbf{q}}^l \beta_{\mathbf{q}}^l$ conduce al problema del eigenvalores

$$\begin{pmatrix} \omega_1 & \Omega' f_{\mathbf{q}1} & \Omega' f_{\mathbf{q}0} & 0 & -\Omega' f_{\mathbf{q}1} & -\Omega' f_{\mathbf{q}0} \\ \Omega' f_{\mathbf{q}1} & \omega_1 & \Omega' f_{\mathbf{q}2} & -\Omega' f_{\mathbf{q}1} & 0 & -\Omega' f_{\mathbf{q}2} \\ \Omega' f_{\mathbf{q}0} & \Omega' f_{\mathbf{q}2} & \omega_2 & -\Omega' f_{\mathbf{q}0} & -\Omega' f_{\mathbf{q}2} & 0 \\ 0 & \Omega' f_{\mathbf{q}1} & \Omega' f_{\mathbf{q}0} & -\omega_1 & -\Omega' f_{\mathbf{q}1} & -\Omega' f_{\mathbf{q}0} \\ \Omega' f_{\mathbf{q}1} & 0 & \Omega' f_{\mathbf{q}2} & -\Omega' f_{\mathbf{q}1} & -\omega_1 & -\Omega' f_{\mathbf{q}2} \\ \Omega' f_{\mathbf{q}0} & \Omega' f_{\mathbf{q}2} & 0 & -\Omega' f_{\mathbf{q}0} & -\Omega' f_{\mathbf{q}2} & -\omega_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}^l = \lambda_{\mathbf{q}}^l \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}^l,$$

Las soluciones de los CPs, derivan de la solución de la ecuación polinómica: $\lambda_{\mathbf{q}}^6 - a\lambda_{\mathbf{q}}^4 + b\lambda_{\mathbf{q}}^2 + d = 0$, donde los coeficientes son: $a = 2\omega_1^2 + \omega_2^2$, $b = \omega_1^4 + 2\omega_1^2\omega_2^2 - 4(f_{\mathbf{q}0}^2 + f_{\mathbf{q}1}^2)\Omega'^2\omega_1\omega_2 - 4f_{\mathbf{q}1}^2\Omega'^2\omega_1^2$, $d = -\omega_1^4\omega_2^2 + 4f_{\mathbf{q}0}^2\Omega'^2\omega_1^3\omega_2 + 4\Omega'^2(f_{\mathbf{q}1}^2\omega_1^2\omega_2^2 + f_2^2\omega_1^3\omega_2) - 16f_{\mathbf{q}0}f_{\mathbf{q}1}f_{\mathbf{q}2}\Omega'^3\omega_1^2\omega_2$, los factores de estructura bajo esta condición $f_{\mathbf{q}i} = C_i 2\cos[\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_i]$, donde $\hat{\mathbf{e}}_1 = a(1, 0)$, $\hat{\mathbf{e}}_2 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$ and $\hat{\mathbf{e}}_0 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3})$, son los vectores a los vecinos más cercanos en la celda unidad. Se define el parámetro d en función de las resonancias ω_1 y ω_2 : $d = \frac{\delta\omega}{\bar{\omega}} = \frac{\omega_1 - \omega_2}{(\omega_1 + \omega_2)/2}$.

4.2.7.1. Bandas de dispersión de CPs en el camino $K - \Gamma - K' - M - \Gamma$ ($\varphi = 0$)

Las Figs. 4.13 y 4.14 ilustran las bandas de dispersión con inversión de simetría de acuerdo a las ecuaciones que se escriben arriba. Se observa que las bandas son simétricas respecto a cada valor de energía/ ω_0 que pasa por cada punto de Dirac. Éstos además se desplazan a valores más altos de momentos. Las bandas planas para $d > 0$ son deformadas para θ diferente de cero.

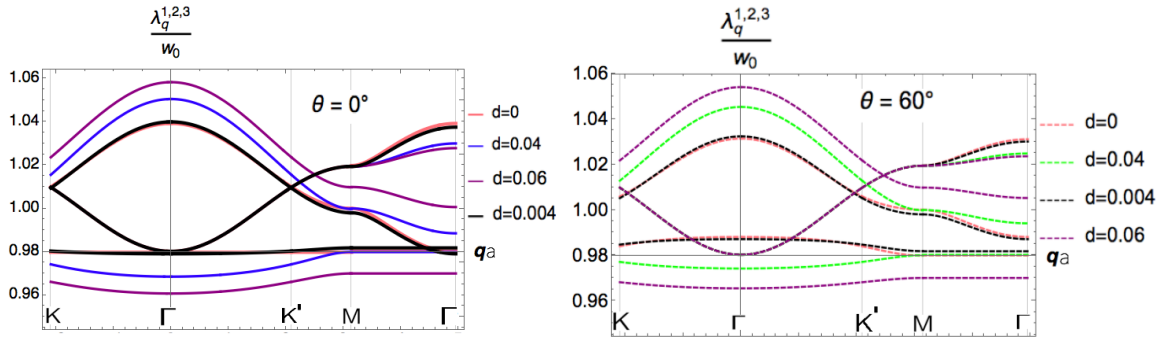


Figura 4.13: Dispersión colectiva de la trayectoria $K - \Gamma - K' - M - \Gamma$ en función del parámetro d . Izq. $\theta = 0$. Der. $\theta = 60^\circ$

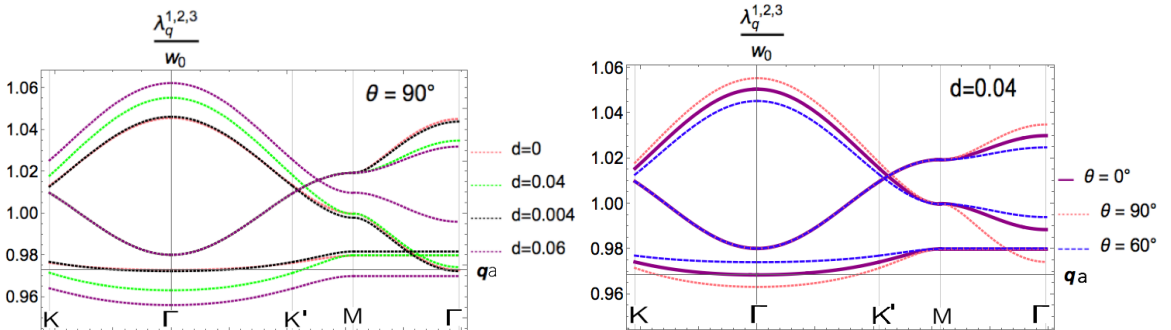


Figura 4.14: Dispersión colectiva de la trayectoria $K - \Gamma - K' - M - \Gamma$: Izq. $\theta = 90$. Der. en función del parámetro d y $\theta = 0, 90^\circ$ y 60°

El comportamiento que corresponde a una diferencia de frecuencias cada vez mayor ($d > 0$), afecta al desplazamiento del punto de Dirac K de los CPs en cantidades de energía/ ω_0 y momento mayores. El caso simétrico corresponde al valor $d = 0$. Para cualquier valor d , una de las bandas de dispersión permanece totalmente inalterada (constante) en la región $K - \Gamma - K' - M$, sin embargo en el camino $M - \Gamma$ se muestra dependiente de la polarización θ . Las Figs. 4.13 y 4.14 son obtenidas eligiendo adecuadamente los siguientes parámetros en

función de las frecuencias de los PSL (ω_1 y ω_2): $\delta\omega = \omega_1 - \omega_2$, $\varpi = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}$, $d = \frac{\delta\omega}{\varpi}$, ($t = \frac{\Omega'}{\varpi}$), donde $t_2 - t_1 = \Omega'(\omega_1 - \omega_2)/\omega_1\omega_2$ con $t_1 = t^2 t_1 / (t t_1 (d + 2) - t^2)$.

Las tres bandas de dispersión colectiva en las trayectorias se expresan

$$\begin{aligned}
\lambda_1(q_y a, \theta) &= \omega_1 \sqrt{1 - 4 \frac{\Omega'}{\omega_1}}, \\
\lambda_1(q_x, \theta) &= \omega_1 \sqrt{1 - 4 \frac{\Omega'}{\omega_1} \text{Cos}[q_x]}, \\
\frac{\lambda_{2,3}}{\varpi}(q_y a, \theta) &= \sqrt{\left(1 + \frac{d^2}{4}\right) + 2\left(1 + \frac{d}{2}\right)t \pm \sqrt{d^2 + 4dt\left(1 + \frac{d}{2}\right) + 4t^2\left(1 + \frac{d}{2}\right)^2 +}} \\
&\quad \frac{83}{8}\left(1 - \frac{d^2}{4}\right)t^2 + \frac{1}{4}\left(1 - \frac{d^2}{4}\right)t^2 \text{cos}[\sqrt{3}q_y a] \left(1 - 9\text{cos}[2\theta]\right)^2 + \frac{9}{8}t^2\left(1 - \frac{d^2}{4}\right) \left(-4\text{cos}[2\theta] + 9\text{cos}[4\theta]\right)}, \\
\frac{\lambda_{2,3}}{\varpi}(q_x, \theta) &= \sqrt{\left(1 + \frac{d^2}{4}\right) + 2t\left(1 + \frac{d}{2}\right)\text{cos}[q_x a] \pm \sqrt{d^2 + \frac{83}{8}t^2\left(1 - \frac{d^2}{4}\right)(1 - \text{cos}[q_x a])}} \\
&\quad -4td\left(1 - \frac{d}{2}\right)\text{cos}[q_x a] + 4t^2\left(1 + \frac{d}{2}\right)^2 \text{cos}[q_x a]^2 + t^2\left(1 - \frac{d^2}{4}\right)\text{sen}[q_x a/2]^2 \left(-9\text{cos}[2\theta] + \frac{81}{4}\text{cos}[4\theta]\right)}.
\end{aligned} \tag{4.33}$$

4.2.8. Sigüientes vecinos más cercanos (nanoesferas idénticas)

Hasta este punto, en los cálculos de la dispersión colectiva (CPs) solo hemos considerado la interacción entre los vecinos más cercanos. Sin embargo, como la interacción dipolo-dipolo decae como el inverso del cubo de la distancia entre partículas, extendemos nuestros resultados para estudiar los efectos de las interacciones entre las nanoesferas con los sigüientes vecinos más cercanos. Los vectores de enlace con los segundos vecinos más cercanos entre las sub-redes son: $\hat{e}_1^{(2)} = a(0, \sqrt{3})$, $\hat{e}_2^{(2)} = \frac{a}{2}(3, -\sqrt{3})$ and $\hat{e}_3^{(2)} = \frac{a}{2}(3, \sqrt{3})$.

Por lo tanto, añadiendo los sigüientes vecinos más cercanos a la Hamiltoniana H_{int} ante-

riormente calculada (ecuación 4.4), la interacción total es

$$\begin{aligned}
 H_{int}^{TOTAL} = & \frac{(eN_e)^2}{\epsilon_m a^3} \sum_{R_B} \left[\left\{ h_B(R_B) h_A(R_B + \hat{e}_1) + h_B(R_B) h_A(R_B - \hat{e}_1) \right\} C_1 \right. \\
 & + \left\{ h_B(R_B) h_C(R_B + \hat{e}_2) + h_B(R_B) h_C(R_B - \hat{e}_2) \right\} C_2 \\
 & + \left. \left\{ h_A(R_B + \hat{e}_1) h_C(R_B + \hat{e}_1 + \hat{e}_0) + h_C(R_B + \hat{e}_2) h_A(R_B + \hat{e}_1) \right\} C_0 \right] + \\
 & \frac{(eN_e)^2}{3\sqrt{3}\epsilon_m a^3} \sum_{R_B} \left[\left\{ h_B(R_B) h_A(R_B + \hat{e}_1^{(2)}) + h_B(R_B) h_A(R_B - \hat{e}_1^{(2)}) \right\} M_1 + \right. \\
 & \left. \left\{ h_B(R_B) h_C(R_B + \hat{e}_2^{(2)}) + h_B(R_B) h_C(R_B - \hat{e}_2^{(2)}) \right\} M_2 \right. \\
 & \left. + \left\{ h_A(R_B + \hat{e}_1) h_C(R_B + \hat{e}_1 + \hat{e}_3^{(2)}) + h_C(R_B - \hat{e}_3^{(2)}) h_A(R_B + \hat{e}_1) \right\} M_3 \right], \quad (4.34)
 \end{aligned}$$

donde $M_j = 1 - 3\text{sen}^2\theta\text{cos}^2[\varphi + \frac{2\pi}{3}(j-1)]$ ($j = 1, 2, 3$).

Usando los operadores bosónicos de la ecuación (4.5), la hamiltoniana se transforma a

$$H_{int}^{TOTAL} = \frac{\hbar\Omega}{3\sqrt{3}} \sum_{\mathbf{q}} \left[\left\{ f'_{\mathbf{q}1} b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + f'_{\mathbf{q}1} b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \left\{ f'_{\mathbf{q}2} b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} + f'_{\mathbf{q}2} b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \left\{ f'_{\mathbf{q}3} a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} + f'_{\mathbf{q}3} a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \right\} + \text{h.c.} \right] \quad (4.35)$$

Las funciones que definen el factor de estructura son: $f'_{\mathbf{q}i} = M_i \cdot 2\text{cos}[\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_i^{(2)}]$, $i = 1, 2, 3$,

Por lo tanto

$$\begin{aligned}
 H_{int}^{TOTAL} = & H_{int} + H_{int}^{(2)} \\
 = & \hbar\Omega \sum_{\mathbf{q}} \left[b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \left(f_{\mathbf{q}1} + \frac{f'_{\mathbf{q}1}}{3\sqrt{3}} \right) + b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}}^\dagger \left(f_{\mathbf{q}1} + \frac{f'_{\mathbf{q}1}}{3\sqrt{3}} \right) + b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} \left(f_{\mathbf{q}2} + \frac{f'_{\mathbf{q}2}}{3\sqrt{3}} \right) \right. \\
 & \left. + b_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \left(f_{\mathbf{q}2} + \frac{f'_{\mathbf{q}2}}{3\sqrt{3}} \right) + a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{q}} \left(f_{\mathbf{q}0} + \frac{f'_{\mathbf{q}3}}{3\sqrt{3}} \right) + a_{\mathbf{q}}^\dagger c_{-\mathbf{q}}^\dagger \left(f_{\mathbf{q}0} + \frac{f'_{\mathbf{q}3}}{3\sqrt{3}} \right) + \text{h.c.} \right]. \quad (4.36)
 \end{aligned}$$

Las funciones de estructura completos son: $F_{\mathbf{q}1} = f_{\mathbf{q}1} + \frac{f'_{\mathbf{q}1}}{3\sqrt{3}}$, $F_{\mathbf{q}2} = f_{\mathbf{q}2} + \frac{f'_{\mathbf{q}2}}{3\sqrt{3}}$, $F_{\mathbf{q}0} = f_{\mathbf{q}0} + \frac{f'_{\mathbf{q}3}}{3\sqrt{3}}$. El problema se reduce a resolver la ecuación de movimiento de Heisenberg

$$\begin{pmatrix} \omega_0 & \Omega F_{\mathbf{q}1} & \Omega F_{\mathbf{q}0} & 0 & -\Omega F_{\mathbf{q}1} & -\Omega F_{\mathbf{q}0} \\ \Omega F_{\mathbf{q}1} & \omega_0 & \Omega F_{\mathbf{q}2} & -\Omega F_{\mathbf{q}1} & 0 & -\Omega F_{\mathbf{q}2} \\ \Omega F_{\mathbf{q}0} & \Omega F_{\mathbf{q}2} & \omega_0 & -\Omega F_{\mathbf{q}0} & -\Omega F_{\mathbf{q}2} & 0 \\ 0 & \Omega F_{\mathbf{q}1} & \Omega F_{\mathbf{q}0} & -\omega_0 & -\Omega F_{\mathbf{q}1} & -\Omega F_{\mathbf{q}0} \\ \Omega F_{\mathbf{q}1} & 0 & \Omega F_{\mathbf{q}2} & -\Omega F_{\mathbf{q}1} & -\omega_0 & -\Omega F_{\mathbf{q}2} \\ \Omega F_{\mathbf{q}0} & \Omega F_{\mathbf{q}2} & 0 & -\Omega F_{\mathbf{q}0} & -\Omega F_{\mathbf{q}2} & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}^l = \lambda_{\mathbf{q}}^l \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}^l. \quad (4.37)$$

4.2.8.1. Polarización perpendicular al plano de la distribución $\theta = \varphi = 0^\circ$

La solución de la dispersión colectiva para la polarización con la última definición de las funciones de estructura: $C_1 = M_1 = C_2 = M_2 = C_0 = 1 = M_3$ son: $F_{\mathbf{q}\mathbf{1}} = 2\text{Cos}[qx] + 2\frac{\text{cos}[\sqrt{3}qy]}{3\sqrt{3}}$, esto es $F_{\mathbf{q}\mathbf{2}} = 2\text{Cos}[\frac{1}{2}(qx + \sqrt{3}qy)] + \frac{2\text{Cos}[\frac{1}{2}(3qx - \sqrt{3}qy)]}{3\sqrt{3}}$, $F_{\mathbf{q}\mathbf{0}} = 2\text{Cos}[\frac{1}{2}(qx - \sqrt{3}qy)] + \frac{2\text{Cos}[\frac{1}{2}(3qx + \sqrt{3}qy)]}{3\sqrt{3}}$. La matriz del sistema [4.37](#) equivalente, utilizando la ecuación [\(4.11\)](#), es

$$\begin{pmatrix} \omega_0^2 - \lambda^2 & 2\omega_0\Omega F_{\mathbf{q}\mathbf{1}} & 2\omega_0\Omega F_{\mathbf{q}\mathbf{0}} \\ 2\omega_0\Omega F_{\mathbf{q}\mathbf{1}} & \omega_0^2 - \lambda^2 & 2\omega_0\Omega F_{\mathbf{q}\mathbf{2}} \\ 2\omega_0\Omega F_{\mathbf{q}\mathbf{0}} & 2\omega_0\Omega F_{\mathbf{q}\mathbf{2}} & \omega_0^2 - \lambda^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\lambda_{1\mathbf{q}}}{\omega_0} \\ \frac{\lambda_{2\mathbf{q}}}{\omega_0} \\ \frac{\lambda_{3\mathbf{q}}}{\omega_0} \end{pmatrix} = 0$$

Los CPs, se deducen de la solución de la ecuación polinómica $\lambda_{\mathbf{q}}^6 - a'\lambda_{\mathbf{q}}^4 + b'\lambda_{\mathbf{q}}^2 + d' = 0$. Los coeficientes son: $a' = 3\omega_0^2$, $b' = 3\omega_0^4 - 16\omega_0^2\Omega^2 G_{\mathbf{q}}$, $d' = 16\omega_0^4\Omega^2 G_{\mathbf{q}} - \omega_0^6 - 16\omega_0^3\Omega^3 \{F_{\mathbf{q}\mathbf{0}} \cdot F_{\mathbf{q}\mathbf{1}} \cdot F_{\mathbf{q}\mathbf{2}}\}$, $\hat{e}_3^{(2)} = \hat{e}_1^{(2)} + \hat{e}_2^{(2)}$, el factor de estructura completo $\sum_{i=0}^2 F_{\mathbf{q}i}$ se expresa en función de los ángulos de la polarización de los dipolos ($\theta = 0^\circ$ y $\varphi = 0^\circ$)

$$G_{\mathbf{q}} = \left(\left[\cos(\mathbf{q} \cdot \hat{e}_0) + \frac{1}{3\sqrt{3}} \cos[\mathbf{q} \cdot \hat{e}_3^{(2)}] \right]^2 + \left[\cos(\mathbf{q} \cdot \hat{e}_1) + \frac{1}{3\sqrt{3}} \cos[\mathbf{q} \cdot \hat{e}_1^{(2)}] \right]^2 + \left[\cos(\mathbf{q} \cdot \hat{e}_2) + \frac{1}{3\sqrt{3}} \cos[\mathbf{q} \cdot \hat{e}_2^{(2)}] \right]^2 \right). \quad (4.38)$$

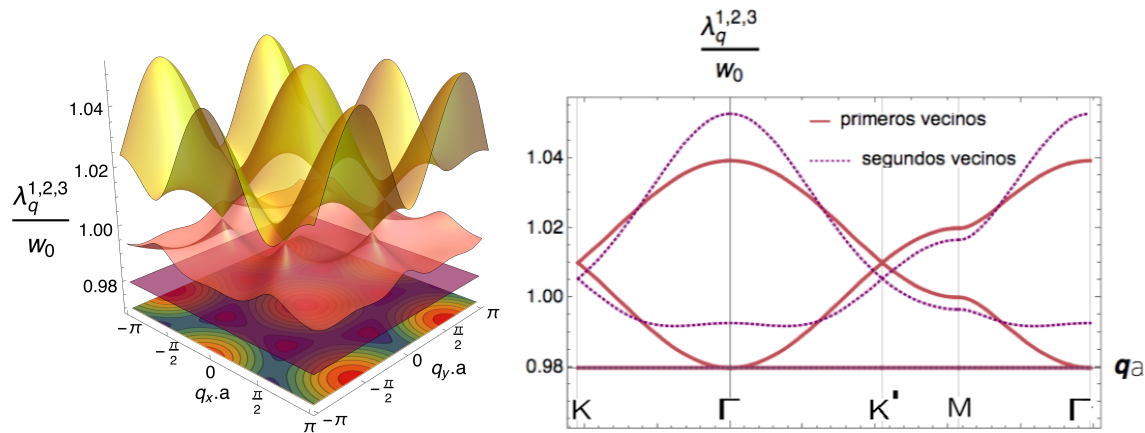


Figura 4.15: Izq. Dispersión colectiva incluyendo interacciones con segundos vecinos para polarización de PSL $\theta = 0$ y $\varphi = 0$. Der. Bandas de dispersión colectiva a lo largo de $K - \Gamma - K' - M - \Gamma'$. Curvas rosas indican la dispersión que incluye solo interacciones de primeros vecinos, curvas violetas incluyen interacciones de primeros más segundos vecinos.

El espectro de estructura consta de tres bandas en la primera zona de Brillouin

$$\frac{\lambda_{1\mathbf{q}}}{\omega_0} = \sqrt{1 - 4\frac{\Omega}{\omega_0}}, \quad (4.39)$$

$$\frac{\lambda_{2,3\mathbf{q}}}{\omega_0} = \sqrt{1 + 2\frac{\Omega}{\omega_0} [1 \pm \sqrt{4F_{\mathbf{q}} - 3}] + 2\frac{\Omega}{\omega_0} [G_{\mathbf{q}} - F_{\mathbf{q}}]}, \quad (4.40)$$

donde $F(\mathbf{q}, \theta = 0^\circ) \equiv F_{\mathbf{q}}$ se definió en la sección 4.2.5. Desde que $\frac{\Omega}{\omega_0} \ll 1$ la dispersión CPs de las ecuaciones (4.39) y (4.40) puede aproximarse como $\lambda_{1\mathbf{q}} \approx \omega_0 - 2\Omega$, y $\lambda_{2,3\mathbf{q}} \approx \omega_0 + \Omega[1 \pm \sqrt{4F_{\mathbf{q}} - 3}] + \Omega[G_{\mathbf{q}} - F_{\mathbf{q}}]$.

En la Fig. 4.15 se puede observar la interacción de segundos vecinos puede aumentar o disminuir la energía de los modos. Esto se debe a que la fuerza de acoplamiento entre partículas se reduce con la distancia, y las partículas vecinas siguientes se separan con distancias cada vez mayores. Por lo tanto, uno esperaría que después de incluir un cierto número de interacciones vecinas en la expresión, llegará un punto en el que la siguiente contribución sea insignificante. En la Fig. 4.15 se ilustra que los modos de CP representados en la Fig. 4.7 se modifican ligeramente por las interacciones más allá de los vecinos más cercanos, esto se debe a que solo el efecto de los vecinos más cercanos capta la Física relevante del problema.

4.3. Grafeno artificial

El hallazgo en el Grafeno de los llamados electrones de Dirac generó un gran interés en la investigación de materiales bidimensionales. En éstos, la aplicación de deformaciones puede ser un mecanismo para adecuar la propiedades físicas para aplicaciones específicas [92].

La interacción de electrones entre los átomos vecinos en el Grafeno produce un espectro característico originado por la presencia de cuasipartículas de Dirac fermiónicas sin masa. Estos fermiones pseudo-relativistas de Dirac tienen una quiralidad asociada que conduce a varias de las notables propiedades del Grafeno.

En el Grafeno, el espectro de Dirac se origina por la interacción de los estados electrónicos confinados entre vecinos más cercanos. Los puntos de Dirac aparecen no solo en las bandas electrónicas del Grafeno, sino también pueden emerger en las relaciones de dispersión de los modos colectivos que se propagan en materiales con la misma geometría como el Grafeno artificial. Algunos otros ejemplos de estos arreglos con geometría *honeycomb* que exhiben puntos de Dirac en la dispersión de bandas se pueden mencionar: Ondas acústicas, átomos

fríos, cristales fotónicos (bidimensionales y tridimensionales), semiconductores y plasmones en partículas metálicas. Su aparición tiene propiedades de simetría importantes, que ofrece notables propiedades electrónicas cerca de los vértices del hexágono de la zona de Brillouin como: Tunelamiento Klein, *Trembling motion*, refracción negativa.

4.3.1. Plasmones en red panal

La estructura hexagonal o red panal (ver Fig. 4.16) se compone por dos sub-redes hexagonales inequivalentes, denotadas por **A** y **B**, con separación idéntica entre vecinos para todos los enlaces partícula-partícula.

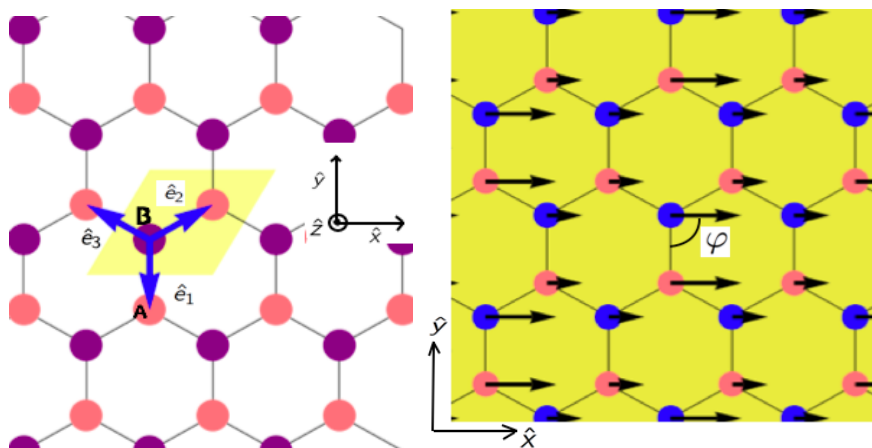


Figura 4.16: Izq. Estructura *honeycomb* con constante de red a , que consta de dos sub-redes, etiquetadas como **A** y **B**, conectadas en cada celda primitiva (amarillo) por los vectores entre vecinos más cercanos: $\hat{e}_1 = a(0, -1)$, $\hat{e}_2 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 1)$ y $\hat{e}_3 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 1)$. Der. Red *honeycomb* infinita de nanopartículas metálicas con momentos dipolares oscilatorios (Se muestra el ángulo φ en el plano).

Un material creado por una red infinita bidimensional con estructura panal de nanopartículas metálicas, presenta un espectro de Dirac para una configuración particular que puede controlarse artificialmente. Un caso análogo se presenta cuando los bordes están presentes, en donde se reportan modos guiados en el espectro de bandas. Los estados de borde proporcionan canales de transporte adicionales distintos de los estados de bulto, que incluso pueden conducir a una guía de onda en una sola dirección [93,94].

Las redes artificiales de Grafeno ofrecen una plataforma para estudiar el espectro de cuasipartículas, átomos y fotones de Dirac sin masa, así como sus fases topológicas. El Grafeno artificial puede crearse experimentalmente usando técnicas como: nanopatrones autoensam-

blado molecular de redes en medios dieléctricos. Las principales motivaciones para el estudio de estos materiales son: i) El diseño y control del tunelamiento de electrones, átomos, fotones y plasmones, ii) El acceso a parámetros que no se alcanzan en el Grafeno natural, iii) el acoplamiento spín-órbita fuerte (*SO*) que no se presenta en el Grafeno, pero sí en átomos fríos de redes ópticas *honeycomb* donde se reporta el efecto *SO* a escalas de tiempo de cientos de milisegundos [95]^{XII}, iv) la interacción entre partículas puede ser controlada, así que uno puede cambiar continuamente entre débil y fuerte. Específicamente, las redes plasmónicas de nanopartículas metálicas son un puente para la realización de metamateriales que pueden ser controlados externamente, donde la radiación electromagnética puede ser transportada de manera efectiva por los modos colectivos.

4.3.2. Arreglo de nanopartículas

Continuando con las condiciones descritas en la sección 4.1.1, se tiene que la Hamiltoniana $H = H_0 + H_{int}$ de las interacciones dipolares entre plasmones de superficie localizados en diferentes nanopartículas, es un sistema de osciladores acoplados

$$H_0 = \sum_{A,B} \sum_{R_S} \left[\frac{\pi_S^2}{2M} + \frac{M}{2} \omega_{\omega_0}^2 h_S^2(R) \right] \quad (4.41)$$

que describe a los PSL y

$$H_{int} = \frac{(eN_e)^2}{\epsilon_m a^3} \sum_{R_B} \sum_j^3 C_j h_B(R_B) h_A(R_B + \hat{e}_j), \quad (4.42)$$

determina las interacciones de los PSL. Por lo tanto, el sistema bajo el uso de los operadores escalera bosónicos $a_{\mathbf{R}}$ y $b_{\mathbf{R}}$ definidos en la ecuación (4.5), conduce a las siguientes componentes del Hamiltoniano en el espacio de momentos

$$H_0 = \hbar\omega_0 \sum_{\mathbf{q}} \left[a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \right] \quad (4.43)$$

y

$$H_{int} = \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega \left\{ f_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} + f_{\mathbf{q}}^* a_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \right\} + \sum_{\mathbf{q}} \hbar\Omega \left\{ f_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger a_{-\mathbf{q}}^\dagger + f_{-\mathbf{q}}^* a_{-\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}} \right\}, \quad (4.44)$$

^{XII} Los resultados manifiestan que las redes de nanopartículas plasmónicas pueden utilizarse para observar nuevos tipos de acoplamiento espín-órbita y por lo tanto, estados topológicos que proporcionan un enfoque eficiente para el diseño de dichos sistemas artificiales.

donde a diferencia del caso de la red Kagomé, $C_j = 1 - 3\text{sen}^2\theta\text{cos}^2[\varphi - \frac{2\pi}{3}(j-1)]$ ($j = 1, 2, 3$) son las funciones de polarización, θ y φ definen el ángulo de polarización de los dipolos. La información sobre la polarización del PSL está codificada en las funciones $f_{\mathbf{q}} = \sum_{j=1}^3 C_j \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{e}_j)$.

Para encontrar los modos normales del sistema, es necesario introducir el operador bosónico $\beta_{\mathbf{q}}^{\pm} = \omega_{\mathbf{q}}^{\pm} a_{\mathbf{q}} + x_{\mathbf{q}}^{\pm} b_{\mathbf{q}} + y_{\mathbf{q}}^{\pm} a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + z_{\mathbf{q}}^{\pm} b_{-\mathbf{q}}^{\dagger}$ e imponer que el hamiltoniano $H = H_0 + H_{int}$ sea diagonal en la nueva base, $H = \sum_{\mathbf{q}} \hbar \left(\omega_{\mathbf{q}}^{+} \beta_{\mathbf{q}}^{+\dagger} \beta_{\mathbf{q}}^{+} + \omega_{\mathbf{q}}^{-} \beta_{\mathbf{q}}^{-\dagger} \beta_{\mathbf{q}}^{-} \right)$. Esta expresión es análoga al mismo problema resuelto utilizando enlace fuerte.

La ecuación de movimiento de Heisenberg, $[\beta_{\mathbf{q}}^{\pm}, H] = \hbar \lambda_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{q}}$, conduce al siguiente problema de eigenvalores

$$\begin{pmatrix} \omega_0 & \Omega f_{\mathbf{q}} & 0 & -\Omega f_{\mathbf{q}} \\ \Omega f_{\mathbf{q}}^* & \omega_0 & -\Omega f_{\mathbf{q}}^* & 0 \\ 0 & \Omega f_{\mathbf{q}} & -\omega_0 & -\Omega f_{\mathbf{q}} \\ \Omega f_{\mathbf{q}}^* & 0 & -\Omega f_{\mathbf{q}}^* & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ x_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ y_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ z_{\mathbf{q}}^{\pm} \end{pmatrix} = \omega^{\pm} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ x_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ y_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ z_{\mathbf{q}}^{\pm} \end{pmatrix}, \quad (4.45)$$

donde las relaciones de dispersión de los modos CPs, resolviendo el sistema, anterior son

$$\omega_{\mathbf{q}}^{\pm} = \omega_0 \sqrt{1 \pm 2 \frac{\Omega}{\omega_0} |f_{\mathbf{q}}|}, \quad (4.46)$$

como $\Omega \ll \omega_0$, la ecuación se puede reducir a $\omega^{\pm} \simeq \omega_0 \pm \Omega |f_{\mathbf{q}}|$. Las relaciones de dispersión de los modos colectivos de la ecuación (4.46) están graficadas en la Fig. 4.17

El caso especial en el que la polarización de los PLS (\hat{p}) es perpendicular al plano de la red ($\theta = 0^\circ$) se muestra en la Fig 4.17 a), los plasmones colectivos presentan dispersión lineal en los puntos de Dirac localizados en \mathbf{K} y \mathbf{K}' , definidos por $\frac{4\pi}{3a\sqrt{3}}(\pm 1, 0)$, en la primera zona de Brillouin. Esta relación de dispersión presenta analogía con la estructura de bandas del Grafeno.

Cerca de los puntos de Dirac \mathbf{K} y \mathbf{K}' se cumple $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{p}$, con $|p| \ll |K|$, así el factor de estructura se reduce a $f_{\mathbf{q}} \simeq -3a/2(p_x, p_y)$. Por tanto, las relaciones de dispersión de la ecuación (4.46) tienen un comportamiento lineal cerca de \mathbf{K} , siendo esta aproximación: $\omega_{\mathbf{k}}^{\pm} \simeq \omega_0 \pm v|\mathbf{k}|$, donde la velocidad de grupo $v = 3\Omega a/2$.

El caso de la polarización $\theta = \pi/2$, y $\varphi = 0$ mostrado en la Fig. 4.17 b), los modos CPs presentan un ancho de energía de ancho $\Delta = 2\Omega \min\{|f_{\mathbf{q}}|\}$. Si la polarización es ($\theta = \arcsen[\sqrt{1/3}]$, y $\varphi = 0$ como se ve en la Fig. 4.17 c), la función de polarización es $C_1 = 0$, esto significa que los enlaces de la sub-red \mathbf{B} con la sub-red \mathbf{A} ligados por C_1 son

inefectivos consecuentemente el sistema es invariante traslacional a lo largo de $\hat{e}_1 = (0, -1)$, esto implica que $\frac{\omega^\pm}{\omega_0}$ no depende de $q_y a$, entendiéndose que las dos bandas se tocan en las *líneas de Dirac* localizadas en: $q_x a = \pm \frac{\pi}{\sqrt{3}}$.

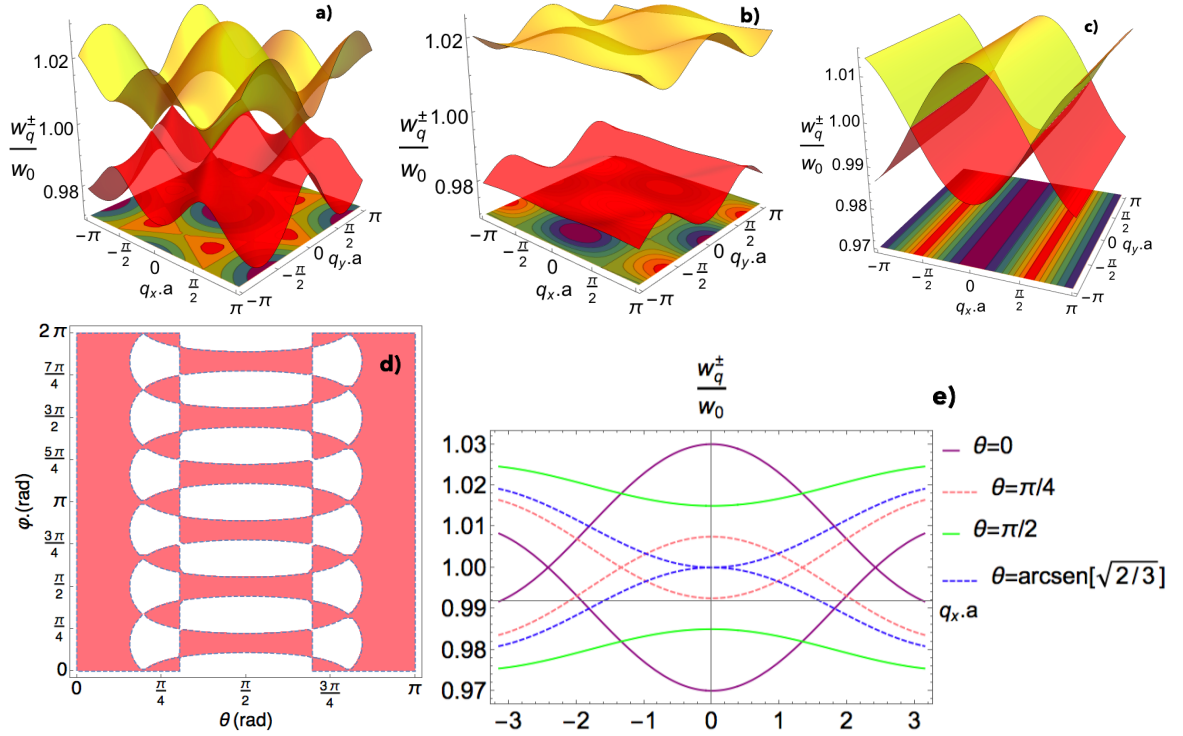


Figura 4.17: a), b) y c) Dispersión colectiva de plasmones de la ecuación (4.46). d) Representa el diagrama de fase para los ángulos (θ, φ) de la dispersión de plasmones. La región rosa indica una región sin brecha entre las bandas, y la blanca indica la región con gap entre las dos bandas de dispersión de CPs. e) Dispersión colectiva de plasmones a lo largo de $K'\Gamma K$ ($q_y a = 0$) para diferentes orientaciones θ de los dipolos. Para las figuras a)-d) $\varphi = 0^\circ$, y $\Omega/\omega_0 = 0.01$.

Además, en la en la Fig. 4.17 e) vemos la dispersión a lo largo del contorno $K'\Gamma K$ para el ángulo $\theta = 0$, vemos los dos puntos \mathbf{K}' y \mathbf{K} bien localizados. Se observa que si cambiamos el ángulo de polarización a $\theta = \pi/4$ los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' se desvían, para $\theta = \arcsen[\sqrt{2/3}]$ los puntos de Dirac se fusionan en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Por tanto, si $\theta > \arcsen[\sqrt{2/3}]$ vemos que aparece un ancho de energía entre los puntos de Dirac, esto es claro si se elige por ejemplo $\theta = \pi/2$. Para polarizaciones arbitrarias de PSL podemos sintonizar el diagrama de fase de la dispersión colectiva cuando no presenta ancho de energía imponiendo que $|f_{\mathbf{q}}| = 0$ en la ecuación (4.46), esto es lo mismo que $f_{\mathbf{q}} = e^{iq_y a/2} (C_1 e^{-3iq_y a/2} + C_2 e^{-\sqrt{3}iq_x a/2} + C_3 e^{\sqrt{3}iq_x a/2}) = 0$,

para cualquier valor de \mathbf{q} . Resolviendo lo anterior, da la condición de regiones que presentan degeneraciones (puntos de Dirac): $0 \leq [(C_2 + C_3)^2 - C_1^2]/4C_2C_3 \leq 1$ ^{XIII}. En la Fig. 4.17 d) la región rosa representa la estabilidad del espectro de Dirac en función de (θ, φ) , y la región blanca corresponde a polarizaciones para la que la dispersión colectiva presenta un ancho entre las bandas de dispersión. Pudiendo decir con lo anterior que si cambiamos la polarización esto permite cambiar el espectro colectivo.

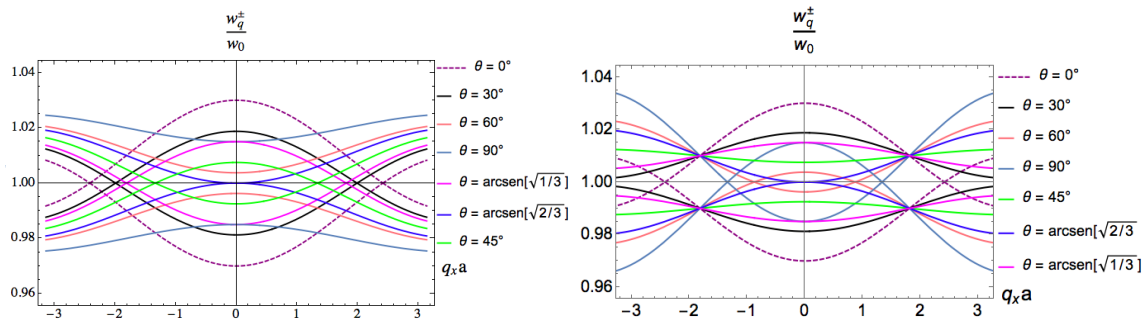


Figura 4.18: Dispersión colectiva de plasmones a lo largo de $K'\Gamma K$ ($q_y a = 0$) para diferentes orientaciones θ de los dipolos. Izq. *armchair* ($\varphi = 0$). Der. *zigzag* ($\varphi = 90$).

Las Figs. en 4.18, presentan una extensión de la gráfica 4.17 e), se incluyen la dependencia de los ángulos θ , para ángulos $\varphi = 0^\circ$ y $\varphi = \pi/2$. En la Fig 4.18 derecha, vemos la dispersión a lo largo del contorno $K'\Gamma K$, para el ángulo $\theta = 0$ se observa obviamente la misma situación obtenida para $\varphi = 0^\circ$. Si cambiamos el ángulo de polarización a $\theta = \pi/4$ aparece un gap entre los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' , para $\theta = \arcsen[\sqrt{2/3}]$ bandas parabólicas de Dirac se fusionan en $\mathbf{q} = \mathbf{0}$. Por tanto, si $\theta < \arcsen[\sqrt{2/3}]$ vemos que aparece un ancho de energía que disminuye gradualmente entre los puntos de Dirac, esto es claro si se elige por ejemplo $\arcsen[\sqrt{1/3}]$, $\theta = 30^\circ$. De lo contrario, si $\theta > \arcsen[\sqrt{2/3}]$ el espectro no presenta ancho de energía. Al cortar la red en dos direcciones: i) Si recorremos a lo largo de la dirección vertical que conecta las sub-redes \mathbf{A} y \mathbf{B} de la Fig. 4.16 tenemos cortes tipo *armchair*, de lo contrario, ii) Si seguimos la dirección que conecta las partículas, a lo largo de una línea perpendicular a la dirección que conecta las sub-redes \mathbf{A} y \mathbf{B} tenemos enlaces tipo *zigzag*.

^{XIII} Determina las regiones de dispersión de plasmón con y sin ancho de energía en los puntos de Dirac.

4.3.3. Dispersión de plasmones en red panal con simetría de inversión rota

En la misma línea con la sección anterior, se estudia el sistema de red panal. No obstante, ahora tomamos en cuenta la red de nanopartículas metálicas esféricas con simetría de inversión rota, es decir los PSL en las sub-redes A y B tienen frecuencias de resonancia inequivalentes, ω_A y ω_B , respectivamente. Esto podría realizarse experimentalmente ya sea fabricando las dos sub-redes de diferentes materiales o construyéndolas con nanopartículas de diferentes tamaños.

Dentro de la aproximación cuasiestática de los dipolos puntuales interactuantes, cada nanopartícula en las sub-redes tienen radios r_A y r_B y son mucho más pequeños que λ . Siguiendo el mismo procedimiento que la sección 4.2.7, se observa que la frecuencia natural de PSL es reemplazada por ω_A y ω_B de modo que

$$\begin{pmatrix} \omega_A & \Omega' f_{\mathbf{q}} & 0 & -\Omega' f_{\mathbf{q}} \\ \Omega' f_{\mathbf{q}}^* & \omega_B & -\Omega' f_{\mathbf{q}}^* & 0 \\ 0 & \Omega' f_{\mathbf{q}} & -\omega_A & -\Omega' f_{\mathbf{q}} \\ \Omega' f_{\mathbf{q}}^* & 0 & -\Omega' f_{\mathbf{q}}^* & -\omega_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ x_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ y_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ z_{\mathbf{q}}^{\pm} \end{pmatrix} = \omega^{\pm} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ x_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ y_{\mathbf{q}}^{\pm} \\ z_{\mathbf{q}}^{\pm} \end{pmatrix},$$

El coeficiente de interacción entre dipolos es $\Omega' = (\omega_A \omega_B / \omega_0^2)^{1/2} (r_A r_B / r^2)^{3/2} \Omega$, así las bandas colectivas de dispersión son: $\omega_{\mathbf{q}}^{\pm} = \sqrt{\frac{\omega_A^2 + \omega_B^2}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega_A^2 - \omega_B^2}{2}\right)^2 + 4\omega_A \omega_B \Omega'^2 |f_{\mathbf{q}}|^2}}$. Se define el parámetro d en función de las resonancias ω_A y ω_B como $d = \frac{\delta\omega}{\bar{\omega}} = \frac{\omega_A - \omega_B}{(\omega_A + \omega_B)/2}$. Por tanto, la dispersión colectiva se reduce a la forma general

$$\frac{\omega_{\mathbf{q}}^{\pm}}{\bar{\omega}} = 1 \pm \sqrt{t^2 |f_{\mathbf{q}}|^2 + d^2/4}. \quad (4.47)$$

En las Figs. 4.19 a), b) y c) se grafica la relación dada en la ecuación (4.47), para el caso en el que se tiene polarización perpendicular al plano con asimetrías $d = 0, d = 0.004$ y $d = 0.01$. Para $d = 0$ se reproduce el caso de partículas idénticas $\omega_A = \omega_B = \omega_0$. Sin embargo, cuando $d \neq 0$ se introduce una asimetría en el sistema, las bandas presentan un gap $\delta\omega$ entre los puntos K.

Las Figs. 4.19 d), e) y f) ilustran la dispersión para el caso de polarización $\theta = \arcsen(1/\sqrt{3})$ con asimetrías $d = 0, d = 0.004$ y $d = 0.01$, y las Figs. 4.19 g), h) y i) representan la dispersión para el caso de polarización paralela al plano $\theta = \pi$, con asimetrías $d = 0, d = 0.004$ y $d = 0.06$ respectivamente. Estas bandas muestran que mientras la asimetría aumenta

(d) la brecha de la dispersión CP en este caso es mayor. Alrededor del punto K las bandas se aproximan como $\frac{\omega_{\mathbf{q}}^{\pm}}{\omega} = 1 \pm \sqrt{\bar{v}^2 |\mathbf{k}|^2 + \delta\omega^2/4}$.

La brecha del espectro es resultado físico de la perturbación originada por la diferencia de las frecuencias de cada sub-red, y está inscrito en el término $d^2/4$ de la ecuación (4.47). Si $d = 0$, se obtiene la misma expresión para la relación de dispersión antes obtenida. La brecha de energía sugiere que los CPs adquieren masa; de hecho, los modos se comportan de forma colectiva como bosones de masa nula, moviéndose a una velocidad constante, independiente de su energía; pero en este caso los CPs adquieren una masa efectiva que depende de la diferencia de las frecuencias. El control del gap depende de la diferencia de las frecuencias y esta cualidad puede permitir diseñar nuevos materiales.

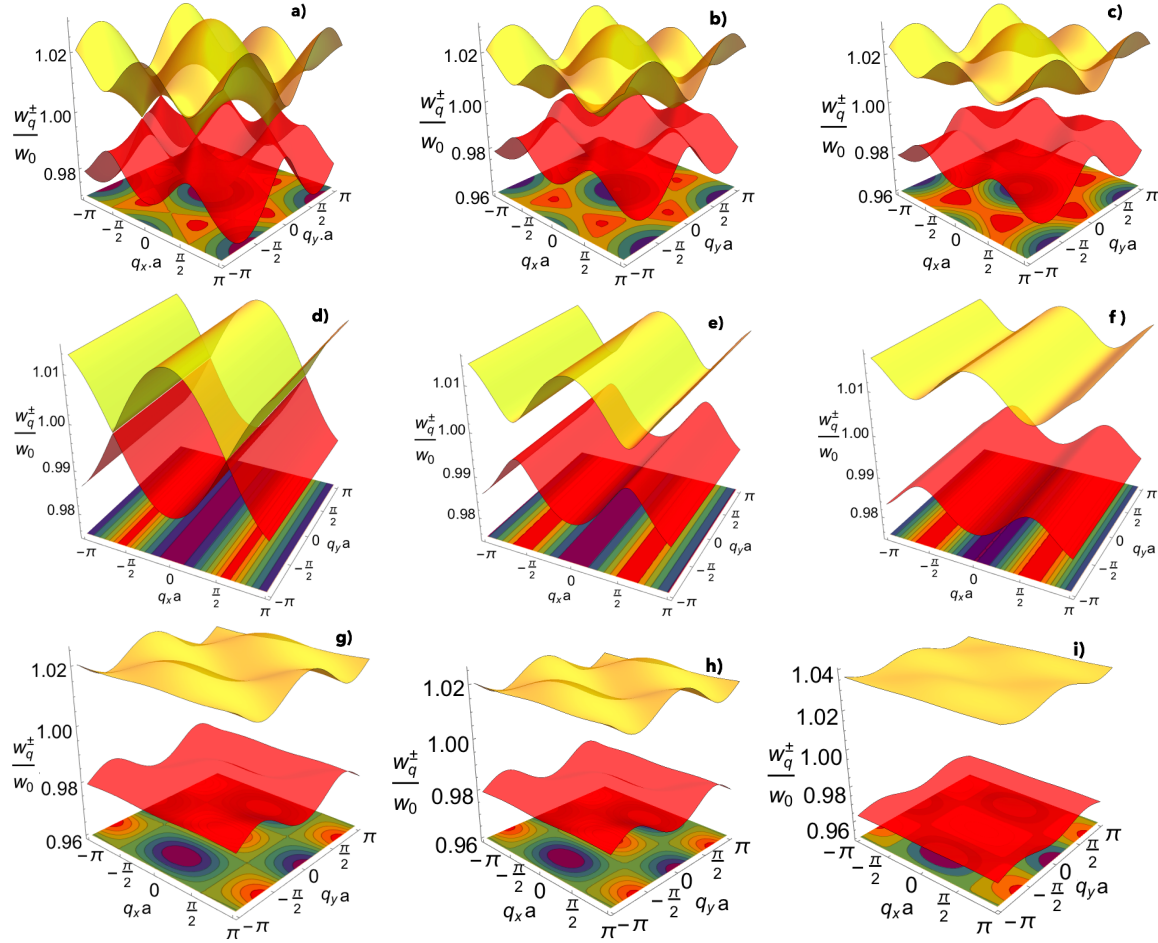


Figura 4.19: Dispersiones de plasmones colectivos de la ecuación (4.47) para $\theta = 0$, a) $d=0$, b) $d=0.004$ y c) $d = 0.01$; $\theta = \arcsen[1/\sqrt{3}]$, d) $d=0$, e) $d=0.004$, f) $d=0.01$; $\theta = \pi/2$ y g) $d=0$, h) $d=0.004$, i) $d=0.06$.

4.3.4. Dispersión de plasmones con interacción dipolo-dipolo más allá de los vecinos más cercanos

La interacción con los siguientes vecinos más cercanos es considerada incluyendo la interacción con segundos y terceros vecinos. Este comportamiento se exhibe en la Fig. 4.20.

En la Fig. 4.20, vemos que la dispersión permanece sin grandes variaciones para segundos y terceros vecinos, así que solo la interacción con los primeros vecinos captura la física reelevantante del problema.

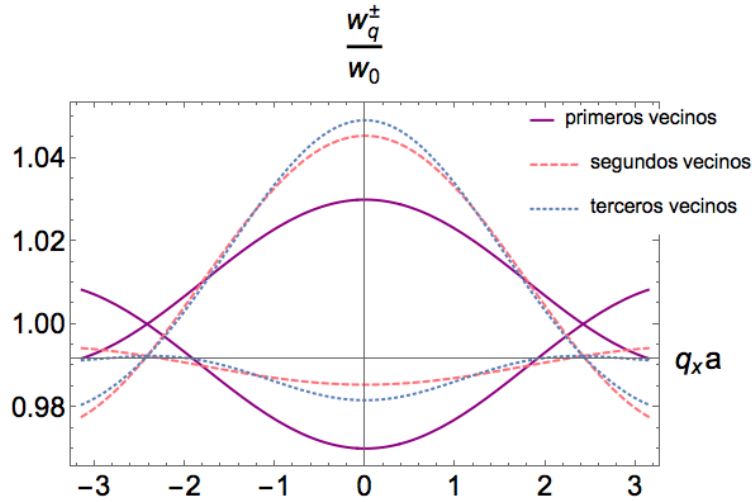


Figura 4.20: Dispersión colectiva de plasmones para el modo ($\theta = 0$) a lo largo de la dirección $K'\Gamma K$ ($q_y a = 0$) incluyendo los vecinos más cercanos (líneas moradas), los segundos vecinos (líneas rosa) y los terceros vecinos (líneas verde).

4.4. Comparación Grafeno plasmónico y Kagomé plasmónico

Basándonos en los resultados obtenidos, se analizan ángulos específicos para los que uno o varios de los enlaces entre las subredes es completamente inefectivo, es decir, una de las funciones de polarización C_j es cero.

Los puntos de Dirac en la primera zona de Brillouin de la red *honeycomb* son $\frac{4\pi}{3a\sqrt{3}}(\pm 1, 0)$

i) Las soluciones para la red *honeycomb* con $\theta = \arcsen[\sqrt{1/3}]$ y $\varphi = 0$ se grafican en la Fig. 4.17c), con el parámetro de polarización es $C_1 = 0$. Los modos colectivos se describen

por

$$\frac{\lambda_{1\mathbf{q},2\mathbf{q}}}{\omega_0} = 1 \pm \frac{3}{2} \frac{\Omega}{\omega_0} \text{Cos}\left[\frac{\sqrt{3}}{2} q_x a\right]. \quad (4.48)$$

Este caso indica que los enlaces de la sub-red **B** con la sub-red **A** ligados por C_1 son inefectivos, consecuentemente el sistema es invariante traslacional a lo largo de $\hat{e}_1 = (0, -1)$, esto implica que $\frac{\lambda^\pm}{\omega_0}$ no depende de $q_y a$. Como consecuencia, los plasmones colectivos muestran dos bandas que se tocan en las *líneas de Dirac* localizadas en: $q_x a = \pm \frac{\pi}{\sqrt{3}}$.

ii) Soluciones para $\theta = \arcsen(2/3)$ y $\varphi = 0$ de la red Kagomé

Los puntos de Dirac en la primera zona de Brillouin de la red Kagomé son $K1 = \pm \frac{2\pi}{3a} \hat{e}_1$, $K2 = \pm \frac{2\pi}{3a} \hat{e}_2$, $K3 = \pm \frac{2\pi}{3a} \hat{e}_0$. La función de polarización es $C_0 = 1 - 3\text{sen}[\theta]^2 \text{sen}[\varphi - \frac{\pi}{3}(j-1)]^2$ lo que da $C_0 = 0$, $C_1 = 1$, y $C_2 = 0$ y consecuentemente los factores de estructura son $f_{0\mathbf{q}} = f_{2\mathbf{q}} = 0$, y $f_{1\mathbf{q}} = 2C_1 \text{Cos}[q_x a]$.

La solución particular se resuelve a partir de diagonalizar el sistema [4.10](#), lo que se expresa como

$$\begin{pmatrix} \omega_0 & 2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & 0 & 0 & -2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & 0 \\ 2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & \omega_0 & 0 & -2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & 0 & -\omega_0 & -2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & 0 \\ 2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & 0 & 0 & -2\Omega \text{Cos}\mathbf{q}\mathbf{1} & -\omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\omega_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \lambda_{\mathbf{q}} \begin{pmatrix} \omega_{\mathbf{q}} \\ x_{\mathbf{q}} \\ u_{\mathbf{q}} \\ y_{\mathbf{q}} \\ z_{\mathbf{q}} \\ v_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}$$

Las bandas de dispersión de plasmones colectivos resultan

$$\frac{\lambda_{1\mathbf{q}}}{\omega_0} = 1 \quad (4.49)$$

$$\frac{\lambda_{2\mathbf{q},3\mathbf{q}}}{\omega_0} = \sqrt{1 \pm 4 \frac{\Omega}{\omega_0} \text{Cos}[q_x a]} \quad (4.50)$$

Se muestra que las dos bandas se cruzan en dos líneas localizadas en: $q_x a = \pm \frac{\pi}{2}$. Esto muestra que los enlaces \hat{e}_0 y \hat{e}_2 son inefectivos, como consecuencia resultan ser invariantes traslacional a lo largo de las direcciones \hat{e}_0 y \hat{e}_2 .

Las Figs [4.21](#) y [4.22](#) ilustran el comportamiento que siguen las características descritas al inicio de esta sección. La estructura del Grafeno tiene doble degeneración en las líneas de Dirac. Por otro lado, las bandas de dispersión en la red Kagomé se cruzan teniendo una

triple degeneración las bandas para el vector momento $\mathbf{q}_x a$, y constante en $\mathbf{q}_y a$ ($\mathbf{q}_x a$ y $\mathbf{q}_y a$ en unidades de ω_0).

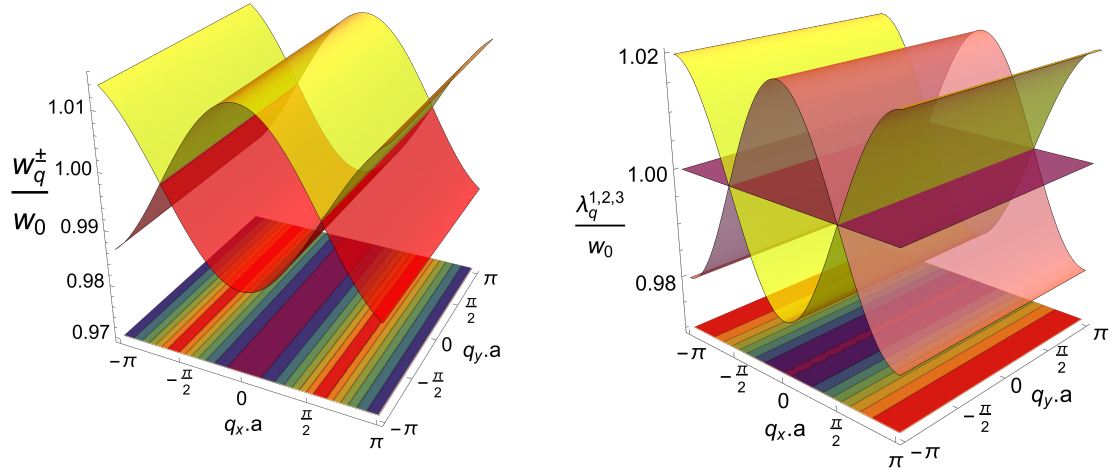


Figura 4.21: CPs para $\varphi = 0$ de *Honeycomb* y *Kagomé* plasmónico con $\theta = \arcsen[\sqrt{1/3}]$. Der. $\theta = \arcsen(2/3)$.

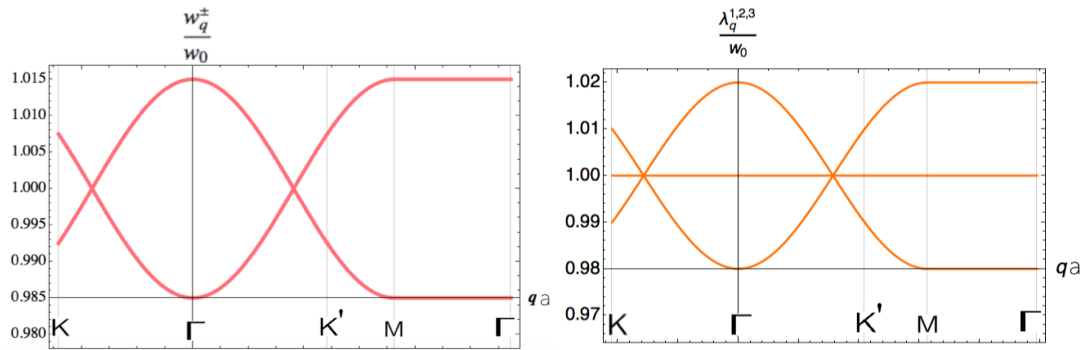


Figura 4.22: Estructura de bandas: Izq. *Honeycomb*. Der. *Kagomé*.

4.5. Conclusión

En este capítulo hemos obtenido el comportamiento de los plasmones colectivos en dos redes de nanopartículas metálicas dispuestas sobre un dieléctrico. Mostramos cómo la disposición geométrica y la orientación del dipolo eléctrico en el plano determinan los PSL soportados por las partículas, y cómo la interacción de estos PSL puede sintonizarse mostrando entonces

diferentes comportamientos de dispersión.

Particularmente, cuando todos los dipolos de las nanopartículas apuntan perpendicularmente al plano de la red Kagomé, los bosones plasmónicos siguen una relación de dispersión lineal en forma de conos con un vértice en común, conos de Dirac similares a los que están presentes en la estructura de bandas electrónicas del Grafeno. En el Grafeno plasmónico, la interacción de la luz y los plasmones, permite la propagación de PSL gracias a su respuesta no-lineal.

Hemos demostrado que los plasmones colectivos en los puntos de Dirac se comportan como partículas de Dirac sin masa, de forma semejante a los electrones en el Grafeno, por tanto así heredan sus propiedades físicas únicas. La existencia de bosones de Dirac en los puntos K está garantizada por la conservación tanto de la inversión temporal como de la simetría de inversión de la red cristalina. Eso hace que estos puntos sean susceptibles a perturbaciones que rompan la simetría. Este aspecto será vital para el diseño de metasuperficies plasmónicas con mayor eficiencia del transporte de radiación a través del plano 2D. Estos sistemas artificiales, llamados metasuperficies, podrían ser explotados en una nueva generación de circuitos ópticos ultradelgados. Las dos redes de nanopartículas plasmónicas podrían usarse para realizar nuevos tipos de acoplamiento espín-órbita y, por lo tanto, proporcionar un enfoque eficiente para diseñar tales sistemas.

La respuesta óptica global de los plasmones colectivos bosónicos de las redes, la dispersión y su naturaleza física dependen de la estructura de red del material y de las interacciones de los plasmones superficiales. La limitación experimental de observar dispersión colectiva de plasmones resulta de la amortiguación plasmónica (tiempo de relajación del PSL) que tiende a desenfocar las frecuencias de resonancia. Las redes bidimensionales de nanopartículas metálicas permiten, por lo tanto, atrapar campos ópticos, mientras los transportan a distancias del orden de la longitud de onda λ en el plano.

Capítulo 5

Conclusiones

5.1. Conclusiones generales y comentarios

En este trabajo estudiamos teóricamente, las características de los estados colectivos en distribuciones bidimensionales de puntos cuánticos y de anillos cuánticos, ambos semiconductores, y las características de estados plasmónicos colectivos en diferentes distribuciones bidimensionales de nanopartículas metálicas. Respecto a los puntos, enfocamos nuestra atención en la posibilidad de controlar y optimizar el tiempo de decaimiento de los estados colectivos en puntos cuánticos cónicos interactivos cambiando los parámetros característicos de los elementos individuales y los de la distribución. Obviamente el interés general de esta investigación fue entender cómo sería posible incrementar los tiempos de vida de los estados colectivos coherentes, lo que sería de gran relevancia para diversos procesos y aplicaciones de estos sistemas, muy particularmente en el desarrollo de procesadores cuánticos. En el caso de los puntos cuánticos, propusimos un procedimiento, basado en simulación numérica de experimentos de *EELS*, que permitiría estudiar los estados colectivos y estimar sus tiempos de relajación. Nuestros resultados indican que ciertamente, mediante este procedimiento se podrían explorar las condiciones óptimas de diseño de las distribuciones. Nuestro estudio de los estados colectivos de distribuciones bidimensionales de anillos cuánticos, pretende ser el análogo magnético de los puntos cuánticos. El tratamiento cuántico de estos sistemas es por supuesto más complejo, sin embargo, nuestros resultados cualitativamente revelan que ciertamente, controlando las características geométricas de los anillos y de la distribución bidimensional, sería posible manipular en cierta medida los tiempos de relajación. Con el fin de entender cómo las características de los elementos nanoestructurados cuánticos y la

geometría de la distribución de estos, determinan los estados colectivos, por medio de una descripción dinámica cuántica, estudiamos los estados colectivos plasmónicos de distribuciones de nanopartículas metálicas. Centramos nuestra atención en los modos plasmónicos colectivos de distribuciones bidimensionales tipo Grafeno y distribuciones Kagomé. Basados en la aproximación cuasi-estática y el modelo de dipolos puntuales, desarrollamos un estudio detallado de los modos bosónicos en redes Grafeno y Kagomé con diferentes características, centrandó nuestra atención en la relación que existe entre las orientaciones de los dipolos generados en las partículas metálicas, con los estados colectivos, y la aparición de puntos de Dirac. En las redes de partículas idénticas hemos explorado las bandas de dispersión de los plasmones colectivos, que emergen de la polarización de los momentos dipolares. Por otra parte, para redes con inversión de simetría rota o partículas no idénticas, encontramos que los plasmones colectivos presentan desplazamientos no simétricos de energía respecto a los puntos de Dirac. Para redes *honeycomb* las partículas de Dirac se describen como bosones dependientes de la energía, donde los modos “adquieren masa” por efecto del gap. Creemos que la descripción de los plasmones colectivos por el procedimiento desarrollado en nuestro trabajo, puede ser un puente para el análisis de propiedades ópticas de los metamateriales de Dirac. Una generalización y ampliación de las posibilidades de aplicación en este sentido, implicaría un tratamiento cuántico del acoplamiento entre fotones y plasmones colectivos que daría como resultado polaritones-plasmones sintonizables. Este es un aspecto crucial que debe abordarse en la búsqueda de procedimientos que permitan optimizar el diseño de redes de nanopartículas metálicas que permitan la existencia de plasmones colectivos de Dirac, con las características apropiadas para aplicaciones concretas.

Apéndice A

Plasmones en red Lieb

La red Lieb, es una red cuadrada con tres sitios en cada celda unitaria. Esta red muestra bandas de dispersión degeneradas donde se intersectan dos bandas cónicas y una banda plana.

A.1. Descripción del arreglo

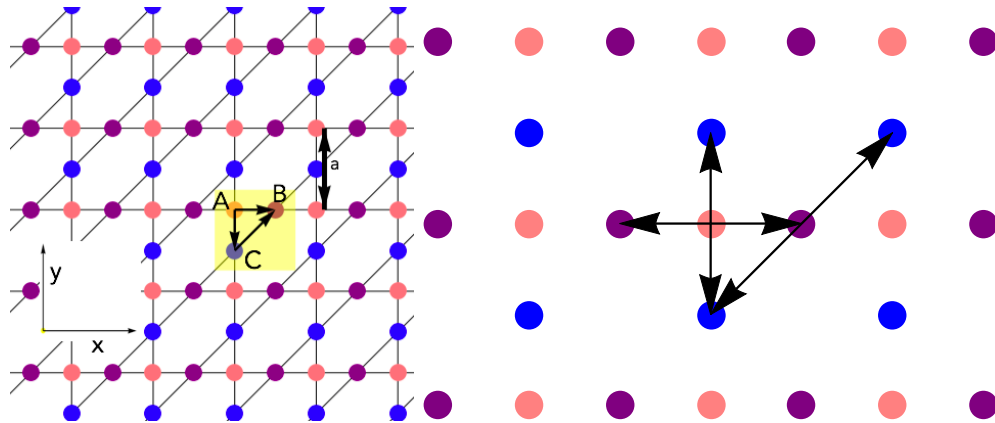


Figura A.1: Red Lieb (equivalente topológico de la red Kagomé) con constante de red a , que consta de tres subredes, etiquetadas como A, B y C, conectadas por los vectores entre vecinos más cercanos: $\hat{e}_1 = \frac{a}{2}(1, 0)$, $\hat{e}_2 = \frac{a}{2}(0, -1)$ y $\hat{e}_3 = \hat{e}_1 - \hat{e}_2 = \frac{a}{2}(1, 1)$ en cada celda unitaria (amarillo). Se puede notar que los vecinos más cercanos de cada partícula pertenecen a las otras subredes.

La red Lieb se puede considerar como una red cuadrada con algunos ajustes adicionales que se señalan en la figura [A.1](#). Es equivalente a una red Kagomé y se puede construir

conectando los puntos de la red cuadrada como se muestra en la figura [A.1](#). Por lo tanto, los puntos de la red conectados por líneas en la red son equivalentes a los cuatro vecinos más cercanos para cada subred de la red Kagomé. Por lo tanto, la subred A (rosa) en la figura tiene dos vecinos que pertenecen a la subred B (morado), mientras que los otros dos pertenecen a la subred C (azul).

La posición de cada subred está dada por los vectores $\mathbf{R}_A = (0, 0)$, $\mathbf{R}_B = \mathbf{R}_A + \hat{\mathbf{e}}_1$, y $\mathbf{R}_C = \mathbf{R}_A + \hat{\mathbf{e}}_2$.

El problema tiene el mismo procedimiento realizado en la red Kagomé, la única diferencia es la función de factor de estructura $F_{\mathbf{q}}$.

A.2. Polarización perpendicular al plano de la distribución

$$\theta = 0 \text{ y } \varphi = 0^\circ$$

Cuando la polarización de PSL apunta perpendicular al plano de la red ($\theta = 0$, ver Fig. [A.2](#)), los parámetros de interacción, $C_j = 1 - 3\text{sen}^2\theta \left(\delta_{j1}\text{cos}^2\varphi + \delta_{j2}\text{sen}^2\varphi + \frac{1}{2\sqrt{2}}\delta_{j3}(\text{cos}\varphi - \text{sen}\varphi)^2 \right)$ son todos iguales a 1, $C_1 = C_2 = C_3 = 1$.

La solución del sistema [\(4.10\)](#) para la dispersión colectiva, es definido por la polarización descrita por los factores de estructura: $f_{\mathbf{1q}} = 2\text{cos}[\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_1]$, $f_{\mathbf{q2}} = 2\text{cos}[\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_2]$, $f_{\mathbf{q0}} = 2\text{cos}[\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_3]$.

Los plasmones colectivos se obtienen simplemente diagonalizando el Hamiltoniano en el espacio de momentos resolviendo $\lambda_{\mathbf{q}}^6 - a\lambda_{\mathbf{q}}^4 + b\lambda_{\mathbf{q}}^2 + d = 0$. Los coeficientes resultan ser $a = 3\omega_0^2$, $b = 3\omega_0^4 - 16\omega_0^2\Omega^2 F(\mathbf{q}, 0)$, $d = 16\omega_0^4\Omega^2 F(\mathbf{q}, 0) - \omega_0^6 - 128\omega_0^3\Omega^3 \text{cos}(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_3)\text{cos}(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_1)\text{cos}(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_2) = 16\omega_0^4\Omega^2 F(\mathbf{q}, 0) - \omega_0^6 - 64\omega_0^3\Omega^3 (F(\mathbf{q}, 0) - 1)$. Donde $F(\mathbf{q}, \theta = 0^\circ) = F_{\mathbf{q}}$ es el factor de estructura, y se escribe $F_{\mathbf{q}} = \text{cos}^2(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_1) + \text{cos}^2(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_2) + \text{cos}^2(\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{e}}_3) = \text{cos}^2(q_x) + \text{cos}^2(q_y) + \text{cos}^2(q_x + q_y)$.

Esta red presenta bandas planas como ocurre en la red Kagomé. El espectro de dispersión consta de tres bandas en la primera BZ, una de ellas es una banda plana y las otras dos son dispersivas, ver Fig. [A.2](#) dadas por

$$\frac{\lambda_{\mathbf{1q}}}{\omega_0} = \sqrt{1 - 4\frac{\Omega}{\omega_0}}, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{\lambda_{\mathbf{2q,3q}}}{\omega_0} = \sqrt{1 + 2\frac{\Omega}{\omega_0} [1 \pm \sqrt{4F_{\mathbf{q}} - 3}]}. \quad (\text{A.2})$$

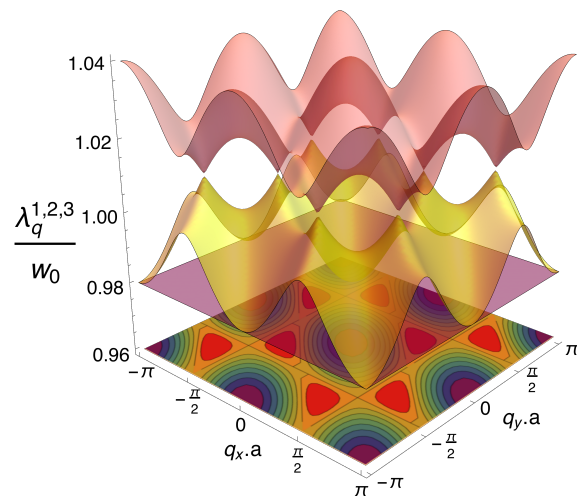


Figura A.2: Dispersión colectiva de plasmones $\theta = 0^\circ$ y $\varphi = 0^\circ$.

Bibliografía

- [1] MARKIEWICZ M. *Numerical Simulation of Quantum Dots, Joint work with Heinrich Voss.* Institute of Numerical Simulation, Hamburg University of Technology. (2016) 21071 Hamburg, Germany.
- [2] FERREIRA R. and BASTARD G., *Capture and Relaxation in Self-Assembled Semiconductor Quantum Dots* (Morgan & Claypool Publishers, San Rafael CA, USA) 2015.
- [3] LEE B. C., VOSKOBOYNIKOV O, and LEE C. P., *III-V Semiconductor Nano-Rings, The International Symposium on Functional Semiconductor Nanosystems (FSNS2003)*, Atsugi, Japan, (November 2003) 12-14.
- [4] BÜTTIKER M., IMRY Y., and LANDAUER R., *Phys. Lett.* **96A** (1983) 365.
- [5] LORKE A., LUYKEN R.J., GOVOROV A.O., KOTTHAUS J.P., GARCIA J.M., PETROFF P.M., *Phys. Rev. Lett.* **84**(2000) 2223.
- [6] MARKIEWICZ M. and VOSS H. *Commun. Comput. Phys.* **11** (2012) 1591.
- [7] THU L. M., CHIU W. T., and VOSKOBOYNIKOV O., *Phys. Status Solidi B* **250** (2013) 2080-2084.
- [8] AHARONOV Y. and BOHM D., *Phys. Rev.* **115** (1959) 485.
- [9] WANG J., and MA Z.S., *Phys. Rev.* **B52** (1995) 14829.
- [10] GOVOROV A.O., ULLOA S.E., KARRAI K., WARBURTON R.J., *Phys. Rev. B* **66** (2002) 081309.

-
- [11] THU L. M., CHIU W. T., TA-CHUN LIN and VOSKOBOYNIKOV O., *Phys. Status Solidi C*, **8** (2011) 375-377.
- [12] THU L. M., CHIU W. T., and VOSKOBOYNIKOV O., *Phys. Rev. B*, vol. **85**, (2012) 205419-1-9.
- [13] BERRY, M., *Proc. R. Soc. Lond. A.*, **392** (1984) 45-57.
- [14] AHARONOV Y. and ANANDAN, J., *Phys. Rev. Lett.*, **58** (1987) 1593.
- [15] VESELAGO V. G., *Sov. Phys. Usp.*, **10** (1968) 509.
- [16] PENDRY J. B., *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 3966.
- [17] LEONHARDT U., *Science* **312** (2006) 1777.
- [18] TSAKMAKIDIS K. L., BOARDMAN A. D., HESS O., *Nature.*, **450** (2007) 397.
- [19] SCARABELLI D. *et al.*, (2015) arxiv/1507.04390.
- [20] GEIM A. K. and NOVOSELOV K. S. *Nature Materials* **6** (2007) 183 - 192.
- [21] WEICK G., WOOLLACOTT C., BARNES W.L., HESS O., MARIANI E., *Physical Review Letters.*, **110** (2013) 106801.
- [22] STURGES T.J., WOOLLACOTT C., WEICK G., MARIANI E. *2D Mater.*, (2015) 2:014008.
- [23] TENNER V.T., DOOD DE, MICHIEL, VAN EXTER M. P., *Optics Express.*, **24** (2016) 29624.
- [24] MIELKE A., *J. Phys. A: Math. Gen.*, **25** (1992) 4335.
- [25] BILLAUD B., PICCO M. and TRUONG T-T., *Journal of Physics: Condensed Matter* **21** (2009) 1-13.
- [26] KRENNER H. J., SABATHIL M., CLARK E. C., KRESS A., SCHUH D., BICHLER M., ABSTREITER G. and FINLEY J. J., *Phys. Rev. Lett.* **94** (2005) 057402 1-4.
- [27] MELNIK R. V. N. and WILLATZEN M., *Nanotechnology* **15** (2004) 1-8.
- [28] CEDRIC R., *et al. Nanoscale Res Lett.* **643** (2012) 7 1.

- [29] EGERTON R. F., *Rep. Prog. Phys.* **72** (2009) 016502 p. 25.
- [30] MOCTEZUMA R. E., NOSSA J. F., CAMACHO A., CARRILLO J. L., and RUBI J. M. *Journal of Advanced Physics* **112** (2012) 024105.
- [31] MOCTEZUMA R. E., CARRILLO J. L., and MEZA-MONTES L., *Integr. Ferroelectr.* **126** (2011) 171.
- [32] REYES A., RODRÍGUEZ F.J., QUIROGA L., *Journal of Physics: Condensed Matter* **16** (2004) 6185-6193.
- [33] RODRÍGUEZ F. J., QUIROGA L., JOHNSON N. F., *Phys. Rev. B* **66** (2002) 161302(R).
- [34] HU X. D., POTZ W., *Phys. Rev. Lett.* **82** (1999) 3116;
POTZ W., *Appl. Phys. Lett.* **72** (1998), 3002-3004.
- [35] WU B.H. and CAO J. C., *Phys: Condens. Matter* **16** (2004) 3411-3420.
- [36] SCHLOSSHAUER M., *Decoherence and the Quantum-to-Classical Transition* (Springer, Heidelberg/Berlin) 2007.
- [37] MARKIEWICZ M. and VOSS H., *Proceedings of the 6th international conference on Computational Science and Its Applications, May 08-11, 2006, Glasgow, UK 2006*, p. 684-693.
- [38] LEI W. and LORKE A., *Growth and Spectroscopy of Semiconductor Quantum Rings. NanoScience and Technology* (Springer, Germany) 2014, pp. 27-59.
- [39] BIMBERG D. and POHL U. W., *Mater Today* **14** (2011) 388-397.
- [40] MOCTEZUMA R. E., NOSSA J. F., CAMACHO A., CARRILLO J. L., and RUBI J. M. *J. Appl. Phys.*, **112** (2012) 024105.
- [41] ZRENNER A., BEHAM E., STUFLER S., FINDEIS F., BICHLER M. and ABSTREITER G., *Nature* **418** (2002) 612-614.
- [42] YEOMANS J. M., *Statistical Mechanics of Phase Transitions* (CLARENDON PRESS, OXFORD) 1992.

-
- [43] SHI Y.J. *Phys. A: Math. Theor.* **37** (2004) 6807.
- [44] KADANOFF L. P., *Physics* (1966) 2:263.
- [45] HUANG K. *Statistical Mechanics* (John Wiley & Sons, New York) 1987.
- [46] HUAG H. and KOCH S. W., *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors* (World Scientific Publishing, New York) 2001.
- [47] HOWIE A. and WALSH A., *Microsc. Microanal. Microstruct* **2** (1991) 171-181.
- [48] ERNI R., BROWNING N. D., *Ultramicroscopy* **107** (2007), p. 267.
- [49] BELTRAN A. M., BEN T., SANCHEZ A. M., GASS M. H., TABOADA A. G., RIPALDA J. M. and MOLINA S. I., *J. Phys: Condens. Matter: Conference Series* 471 (2013) 012012.
- [50] PITARKE J. M., PENDRY J. B. and ECHENIQUE P. M. *Phys Rev B* **55** (1997) 9550-9557.
- [51] FUCHS R., MENDOZA C. I., BARRERA R. G. and CARRILLO J.L., *Physica A.* **241** (1997) 29-44.
- [52] ZIPPER E., DAJKA J. and SZOPA M., *Acta Phys Pol.* **102** (2002)
- [53] MANNINEN M. and REIMANN S. M., *J. Phys. A* **42** (2009) 214019.
- [54] CHAKRABORTY T., *Adv. in Solid State Phys.* **43** (2003) 79.
- [55] LORKE A., LUYKEN R. J., GOVOROV A. O., and KOTTHAUS J. P., *Phys. Rev. Lett.* **84** (2000) 2223.
- [56] LOSS D. and DIVINCENZO D. P., *Phys. Rev. A* **57** (1998) 120.
- [57] HANCOCK Y., SUORSA J., TÖLÖ E., and HARJU A., *Phys. Rev.B7* (2008) 155103.
- [58] LEE B.C., VOSKOBOYNIKOV O., and LEE C.P. *Physica E 24* (2004) 87-91
- [59] VIEFERS S., KOSKINEN P., SINGHA DEO P., MANNINEN M. *Physica E* **21** (2004) 1.

- [60] PETTERSSON H., WABURTON R.J., LORKE A., KARRAI K., KOTTHAUS J.P., GARCIA J.M., PETROFF P.M. *PhysicaE* **6** (2000) 510.
- [61] GERCHIKOV L.G., GUET C., IPATOV A.N., *Phys. Rev. A*, **66** (2002) 053202.
- [62] KNEIPP K., WANG Y., KNEIPP H., et al., *Phys. Rev. Lett.*, **78**, (1997) 1667.
- [63] S. A. MAIER et al., *Nature Mater.*, **2** (2003) 229-232.
- [64] QUINTEN M., et al., *Opt. Lett.*, **23** (1998) 1331-1333.
- [65] TAO A., SINSEMSUKSAKUL P., and YANG P. D., *Nat. Nanotechnol.* **2** (2007) 435-440.
- [66] ZHANG W.Y. et al., *Phys. Rev. Lett.* **84**, (2000) 2853.
- [67] ASHCROFT N. W. and MERMIN N. D., *Solid State Physics*. (Cbs Publishing Asia Ltd) 1976.
- [68] MAIER, S. *Plasmonics: Fundamentals And Applications* (Springer, New York) 2007.
- [69] BARNES W. L., DEREUX A., and EBBESEN T. W., *Nature*, **424** (2003) 824.
- [70] RECHBERGER W., *Optics Communications*, **220** (2003) 137.
- [71] LAMPRECHT B., SCHIDER G., LECHNER R. T., DITLBACHER H., KRENN J. R., LEITNER A., and AUSSENEGG F. R., *Phys. Rev. Lett.*, **84** (2000) 4721.
- [72] KREIBIG U. and VOLLMER M., *Optical Properties Of Metal Clusters*. (BERLIN: SPRINGER-VERLAG) 1995.
- [73] BERTSCH G.F. and BROGLIA R.A., *Oscillations In Finite Quantum Systems*. (Cambridge University Press, Cambridge) 1994.
- [74] ECHTERMEYER T. J., BRITNELL L., JASNOS P. K., LOMBARDO A., GORBACHEV R.V., GRIGORENKO A.N., GEIM A.K., FERRARI A.C., NOVOSELOV K.S. *Nat. Commun.* **2** (2011) 458.
- [75] JIADAN LIN, HAI LI, HUA ZHANG, and WEI CHEN *Appl. Phys. Lett.*, **102** (2013) 203109.

- [76] AUGUIÉ B. and BARNES W. L. *Phys. Rev. Lett.*, **101** (2008) 143902.
- [77] GUO R., HAKALA T. K., and TÖRMÄ P., *Phys. Rev. B*, **95** (2017) 155423.
- [78] ROSS M. B., MIRKIN C. A., and SCHATZ G. C., *J. Phys. Chem. C*, **120** (2016) 816-830.
- [79] KRAVETS V. G., SCHEDIN F., and GRIGORENKO A. N., *Phys. Rev. Lett.*, **101** (2008) 087403.
- [80] BRONGERSMA M. L., HARTMAN J. W., and ATWATER H. A., *Phys. Rev. B*, **62**, (2000) R16356-R16359.
- [81] RAJEEVA B.B., LIN, L. and ZHENG, Y., *Nano Research*, (2017)
- [82] GERCHIKOV L. G., GUET C., IPATOV A. N., *Phys. Rev. A* **65** (2002) 013201.
- [83] PINCHUK A. O. and SCHATZ G. C., *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*, **149** (2008) 251-258.
- [84] JACKSON J. D., *Classical Electrodynamics, 3rd Edition.* (JOHN WILEY AND SONS) 1998.
- [85] DOWNING C. A., MARIANI E., WEICK G. *Journal of Physics: Condensed Matter.*, **30** (2017) 025301.
- [86] HUANG Y. P., CHEN G. and HERMELE, M., *Phys. Rev. Lett.* **112**, (2014) 167203.
- [87] OWERRE S. A., BURKOV A. A., and ROGER G. MELKO., *Phys. Rev. B* **93** (2016) 144402.
- [88] ZHANG H., CHEN X., MA Z., and ZHOU Y., *J. Phys. B.*, **49** (2016) 115301.
- [89] ZONG Y., XIA S., TANG L., SONG D., HU Y., PEI Y., SU J., LI Y., and CHEN Z., *Opt. Express* **24** (2016) 8877-8885.
- [90] BEUGELING W., EVERTS J. C. and SMITH C. M., *Phys. Rev. B.*, **86** (2012) 195129.
- [91] KAWABATA A. and KUBO R., *J. Phys. Soc. Jpn.* **21** (1966) 1765.
- [92] SCHNEIDER M., FARIA D., VIOLA KUSMINSKIY S. and SANDLER N. *Phys. Rev. B* **91** (2015) 161407.

- [93] DEZHUAN HAN, YUN LAI, JIAN ZI, ZHAO-QING ZHANG, and C. CHAN T. *Physical Review Letters*, **102** (2009)123904.
- [94] LI WANG, RUO YANG ZHANG, MENG XIAO, DEZHUAN HAN, C T CHAN, and WIJIA WEN. *New Journal of Physics*, **18** (2016)103029.
- [95] POLINI M., GUINEA F., LEWENSTEIN M., MANOHARAN H.C., PELLEGRINI, V., *Nat. Nanotech.*, **8** (2013) 625-633.

Relaxation of ferroelectric states in 2D distributions of quantum dots: EELS simulation

C M Cortés¹, L Meza-Montes¹, R E Moctezuma² and J L Carrillo¹

¹ Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, Mexico

² Instituto de Física de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Mexico

E-mail: lilia@ifuap.buap.mx

Received 29 January 2016, revised 27 April 2016

Accepted for publication 3 May 2016

Published 23 May 2016



Abstract

The relaxation time of collective electronic states in a 2D distribution of quantum dots is investigated theoretically by simulating EELS experiments. From the numerical calculation of the probability of energy loss of an electron beam, traveling parallel to the distribution, it is possible to estimate the damping time of ferroelectric-like states. We generate this collective response of the distribution by introducing a mean field interaction among the quantum dots, and then, the model is extended incorporating effects of long-range correlations through a Bragg–Williams approximation. The behavior of the dielectric function, the energy loss function, and the relaxation time of ferroelectric-like states is then investigated as a function of the temperature of the distribution and the damping constant of the electronic states in the single quantum dots. The robustness of the trends and tendencies of our results indicate that this scheme of analysis can guide experimentalists to develop tailored quantum dots distributions for specific applications.

Keywords: quantum dots distributions, ferroelectric relaxation time, Bragg–Williams approximation, electron energy loss spectroscopy

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

The knowledge and possible manipulation of the electronic relaxation time have been a subject of fundamental relevance in many areas of condensed matter physics, quantum optics and information technology. The decay times of quantum states is closely related to the quantum coherence lost whose control may have important applications in the field of quantum computation, particularly in the preservation of quantum information coherence in a noisy environment. In this sense, the exploration of the ultrafast phenomena that determine the relaxation times even though they are longer than the coherence time, has become a fundamental issue in these topics of research. In this work we focus our attention in the possibility of changing the decay time of collective states in interacting quantum dots (QDs) by changing their

characteristic parameters and those of their 2D distribution. The generation of entangled states in quantum dot systems, the observation of their decoherence in times of the order of a picosecond as well as the transfer of coherence from a quantum macroscopic state have been demonstrated several years ago [1–4]. Presently it is possible to design these nanoscale systems that behave as artificial atoms, in the sense that they possess a well defined and controllable spectrum, at least at certain extent [5, 6].

Since many of the physical properties and possible applications of these quantum systems depend on the eigenstates of the confined electrons [7–9], by controlling the physical characteristics of the interactive QDs of a distribution, one is able to change the decay time of the collective states. The later one would depend on a very complex way on the eigenstates of the single quantum dot, as well as on several physical



BUAP

MEMORANDUM

Para:	Dr. Oracio Navarro Chávez	Presidente
	Dr. J. Jesús Arriaga Rodríguez	Secretario
	Dr. Felix Izrailev	Vocal
	Dr. Octavio Meza Espinoza	Vocal
	Dr. José Luis Eustolio Carrillo Estrada	Vocal
De:	Dr. Roberto Cartas Fuentevilla, Coordinador del programa de Física	
Asunto:	Se cita al Examen de Grado de Doctorado en Ciencias (Física) de la M.C. Carina Magdalena Cortés Sánchez.	
Fecha:	18 de junio, 2018	

Me permito informarles que el Comité Académico del IFUAP, los ha designado integrantes del Comité Examinador de la Tesis de Doctorado en Ciencias (Física) de la M.C. Carina Magdalena Cortés Sánchez, que se llevará a cabo el lunes 25 de junio, 2018 a las 10hrs. en el auditorio del IFUAP.


Dr. Roberto Cartas Fuentevilla
COORDINADOR

Instituto de Física
"Ing. Luis Rivera
Terrazas"

Av. San Claudio esq. 18 sur, edif 110 A, B y C.
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel,
Puebla, Pue. C.P. 72570
01(222) 2295610, Fax: ext. 5611