

**APLICACIÓN DEL MÉTODO DE GALERKIN PARA ANALIZAR  
EL ESPECTRO ELECTRÓNICO DE UNA DONADORA EN UN POZO CUÁNTICO  
DE GaAs/Ga(Al) As**

**VÍCTOR SAÚL BASTO GONZÁLEZ**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
Bucaramanga, 2006**

**APLICACIÓN DEL MÉTODO DE GALERKIN PARA ANALIZAR  
EL ESPECTRO ELECTRÓNICO DE UNA DONADORA EN UN POZO CUÁNTICO  
DE GaAs/Ga(Al) As**

**Trabajo de grado para optar  
al título de Físico**

**VÍCTOR SAÚL BASTO GONZÁLEZ**

**Director  
Dr. ILIA D. MIKHAILOV**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
Bucaramanga, 2006**

**A mi Madre**

**A Víctor Señor**

## AGRADECIMIENTOS

Agradezco a personas que de alguna forma contribuyeron a la realización de este trabajo:

Dr ILIA D. MIKHAILOV

Dr HAROLD PAREDES

Dr CARLOS BELTRAN

Dr CARLOS RAMÍREZ

Dr GUILLERMO GONZALEZ

También agradezco a mis compañeros de antaño

Framsol López,

Paolo Ospina

William Gutiérrez

Jerson Reina

A la familia Cuellar y a todas aquellas personas con las he tenido algún tipo relación.

y de manera muy especial, A MI FAMILIA

## CONTENIDO

	Pág.
1. Introducción	1
2. Modelo Matemático	4
2.1 Planteamiento del problema	4
2.2 Método de Dimensión fractal para el estado base de una donadora	5
2.3 Electrón en un pozo cuántico	7
2.4 Ecuación diferencial exacta para la función envolvente de una donadora	8
2.5 Extensión del método de Dimensión fractal para lo estados excitados. Ecuación aproximada para la función envolvente	10
2.6 Método de barrido trigonométrico para analizar la función envolvente	12
2.7 Método de Galerkin para mejorar el cálculo a través del método de Dimensión Fractal	14
3. Resultados y Discusiones	17
3.1 Dimensión fractal para lo estado excitado de una donadora en un pozo cuántico	17
3.1.1 Efecto de ancho del pozo	17
3.1.2 Efecto de posición de impureza	20
3.2 Espectro electrónico de una donadora en un pozo cuántico	21

3.2.1 Efecto del ancho del pozo	23
4. Conclusiones	27
5. Apéndice	28
6. Bibliografía	48

## LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Fig. 1. Esquema de diferencia entre las brechas de energía en la juntura de GaAs/(Ga,Al)As	4
Fig. 2 Esquema que representa la posición del electrón y el ion en un QW	9
Fig. 3. Dimensión fractal como función de la separación electrón-donador para los estados 1s y 2p para un donador $D^0$ centrado en un pozo cuántico de GaAs/Ga <sub>0.7</sub> Al <sub>0.3</sub> As	19
Fig. 4. Dimensión fractal para un donador no centrado en un pozo de GaAs/Ga <sub>0.7</sub> Al <sub>0.3</sub> As como función de la separación del electrón y donador, para diferentes posiciones del donador: (a) estado 1s-like (b) estado 2p-like	20
Fig. 5. Energía de enlace en función del ancho del pozo para el estado base, $n=1$ , $l=0$ , $m=0$	23
Fig. 6. Energía de enlace para los dos primeros estados excitados, $n=2, 3$ , con $l=0$ , $m=0$	24
Fig. 7 Energía de enlace para $n=2,3$ $l=1$ , $m=1$	25
Fig. 8 Energía de enlace para $n=2,3$ con $l=2$ , $m=2$	25
Fig. 9. Energía de enlace para $n=1$ , $l=1$ , $m=1$	26

## LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Energías de enlace para el estado 1s de una impureza centrada en un pozo de GaAs/Ga <sub>0.7</sub> Al <sub>0.3</sub> As para diferentes anchos del pozo: (a) resultados de la referencia [4], (b) resultados del presente trabajo y (c) valores teóricos exactos de las energías en los casos límites	21
Tabla 2. Los primeros cinco niveles energéticos en unidades de Rydberg efectivo para el átomo de hidrogeno en dos dimensiones cuando la distancia entre le donador y la barrera es pequeña y, en tres dimensiones cuando el pozo muy ancho, $L \rightarrow \infty$	22

## RESUMEN

**TITULO:** APLICACIÓN DEL MÉTODO DE GALERKIN PARA ANALIZAR EL ESPECTRO ELECTRÓNICO DE UNA DONADORA EN UN POZO CUÁNTICO DE GaAs/Ga(Al)As \*

**AUTOR:** VÍCTOR SAÚL BASTO GONZÁLEZ\*\*

**PALABRAS CLAVES:** Método de dimensión fractal, Método Galerkin, Donadora, Método de barrido trigonométrico, espectro electrónico.

Se propone utilizar el método de Galerkin para analizar el espectro electrónico de una donadora confinada en un pozo cuántico de GaAs/Ga(Al)As. Como funciones de base sobre las cuales se proyecta la solución exacta en el marco del método de Galerkin, se propone utilizar un conjunto de funciones de prueba para diferentes estados de la donadora. Estas funciones se toman como el producto de la función de onda del electrón libre confinado en el pozo con funciones armónicas esféricas y una función envolvente que depende solo de la separación entre el electrón y la donadora.

Partiendo del principio variacional de Schrödinger se deduce la ecuación diferencial para la función envolvente la cual se resuelve numéricamente utilizando el método de barrido trigonométrico. Esta ecuación coincide con la ecuación de onda para el átomo de hidrógeno en un espacio con una dimensión fraccionaria que disminuye a medida que se aumenta de la separación entre electrón y la donadora.

Se presentan los resultados del cálculo de las energías y las dimensiones fraccionarias para diferentes estados de donadora en función del ancho del pozo y la posición de la impureza. Se establece una concordancia entre el momento angular del estado del electrón y la dimensión fraccionaria, conocida en la teoría atómica como isomorfismo dimensional. El procedimiento propuesto en la tesis puede considerarse como una extensión del Método de Dimensional Fractal aplicado anteriormente solo para el estado base.

---

\* Trabajo de grado.

\*\* Universidad Industrial de Santander, Facultad de Ciencias, Escuela de Física.

## ABSTRACT

**TITLE:** APPLICATION OF GALERKIN METHOD TO ANALISIS OF DONOR SPECTRUM IN GaAs/Ga(Al)As QUANTUM WELL \*

**AUTHOR:** VÍCTOR SAÚL BASTO GONZÁLEZ \*\*

**KEYWORDS:** Fractal Dimension Method, Galerkin Method, Donor, Trigonometric Sweep Method, electronic Spectrum.

It is proposed to use the Galerkin method to analyze the electronic spectrum of donor confined in GaAs/Ga(Al)As quantum well. The set of the trial functions given by the products of the free electron in quantum well with the spherical harmonic functions and an envelope function which depends only on the electron-donor separation is considered as the basis over which is projected the exact solution within the framework of the Galerkin method.

A differential equation for the envelope function is derived starting from the Schrödinger variational principle which furthermore is solved numerically by using the trigonometric sweep method. This equation coincides with one for the hydrogen atom in an effective space with the fractional dimension which decreases as the separation between the electron and the donor increases.

The results of the calculation of the energies and the fractal dimensions for different states as a functions de quantum well width and the donor position are presented. The concordance between the angular momentum and the fractal dimension known in the atomic theory as dimensional isomorphism is established. The numerical procedure proposed in the thesis can be considered as an extension of the Fractal Dimension Method applied previously only for the ground sate.

---

\* Trabajo de grado.

\*\* Universidad Industrial de Santander, Facultad de Ciencias, Escuela de Física.

## 1. INTRODUCCIÓN

Todas las propiedades electrónicas y ópticas de los dispositivos semiconductores dependen de la estructura de bandas de energías, la cual puede ser modificada a través de la aleación de dos o más semiconductores o del uso de estructuras heterogéneas para causar confinamiento cuántico o formación de súper-redes.

Las técnicas epitaxiales permiten elaborar estructuras donde se puede cambiar abruptamente el material semiconductor. A través de estas técnicas epitaxiales se depositan átomos en forma de vapor sobre un sustrato [1], lográndose el crecimiento de capas ultrafinas de diferentes materiales semiconductores (heteroestructuras) con anchos controlados e interfaces bien definidas [2]. Así se logra construir heteroestructuras donde un semiconductor con una brecha entre la bandas de valencia y conducción estrecha esta rodeado por otro material con la brecha mas grande entre estas bandas, formándose una súper-red, estructuras periódicas unidimensionales propuestas por Esaki y Tsu [3], o un pozo cuántico (siglas del inglés *Quantum Well*, *QW*). El perfeccionamiento de las técnicas de micro- fabricación ha permitido la construcción de estructuras con confinamiento cuántico unidimensional (hilos cuánticos) y cero dimensional (puntos cuánticos). El confinamiento permite modificar de manera controlable el espectro energético de los portadores en los semiconductores y este efecto tiene una gran importancia en la fabricación de nuevos dispositivos opto-electrónicos.

El QW más estudiado es el que consiste de capas alternantes de GaAs y GaAlAs [4]. La capa de GaAs en QW esta rodeada por dos capas de GaAlAs y las constantes de red en todas tres capas son prácticamente iguales [1]. A mayor concentración de Al en la capa GaAlAs, mayor es la diferencia entre las brechas entre las bandas de valencia y de conducción en estos dos tipos de capas. Esto conduce a una discontinuidad en los bordes de las bandas de conducción y de valencia en las interfaces entre GaAs y GaAlAs [4], conllevando a la formación de pozos de potencial. Para una concentración menor al 40% de Al  $x < 0.4$ , el compuesto GaAlAs tiene una banda de conducción directa [1]. Como resultado de la existencia de un salto de potencial en las juntas de QW, el movimiento de los electrones y los huecos en la dirección de crecimiento del cristal es restringido, pero aún pueden moverse libremente en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento. Este sistema es entonces, un sistema bidimensional y en la dirección de crecimiento puede representarse como un QW.

El número y localización de portadores intrínsecos que se presentan en los semiconductores a una temperatura superior a  $0^{\circ}K$  es difícil de controlar efectivamente mediante campos eléctricos. Una manera controlable de introducir portadores en los semiconductores es a través del dopado, permitiendo variar la concentración de portadores y su localización espacial.

El dopaje conduce a la aparición de estados permitidos en la región de banda prohibida, contribuyendo así a la conducción. Estos nuevos niveles permitidos están a una distancia muy pequeña por debajo de la banda de conducción además, son discretos ya que los átomos de las demás impurezas están lejos uno del otro en la estructura cristalina y por tanto, el intercambio electrónico entre ellos es pequeño.

Las impurezas son átomos que se introducen en la red cristalina para causar uno de dos efectos: *i*) donar un electrón libre al cristal (en cuyo caso el átomo recibe el nombre de donadora,  $D^0$ ) *ii*) recibir un electrón de la estructura de enlace covalente, liberando un hueco móvil (en cuyo caso el átomo se denomina aceptor o  $A^0$ ). Las impurezas  $D^0$  centradas (así como las descentradas) y poco profundas en semiconductores infinitos de GaAs, se consideran como átomos hidrogenoides. Al introducirse la impureza ( $D^0$  o  $A^0$ ), la mayoría de las propiedades físicas del semiconductor se alteran. Actualmente se aplica esta tecnología en dispositivos ópticos, metrología, telecomunicaciones, láseres y microelectrónica.

El primero en estudiar las impurezas hidrogenoides donadoras poco profundas en pozos cuánticos de GaAl/GaAlAs fue Bastard [5]. Él usó un conjunto de pozos cuánticos independientes, tomó un átomo donador centrado en un pozo simple de GaAs inmerso entre barreras de altura infinita, usó la *Aproximación de Masa Efectiva* (AME) para un modelo de átomo hidrogenoide y calculó la energía de enlace de esta impureza a través del procedimiento variacional. Él encontró que la energía de enlace de una impureza  $D^0$  en un QW depende fuertemente del ancho del pozo. Posteriormente, este modelo fue reemplazado por un pozo simple de profundidad finita por Mailhiet [6], Bajaj [4], y Greene [7]. Chaudhuri [8] fue el primero en considerar varios pozos, y utilizando métodos variacionales hizo el cálculo para el estado fundamental de una impureza centrada en un pozo cuántico, permitiendo la expansión de la función de onda de la impureza a los pozos vecinos más próximos. Luego, Lane et al [9] consideraron el modelo de un átomo donador colocado en cualquier posición de un pozo de potencial periódico cuadrado.

Además del método variacional, se han utilizado otros métodos tales como: diagonalización, teoría de perturbaciones y dimensión fraccionaria. En este último, las interacciones anisotrópicas en un medio tridimensional, se tratan como isotrópicas en un espacio con dimensión no entera asociado con el grado de anisotropía. Con este método Lefebvre y colaboradores [10-13], resolvieron el problema de sistemas hidrogenoides en QWs y QWWs (siglas del inglés *Quantum Well Wire*) de GaAl/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As, analizando el estado base y los primeros estados excitados y espectros de absorción relacionados con estos estados. A pesar de que este método muy sencillo no tenía una base teórica bien justificada y las funciones de onda para los estados excitados no son ortogonales rigurosamente, el método se ha venido utilizando exitosamente para describir las propiedades de donadoras y excitones en heteroestructuras semiconductoras.

Posteriormente, en el Grupo FICOMACO de Escuela de Física de la UIS en la base del principio variacional de Schrödinger y utilizando la técnica de derivación funcional, fue elaborado un procedimiento llamado de Dimensión Fractal el cual incluye las teorías anteriores utilizada para introducir la dimensión fraccionaria, como lo casos particulares. Se publicó una serie de trabajos [15], [20] sobre el estado base de las donadoras neutras y negativamente cargadas y, de los excitones donde se demostró la alta precisión del método. Pero esta técnica hasta ahora se utilizó sólo para analizar el estado base y no fue extendida para los estados excitados debido a la ausencia de un conjunto de tres buenos números cuánticos y a la imposibilidad de realizar una separación completa de variables en la ecuación de Schrödinger para una donadora confinada en un QW.

Cuando en un sistema cuántico se rompe parcialmente o completamente la simetría y ya no existe la posibilidad para separar las variables es conveniente aplicar un método aproximado. Entre tales métodos se encuentra el método de Galerkin, en el cual inicialmente el Hamiltoniano exacto es reemplazado por otro aproximado y separable, para el cual todos los números cuánticos están bien definidos. Los estados del Hamiltoniano exacto se proyectan sobre el conjunto de las funciones de base del Hamiltoniano aproximado. La eficiencia de este método depende en gran parte de elección del Hamiltoniano aproximado y de las funciones de base correspondientes. A menor discrepancia entre los dos Hamiltonianos, mejor es la convergencia del Método de Galerkin.

En este trabajo, en calidad de las funciones de base para el Método de Galerkin se propone utilizar las soluciones del problema obtenido en el marco del Método de Dimensión Fractal. Con este fin, en la primera parte de la tesis se desarrolla el método aproximado para encontrar los niveles energéticos y las funciones de onda de una donadora confinada en un pozo cuántico de GaAs/AlGaAs/GaAs. Esta parte de la tesis puede considerarse como una extensión del Método de Dimensión Fractal para los estados excitados. Además en esta parte de la tesis se obtiene la expresión explícita para el Hamiltoniano aproximado cuyos valores y funciones propias corresponden a las obtenidos en el marco del Método de Dimensión Fractal. Después el método se aplica para el cálculo aproximado de la energía de enlace y las dimensiones fraccionaria de diferentes niveles energéticos en función del ancho del pozo y de la posición de la impureza. En la última parte de la tesis se propone el desarrollo de la formulas necesarias para aplicar el método de Galerkin usando como la funciones de base obtenidos anteriormente.

## 2. MODELO MATEMÁTICO

### 2.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Los sistemas de baja dimensionalidad son estructuras en donde los grados de libertad microscópicos están restringidos parcial o completamente en una o más direcciones. En particular, en este trabajo se consideran sistemas semiconductores de baja dimensionalidad, en donde la limitación de los grados de libertad se da por la diferencia entre las brechas de energía de los semiconductores constituyentes.

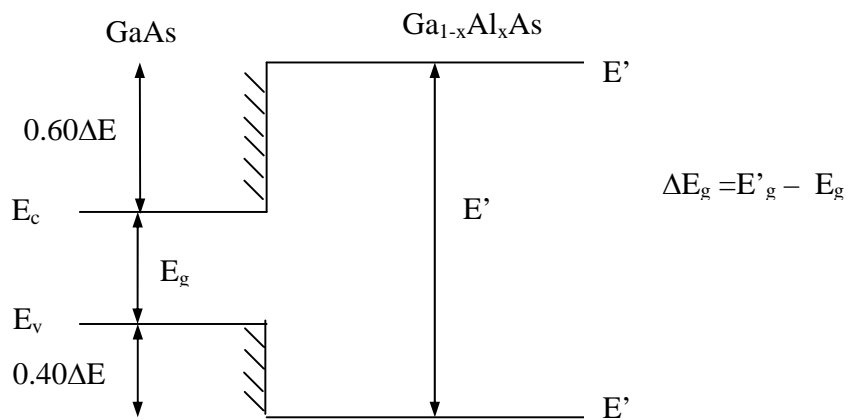


Fig. 1. Esquema de diferencia entre las brechas de energía en la juntura de GaAs/(Ga,Al)As

Las heterojunturas de GaAs/(Ga,Al)As (semiconductor III-V) son las más utilizadas en el estudio teórico y experimental de los sistemas semiconductores de baja dimensionalidad; esto se debe a que este material posee un conjunto de propiedades que permiten su modelamiento en forma sencilla (isotropía de masa efectiva del electrón, la brecha directa entre bandas de conducción y de valencia, etc.). Los parámetros principales del material GaAs son: a) La constante de red ( $a = 0.565368$  nm), constante dieléctrica ( $\epsilon = 12.53$ ) y masa efectiva del electrón ( $m^* = 0.067m_0$ , donde  $m_0$  es la masa del electrón libre). Estos parámetros varían cuando en el material de GaAs se introducen los átomos de Al, pero los cambios son pequeños y por esta razón en esta tesis nosotros consideramos un modelo simplificado en el cual se desprecia la variación de los parámetros de material al pasar desde el pozo a la barrera.

Cuando en la red cristalina de GaAs se introduce un átomo del grupo IV, de tal manera que este reemplace a un átomo de Ga, uno de los electrones de la impureza no participa en el enlace químico y queda casi libre en la banda de conducción para formar estados acoplados es decir, el átomo impureza aporta un electrón a la estructura de bandas y por esta razón recibe el nombre de impureza donadora.

Las impurezas donadoras se denominan poco profundas cuando la energía de ionización del electrón ligado,  $E_b(D^0) = 5.83 \text{ meV}$  en GaA es mucho menor que la brecha entre las banda de conducción y de valencia,  $E_g = 1435 \text{ meV}$  en GaAs. El espectro energético de una impureza donadora en una heteroestructura de GaAs tiene una estructura tipo hidrogenoide, sin embargo, la energía de ionización de una donadora en el GaAs es mucho menor que la del átomo de hidrógeno, esto se debe a que la masa efectiva de electrón en GaAs es mas pequeña que la del electrón libre y a que la constante dieléctrica en GaAs es grande.

## 2.2 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL PARA EL ESTADO BASE DE UNA DONADORA

La dimensión fractal en la teoría de Mandelbrot [16] se define como un parámetro de escalamiento, el cual relaciona la masa de una caja con su tamaño para un sistema de cajas cuya forma reproduce la geometría del objeto y cuyas dimensiones gradualmente se aproximan a cero. La fórmula propuesta por Mandelbrot para la dimensión fraccional da el mismo valor para todas las partes del fractal exacto (objeto autosimilar). En contraste, la densidad de carga dentro de una heteroestructura no puede ser considerada como un objeto autosimilar y entonces, esta dimensión exacta sólo puede estar bien definida localmente pero no en todo el espacio.

El Grupo FICOMACO propuso un procedimiento variacional [15], en el cual la ecuación de onda para estados S de  $D^0$  y D confinados en heteroestructuras semiconductoras es reducida a una ecuación similar en un espacio efectivo isotrópico donde el Jacobiano no tiene una dependencia de ley de potencias respecto a la distancia electrón-ion. En este procedimiento, el Jacobiano para la ecuación de onda renormalizada está dada por la distribución radial de la densidad de carga correspondiente al estado base del electrón libre en la heteroestructura. Para dar una interpretación geométrica a este resultado, se considera la densidad de carga como un objeto fractal, y se analiza un sistema de cajas esféricas con el centro en la posición de la donadora. Siguiendo el procedimiento de Mandelbrot, se define la dimensión de este objeto como un parámetro de escalamiento que relaciona la carga dentro de las cajas con su radio. Se encontró que la parte radial del Jacobiano del volumen del objeto, que determina la dimensión fractal, coincide con el Jacobiano de la ecuación de onda renormalizada. En este procedimiento la dimensión fraccional depende no sólo de la geometría de la heteroestructura sino también de la distancia electrón-ión.

Para encontrar la expresión explícita para el Jacobiano en este procedimiento se considera el siguiente problema de autovalores para la impureza  $D^0$  en una heterojuntura:

$$H(\mathbf{r}, Z = 1)\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = E(D^0)\Psi_{D^0}(\mathbf{r}); H(\mathbf{r}, Z) = -\nabla^2 + V(\mathbf{r}) - \frac{2Z}{|\mathbf{r} - \xi|} \quad (2.1)$$

en el cual  $V(\mathbf{r})$  incluye tanto el confinamiento geométrico como el de los campos externos y  $\xi$  es el vector de la posición de la impureza. De aquí y en adelante se utilizan las unidades adimensionales en las cuales el radio efectivo de Bohr

$a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2$  y el Rydberg efectivo  $Ry^* = e^2 / 2a_0^* \epsilon$  han sido tomados como unidades de longitud y energía respectivamente. La función de onda para la  $D^0$  se escoge de la siguiente manera:

$$\psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(\mathbf{r})\Phi_{D^0}(|\mathbf{r} - \xi|) \quad (2.2)$$

donde se asume que la función envolvente  $\Phi_{D^0}$  introducida para describir la modificación de la distribución de probabilidad electrónica producida por la atracción de Coulomb, tiene simetría esférica y depende sólo de la distancia electrón-ión. La función  $f_0(\mathbf{r})$  corresponde a la auto-función de  $H(\mathbf{r})$ , expresión (2.1), sin el término coulombiano ( $Z = 0$ ), es decir, a la función de onda de un electrón desacoplado en la heterojuntura. Transfiriendo el origen de coordenadas a la posición de la impureza y usando el principio variacional de Schrödinger en la forma:

$$F[\Phi] = \langle f_0 \Phi_{D^0} | H(\mathbf{r}) - E | f_0 \Phi_{D^0} \rangle \rightarrow \min \quad (2.3)$$

se puede escribir la ecuación de Schrödinger (2.1) como un problema variacional para el siguiente funcional:

$$F[\Phi_{D^0}] = \int_0^\infty J(r) \left\{ \left( \frac{d\Phi_{D^0}}{dr} \right)^2 + \left( E_0 - E - \frac{2}{r} \right) \Phi_{D^0}^2 \right\} dr \rightarrow \min \quad (2.4)$$

donde el Jacobiano  $J(r)$  está dado por:

$$J(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta f_0^2 \left( r \sin\theta \cos\varphi + \xi_x, r \sin\theta \sin\varphi + \xi_y, r \cos\theta + \xi_z \right) d\theta \quad (2.5)$$

La ecuación de Euler-Lagrange que minimiza el funcional (2.4) es:

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left( J(r) \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} \right) - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = (E(D^0) - E_0) \Phi_{D^0}(r) \quad (2.6)$$

Esta última ecuación describe el problema de un átomo hidrogenoide en un espacio efectivo isotrópico cuyo Jacobiano de volumen está dado por la función  $J(r)$ , ecuación (2.5). La ecuación de onda renormalizada (2.6) permite a través del cálculo numérico, encontrar directamente la energía de enlace de las impurezas donadoras neutras confinadas en las heterojunturas semiconductoras.

Para el caso  $Z=0$ , el Hamiltoniano (2.1) describe un electrón libre. Debido a simetría axial el Hamiltoniano  $\hat{H}(\mathbf{r}, 0)$  es completamente separable y el problema en tres dimensiones se reduce a tres problemas unidimensionales de valores propios que pueden ser resueltos analíticamente o numéricamente, obteniéndose para este caso, tres números cuánticos buenos. Por otra parte, para el caso de la donadora, cuando

$Z=1$ , el Hamiltoniano  $\hat{H}(\mathbf{r},1)$  no es separable, por lo tanto no presenta números cuánticos buenos. Para construir la base sobre el cual se va a proyectar la solución exacto en el marco del Método de Galerkin utilizaremos el producto de la función del electrón libre en QW con funciones armónicas esféricas. Por esa razón lo primero que analizara es la solución de la ecuación de onda para electrón libre en QW.

### 2.3 ELECTRÓN EN UN POZO CUÁNTICO

Para el estudio de un electrón confinado en la dirección de crecimiento de la heteroestructura, se da a  $Z$  el valor de cero en el Hamiltoniano (2.1)

$$H(\mathbf{r}, Z = 0) = -\nabla^2 + V_c(\mathbf{r}) \quad (2.7)$$

donde

$$V_c(\mathbf{r}) = V(z) = \begin{cases} 0; & |z| < L/2 \\ V_0; & |z| > L/2 \end{cases} \quad (2.8)$$

Como la heteroestructura presenta simetría axial alrededor del eje de crecimiento del semiconductor, se utiliza el Hamiltoniano (2.7) en coordenadas cilíndricas

$$H(\mathbf{r}, Z = 0) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi^2} - \frac{\partial}{\partial z^2} + V(z) \quad (2.9)$$

cuyos funciones propias  $f_{k,m,n}(\rho, \varphi, z)$  y valores propios  $E_{k,m,n}$  se encuentran en una forma exacta utilizando el método de separación variables.

$$f_{k,m,n}(\rho, \varphi, z) = J_m^{Bessel}(k\rho) e^{im\varphi} f_n(z);$$

$$E_{k,m,n} = k^2 + E_n; \quad (2.10)$$

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \quad n = 0, 1, 2, \dots; \quad k \in [-\pi, \pi]$$

donde  $J_m(k\rho)$  es la función de Bessel del orden  $m$  y las funciones  $f_n(z)$  y las energías  $E_n$  son las funciones propias y los valores propios de la ecuación de onda para un electrón en un pozo cuántico unidimensional:

$$-\frac{d^2 f_n(z)}{dz^2} + V(z) f_n(z) = E_n f_n(z); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.11)$$

Según las formulas (2.10) y (2.11) el espectro electrónico de un electrón libre en QW presenta un conjunto de sub-bandas cuyos pisos corresponden a los valores propios del problema (2.11)

Debido a la atracción de la impureza donadora sobre los niveles que corresponden a diferentes sub-bandas, hay un desplazamiento de dichos niveles hacia abajo. Estos

niveles corresponden al problema de un electrón confinado en un pozo cuántico tridimensional y están dados por el nivel discreto en la dirección  $z$  y el nivel continuo en el plano  $p$ . Los niveles que se desplazan de la primera sub-banda ( $n_z = 0, k=0, m=0$ ), siempre son niveles discretos, estado-S, son niveles localizados. Los niveles que se desplazan de las sub-bandas superiores pueden producir tanto niveles discretos (por debajo de la primera sub-banda), que son localizados, como niveles que se llaman resonancias (niveles dentro de un espectro continuo) llamados casi-locales y tiene posibilidad de mezclarse fácilmente con los estados extendidos. El tiempo de vida de los estados casi-locales (resonancias) es corto, es decir, viven poco tiempo cerca de la impureza. El estudio de las resonancias esta más allá del objetivo de esta tesis por ello, se trabajara solo con el nivel que corresponde al piso de la primera sub-banda ( $n_z = 0, k=0, m=0$ ).

El interés se centra en el estado base, por lo tanto la solución de (2.11), es una solución par

$$f_0 = \begin{cases} \cos(\kappa z); & |z| < L/2 \\ V \cos(\kappa L/2) e^{\mathcal{G}(L/2-z)}; & |z| > L/2 \end{cases} \quad (2.12)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \sqrt{V_0 - E_0} \\ \kappa &= \sqrt{E_0} \end{aligned} \quad (2.13)$$

La energía del estado base se obtiene a través de la ecuación trascendente:

$$\mathcal{G} \cos(\kappa L/2) - \kappa \operatorname{sen}(\kappa L/2) = 0 \quad (2.14)$$

Como se está haciendo el análisis para el estado base, entonces se debe exigir que  $k=0$  en (2.10). Por lo tanto, la ecuación (2.11) se reduce a:

$$-\frac{d^2 f_0(z)}{dz^2} + V(z) f_0(z) = E_0 f_0(z); \quad (2.15)$$

## 2.4 ECUACIÓN DIFERENCIAL EXACTA PARA LA FUNCIÓN ENVOLVENTE DE UNA DONADORA

El Hamiltoniano para una impureza donadora es poniendo  $Z=1$  en (2.1):

$$H(\mathbf{r}, Z) = -\nabla^2 + V_c(\mathbf{r}) - V_{ei} \quad (2.16)$$

generalmente, no es completamente separable,  $V_c(\mathbf{r})$ ,  $V_{ei}$  son el potencial de confinamiento y el potencial de interacción entre el electrón y el ion

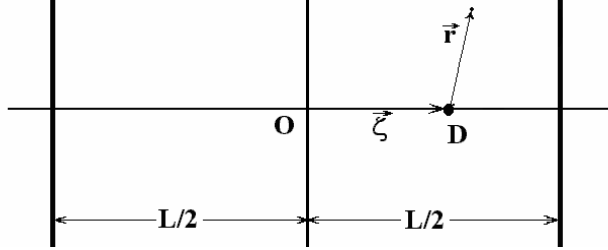


Fig. 2 Esquema que representa la posición del electrón y el ion en un QW

La función de onda para el estado base de una donadora neutra,  $\psi_{D^0}(\mathbf{r})$ , que le corresponde la energía mas baja,  $E^0(D^0)$  en la heteroestructura, puede ser encontrada como una solución del siguiente problema de valores propios

$$\hat{H}\psi_{D^0}(\mathbf{r}) = E^0(D^0)\psi_{D^0}(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

para resolver este problema de valores propios, se buscará la función de onda para el estado-S descrita en la posición del donador que satisfaga

$$\psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(\mathbf{r} + \xi)\Phi_{ml}(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

donde  $\Phi_{ml}(r)$  es una función envolvente que describe el cambio del electrón libre, debido a la interacción con el donador. Esta función envolvente tiene simetría esférica.

Como es habitual, se partirá de la ecuación de Schrödinger (2.17) con  $\psi_{D^0}(\mathbf{r})$  dado en (2.18)

$$\left[ -\nabla^2 + V_c(\mathbf{r} + \xi) + V_{ei}(\mathbf{r}) \right] \psi_{D^0}(\mathbf{r}) = E^0(D^0)\psi_{D^0}(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

Para abordar este el problema se empleará la siguiente identidad vectorial

$$\nabla^2(AB) = B\nabla^2A + A\nabla^2B + 2(\nabla A) \cdot (\nabla B) \quad (2.20)$$

y del problema del electrón libre, (2.15), se llega a:

$$-f_0\nabla^2\Phi_{ml}^{EXA} - 2(\nabla f_0) \cdot (\nabla\Phi_{ml}^{EXA}) + V_c f_0\Phi_{ml}^{EXA} = \left[ E_{EXA}^{(0)}(D^0) - E_0 \right] f_0\Phi_{ml}^{EXA} \quad (2.21)$$

multiplicando por  $f_0$  y teniendo en cuenta que

$$2a\nabla a = \nabla a^2 \quad (2.22)$$

ahora dividiendo por  $(f_0)^2$  se llega a:

$$-\nabla^2\Phi_{ml}^{EXA} - 2(\nabla \ln f_0) \cdot (\nabla\Phi_{ml}^{EXA}) + V_c\Phi_{ml}^{EXA} = \left[ E_{EXA}^{(0)}(D^0) - E_0 \right] \Phi_{ml}^{EXA} \quad (2.23)$$

Hasta aquí se ha hecho un desarrollo lo mas ajustado posible a la matemática, obteniéndose una ecuación exacta al problema de una donadora en un pozo cuántico, expresión (2.23). Ahora se hará una descripción del comportamiento que se espera observar en la función de onda envolvente. Para ello se deducirá una expresión aproximada del problema de valores propios de una donadora en un pozo cuántico, partiendo del principio variacional de Schrödinger (ver Apéndice A).

## 2.5 EXTENSIÓN DEL MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL PARA ESTADOS EXCITADOS. ECUACIÓN APROXIMADA PARA LA FUNCIÓN ENVOLVENTE

Se empleará un método aproximado para examinar el efecto de la interacción electrostática entre el ion-electrón sobre la solución exacta (2.31). Es por lo tanto de interés, examinar los efectos de la interacción electrostática ion-electrón sobre la solución exacta (2.31). Se describirá la modificación de esta solución en presencia del potencial electrostática por medio de la función envolvente  $\Phi_{ml}(\mathbf{r}) \approx \Phi_{ml}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ . Las soluciones de (2.16) se representan en la forma:

$$\psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(r+\xi)\Phi_{ml}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.24)$$

donde  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  son los armónicos esféricos y  $\Phi_{ml}(r)$  es alguna función variacional que describe las propiedades de los estados ligados de los electrones ligados. Nuevamente se han trasladado el análisis a la posición de la donadora. Para encontrar la función  $\Phi_{lm}(r)$ , se parte del principio variacional de Schrödinger (ver apéndice A), el cual declara que cualquier función  $\Phi_{lm}(r)$  para la cual el funcional

$$F[\Phi_{lm}] = \left\langle f_0(r+\xi)\Phi_{ml}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \left| \bar{H} - E^0(D^0) \right| f_0(r+\xi)\Phi_{ml}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \right\rangle \quad (2.25)$$

tiene un valor estacionario para (2.16).

Aplicando la relación (2.20), empleando

$$\nabla^2 Y_{lm} = -\frac{l(l+1)}{r^2} Y_{lm} \quad (2.26)$$

y aplicando (2.15), se llega a:

$$F[\Phi_{lm}] = \left\langle [E_0 - E + V_{ei} + \frac{l(l+1)}{r^2}] f_0^2 Y_{lm}^2 \Phi_{lm}^2 - f_0^2 Y_{lm}^2 \Phi_{lm} \nabla^2 \Phi_{lm} \right\rangle + \left\langle -2 f_0 \Phi_{lm} Y_{lm}^2 (\nabla f_0) \cdot (\nabla \Phi_{lm}) + 2 f_0 Y_{lm} \Phi_{lm}^2 (\nabla f_0) \cdot (\nabla \Phi_{lm}) \right\rangle \quad (2.27)$$

donde el segundo y tercer término se pueden agrupar en uno, así:

$$-f_0^2 Y_{lm}^2 \Phi_{lm} \nabla^2 \Phi_{lm} - 2 f_0 \Phi_{lm} Y_{lm}^2 (\nabla f_0) \cdot (\nabla \Phi_{lm}) = -Y_{lm}^2 \Phi_{lm} \nabla \cdot (f_0^2 \nabla \Phi_{lm}) \quad (2.28)$$

Integrando por partes la ecuación (2.28), conduce a que (2.27) se pueda escribir así:

$$F[\Phi_{lm}] = \int dV \left\{ (\nabla \Phi_{lm})^2 + (E_0 - E + V_{ei} + \frac{l(l+1)}{r^2}) \Phi_{lm}^2 \right\} f_0^2 Y_{lm}^2 + \int dV 2f_0 Y_{lm} \Phi_{lm}^2 (\nabla f_0) \cdot (\nabla Y_{lm}) \quad (2.29)$$

Expresando el diferencial en coordenadas esféricas, se llega a:

$$F[\Phi_{lm}] = \int_0^\infty dr \left\{ (\nabla \Phi_{lm})^2 + \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} - (E^0(D^0) - E_0) - \frac{2}{|\mathbf{r} - \xi|} - \bar{V}(r) \right] \Phi_{lm}^2 \right\} J_{lm}(r) \quad (2.30)$$

donde se ha reemplazado el potencial de interacción,  $V_{ei}$ , por  $\frac{2}{r}$  ya que se esta trabajando en las coordenadas situadas sobre las donadora.

El Jacobiano  $J_{lm}(r)$  y el potencial centrífugo, están dados por

$$J_{lm}(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) f_0^2(z) P_{lm}^2(\theta) \quad (2.31)$$

$$J_{lm}(r) = 2\pi r^2 P_{lm}(r); \quad P_{lm}(r) = \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) f_0^2(z) P_{lm}^2(\theta)$$

Las funciones  $J_{lm}(r)$  en (2.31), es la probabilidad de distribución radial para un electrón no-ligado. El valor  $J_{lm}(r)dr$  da la probabilidad de encontrar un electrón no-ligado pero confinado en la heteroestructura dentro de un cascaron esférico de radio  $r$  y  $r+dr$  centrado en la posición del ion

$$\bar{V}_{lm}(r) = V_{lm}(r) / J(r) \quad (2.32)$$

$$V_{lm}(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin(\theta) 2f_0 Y_{lm} (\nabla f_0) \cdot (\nabla Y_{lm})$$

Por lo tanto, la ecuación de Euler-Lagrange para una función  $\Phi_{lm}(r)$  que minimiza (2.30), tiene la forma

$$\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[ J(r) \frac{d\Phi_{lm}}{dr} \right] - \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} - (E^0(D^0) - E_0) - \frac{2}{r} - \bar{V} \right] \Phi_{lm}(r) = 0 \quad (2.33)$$

Las funciones de ondas obtenidas por (2.33) definen un valor aproximado de las energías de enlace,  $(E^0(D^0) - E_0)$ . Estas funciones de onda no son exactas pero son las mejores entre todas las funciones presentes en la formula (2.24). Se ha reducido el problema de valores propios, ecuaciones (2.16) y (2.17), a una expresión de onda para un átomo hidrogenoide, ecuación (2.15), en un espacio efectivo con dimensión fractal variable.

## 2.6 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONÓMETRICO PARA ANALIZAR LA FUNCIÓN ENVOLVENTE

El método de barrido trigonométrico [17-19] es un método numérico de alta precisión que permite resolver ecuaciones diferenciales de la forma:

$$-\frac{1}{S(r)} \frac{d}{dr} S(r) \frac{d\Psi}{dr} + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r) \quad r_{\min} < r < r_{\max} \quad (2.34)$$

La ecuación hidrogenoide (2.33) se puede escribir así

$$\Phi_{lm}'' + w\Phi_{lm}' + \left[ u - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \Phi_{lm} = 0 \quad (2.35)$$

donde

$$w = \frac{d}{dr} \ln(J(r)) = \frac{2}{r} + \bar{w} \quad (2.36)$$

$$\bar{w} = \frac{d}{dr} \ln(P) \quad (2.37)$$

$$P_{lm}(r) = \frac{2\pi}{r} \int_{-r}^r dz f_0^2(z) P_{lm}^2(z/r)$$

$$u = \frac{2}{r} + \bar{V}(r) + E - E_0 \quad (2.38)$$

Se propondrá que  $\Phi_{lm}$  sea de la forma

$$\Phi_{lm} = r^l y \quad (2.39)$$

reemplazando (2.39) en (2.35) se llega a:

$$r^l \left[ y'' + \left( \frac{2l}{r} + w \right) y' + \left( u + l \left( \frac{w}{r} - \frac{2}{r^2} \right) \right) y \right] = 0 \quad (2.40)$$

$$r^l \left[ \frac{1}{r^{2l}} \frac{d}{dr} r^{2l} \frac{d}{dr} + w y' + \left( u + l \left( \frac{w}{r} - \frac{2}{r^2} \right) \right) y \right] = 0$$

Se desea plantear el problema como un problema de Cauchy ya que se conocen técnicas computacionales eficientes para este tipo de problemas físicos. Para ello se define:

$$\begin{aligned} y &= A(r) \cos \beta(r) \\ y' &= A(r) \text{sen} \beta(r) \end{aligned} \quad (2.41)$$

con ello, se puede calcular

$$\frac{y''}{y} = \left( \frac{y'}{y} \right)' + \left( \frac{y'}{y} \right)^2 \quad (2.42)$$

que se puede expresar en términos de las funciones trigonométricas (2.41), de la siguiente forma

$$\frac{y''}{y} = -\frac{\beta'}{\cos^2 \beta} + \tan^2 \beta \quad (2.43)$$

Por lo tanto, la ecuación diferencial de segundo orden (2.40) se reduce a una de primer orden y el problema de contorno (2.34), (2.35) o (2.40) se reduce al problema de Cauchy

$$\frac{d\beta}{dr} = -\left\{ \operatorname{sen}^2 \beta + \left[ \frac{2(l+1)}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \right] \operatorname{sen} \beta \cos \beta + \left[ \frac{\hbar^2}{2m} + u \right] \cos^2 \beta \right\} \quad (2.44)$$

Esta ecuación diferencial, expresión (2.44) presenta singularidades cuando  $r \rightarrow 0$ . Tomando el límite cuando  $r \rightarrow 0$ ,  $u$  dado por (2.38) tiende

$$\lim_{r \rightarrow 0} u; u \rightarrow \frac{2}{r} \quad (2.45)$$

y haciendo el siguiente cambio de variable,

$$x = \tan(\beta) \quad (2.46)$$

la ecuación (2.44), se puede expresar

$$\frac{dx}{dr} = -\left\{ x^2 + \left[ \frac{2(l+1)}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \right] x + \left[ \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{2}{r} \right] \right\} \quad (2.47)$$

Con lo cual, los términos conflictivos,

$$\left[ \frac{2(l+1)}{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \right] x + \left[ \frac{\hbar^2}{2m} + \frac{2}{r} \right] = 0 \quad (2.48)$$

puede expresar así:

$$x(0) = -\frac{\hbar^2(0)l/2+1}{l+1} \quad (2.49)$$

o en términos de la coordenada de barrido trigonométrico

$$\beta(0) = -\operatorname{ArcTan}\left(\frac{\hbar^2(0)l/2+1}{l+1}\right) \quad (2.50)$$

Esta es una condición Física del problema ya que cuando el electrón esta cerca al ion, debe haber una compensación entre las energías cinética y potencial de dicha partícula. Otra condición Física del problema es: la grandes distancias la probabilidad

de encontrar la partícula es nula ya que dicha partícula estaría dentro de las paredes del pozo de potencial, para ecuación (2.40) es:

$$y(R_{\max}) = 0 \quad (2.51)$$

Por lo tanto, la expresión (2.44) se puede resolver numéricamente utilizando cualquier método convencional como el método de Rungge-Kutta. Las condiciones de frontera de (2.44) quedan:

$$\beta(0) = -\text{ArcTan}\left(\frac{w(0)l/2+1}{l+1}\right) \quad (2.52)$$

$$\beta(R_{\max}, E) = -\frac{\pi}{2} - \pi n_r$$

donde la condición para  $R_{\max}$  tiene en cuenta el hecho que la derivada es negativa, ecuación (2.44). En (2.41) se puede analizar que para  $y$  sea cero cuando  $r = R_{\max}$ ,  $\beta$  debe ser  $\pi/2$ . Ahora analizando (2.44) cuando  $\beta = \pi/2$ , se nota que la derivada es negativa, por lo tanto cuando  $y(R_{\max})=0$ ,  $\beta$  debe cumplir (2.52). Esta expresión para  $R_{\max}$  da una ecuación trascendente para los niveles energéticos.

La amplitud  $A(r)$  en (2.45) es utilizada para determinar la función de onda y esta dada por la expresión:

$$A(r) = A(0) \exp\left[\int_0^r dr \left\{ \sin \beta \left[ 1 - \frac{w}{r} - u \right] \cos \beta - \left[ \frac{2(l+1)}{r} + w \right] \sin \beta \right\}\right] \quad (2.53)$$

El método de barrido trigonométrico permite expresar las soluciones (2.24) en la forma

$$\psi_{D^0}(\mathbf{r}) = A(r)r^l f_0(r+\xi) \cos \beta(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (2.54)$$

donde  $f_0(r+\xi)$  esta dado por (2.15),  $\beta(r)$  se obtiene a través del método de Runge Kutta de cuarto orden conduciendo a que la amplitud  $A(r)$  en (2.53) quede determinado.

## 2.7 MÉTODO DE GALERKIN PARA MEJORAR EL CÁLCULO A TRAVÉS DEL MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL

Sea  $H$  el Hamiltoniano de un sistema físico cuyos valores y vectores propios se encuentran a través de

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad (2.55)$$

Se puede definir un vector llamado discrepancia  $|D\rangle$  que va estar dado por

$$|D\rangle = H|\Psi\rangle - E|\Psi\rangle \quad (2.56)$$

en este caso la discrepancia es cero.

En mecánica cuántica existen pocos problemas que se pueden resolver de forma exacta. El sistema físico ha analizar en este trabajo de grado, pertenece a la inmensa mayoría de los problemas físicos de los cuales no se pueden resolver en forma exacta.

Ahora bien, el método de Galerkin permite encontrar un vector tal que la proyección de este vector sobre la discrepancia sea cero para el Hamiltoniano de estudio.

Supóngase que el Hamiltoniano del sistema de estudio se puede dividir en dos Hamiltonianos, uno cuyos soluciones se conocen y otra al cual no se conocen las soluciones, llamándolo Hamiltoniano perturbativo

$$H = H_0 + H_p \quad (2.57)$$

además, sea  $\Psi^0$  el vector propio del Hamiltoniano conocido  $H_0$ , por consiguiente dicho vector propio se puede expresar en termino de sus bases

$$\Psi^{(0)} = \sum_{i=1}^n C_i |\varphi_i^{(0)}\rangle \quad (2.58)$$

y los valores propios son

$$H_0 |\varphi_i^{(0)}\rangle = E_i^{(0)} |\varphi_i^{(0)}\rangle \quad (2.59)$$

Reemplazando (2.57) y (2.58) en (2.56)

$$|D\rangle = \sum_{i=1}^n C_i \{ (H_0 + H_p) |\varphi_i^{(0)}\rangle - E |\varphi_i^{(0)}\rangle \} \quad (2.60)$$

Siendo esta discrepancia diferente de cero. Teniendo en cuenta (2.58), (2.60) queda

$$|D\rangle = \sum_{i=1}^n C_i \{ H_p |\varphi_i^{(0)}\rangle - (E - E_i^{(0)}) |\varphi_i^{(0)}\rangle \} \quad (2.61)$$

Multiplicando por la izquierda por un vector propio del Hamiltoniano  $H_0$

$$\langle \varphi_m^{(0)} | D \rangle = \sum_{i=1}^n C_p \{ \langle \varphi_m^{(0)} | H_p | \varphi_i^{(0)} \rangle - (E - E_i^{(0)}) \delta_{mi} \} \quad (2.62)$$

Si  $m \neq p$  entonces la proyección sobre la discrepancia es cero, (2.62) reduciéndose a

$$\sum_{i=1}^n C_p \{ \langle \varphi_m^{(0)} | H_p | \varphi_i^{(0)} \rangle - (E - E_i^{(0)}) \delta_{mi} \} = 0 \quad (2.63)$$

La expresión (2.63) tienen la forma

$$(A - \lambda I)\vec{v} = 0 \quad (2.64)$$

cuya solución se encuentra a través de la ecuación característica

$$\det(A - \lambda I) = 0 \quad (2.65)$$

Por lo tanto, a través del método de Galerkin proyectivo se puede encontrar la energía del sistema (E) para cada estado n del problema no perturbativo y una función de onda para el Hamiltoniano H, junto con sus funciones bases.

Para el problema que atañe a este trabajo, se van a utilizar como funciones base del problema no perturbativo las funciones envolventes  $\Phi_{ml}(r)$  dadas por (2.39)

$$\Phi_{ml}(r) = r^l A(r) \cos \beta(r) \quad (2.66)$$

Que son las soluciones a las ecuaciones diferenciales (2.33) que van ser tomadas como el Hamiltoniano no perturbativo.

Como Hamiltoniano no perturbativo se tomara la ecuación diferencial (2.33) que se ha obtenido a través de la aproximación (2.24). Como hamiltoniano perturbativo se toma la diferencia entre los operadores presentes en las ecuaciones diferenciales (2.23) con (2.33) ya que es la descripción del mismo fenómeno físico con la diferencia que a través de la ecuación diferencial (2.23) se hace de forma exacta y a través de la ecuación diferencial (2.33) se hace de forma aproximada (2.24)

$$H_p = H_{EXA} - H_{DF} \quad (2.67)$$

donde  $H_{EXA}$  va estar dado por el operador diferencial presente en (2.23)

$$H_{EXA} = -\nabla^2 - 2(\nabla \ln f_0) \cdot \nabla - \frac{2}{r} - [E(D^0) - E_0] \quad (2.68)$$

Y el Hamiltoniano de dimensión fractal,  $H_{DF}$  esta dado por los operadores presentes en la ecuación (2.33)

$$H_{DF} = \frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[ J(r) \frac{d}{dr} \right] - \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} - (E^0(D^0) - E_0) - \frac{2}{r} - \bar{V} \right] \quad (2.69)$$

entonces la diferencia entre (2.68) y (2.69) queda

$$H_p = -\nabla^2 - \frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[ J(r) \frac{d}{dr} \right] - 2(\nabla \ln f_0) \cdot \nabla + \frac{l(l+1)}{r^2} - \bar{V} \quad (2.70)$$

con esto, las relaciones que permiten corregir las energías de enlace para cada estado se encuentran a través de

$$\sum_{l=1}^n \sum_{m=1}^l C_p \left\{ \langle \Phi_{mi}(r) | H_p | \Phi_{mi}(r) \rangle - (E - E_{mi}^{(0)}) \delta_{mi,mi} \right\} = 0 \quad (2.71)$$

Para resolver este sistema hay que calcular la ecuación característica. Como un trabajo de pre-grado se deja hasta acá el presente trabajo. En el siguiente capítulo se graficará la dimensión fractal versus la distancia electrón donador y también se graficará la dependencia de la energía de enlace para diferentes estados. Ello dará una muestra de que tan buenas son las funciones de base  $|\Phi_{mi}(r)\rangle$ .

### 3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En esta parte de la tesis se presentan los resultados de cálculo de las energías de enlace y la dimensión fractal para diferentes estados en función del ancho del pozo y de la posición de la impureza utilizando el método de dimensión fractal extendido. Se entiende que estos resultados deben ser mejorados a través del método de Galerkin permitiendo la mezcla de este estado que en adelante nosotros llamemos como 1s-like, 2p-like, etc. estados.

#### 3.1 DIMENSIÓN FRACTAL PARA EL ESTADO EXCITADO DE UNA DONADORA EN UN POZO CUÁNTICO

Para dar una interpretación geométrica a este resultado nosotros, siguiendo el procedimiento de la dimensión fractal de Mandelbrot [16], se analiza un grupo de cajas esféricas con centro en la localización del donador y se define la dimensión como un parámetro de escala que relaciona la carga dentro de la caja con su radio. Se encontró que el mismo parámetro de escala determina la dependencia del Jacobiano de la ecuación de onda renormalizada con la separación del electrón-donador. Esta es la razón por la cual se denominó al procedimiento variacional propuesto por Mikhailov y colaboradores, *método de dimensión fractal* [15]. En este procedimiento, la dimensión fractal depende no sólo de la geometría de la heteroestructura sino también de la separación electrón-ion, siendo la dimensión fraccional una función del ancho del pozo y la posición del donador.

##### 3.1.1 EFECTO DEL ANCHO DEL POZO

Aunque en las teorías matemáticas existentes de dimensión fraccional la dimensión  $D$  no sólo toma valores enteros sino reales;  $D$  sólo tiene valores en ciertas cantidades relevantes como por ejemplo la masa de los objetos fractales  $M$  con distribución de densidad isotrópica  $\mu(r)$ , encerradas dentro de una esfera de radio  $R$  [16]

$$M = 4\pi \int_0^R \mu(r) r^2 dr = CR^D, \quad (3.1)$$

o la parte radial del Laplaciano [18]:

$$\nabla_D^2 = -\frac{1}{r^{D-1}} \frac{d}{dr} r^{D-1} \frac{d}{dr}, \quad (3.2)$$

donde la misma forma puede adoptarse extendiendo el dominio  $D$ . Para verificar si las relaciones (3.1) y (3.2) son compatible con (2.31) y (2.33) se consideró la densidad de carga de un electrón libre en el estado  $m$  como un objeto fractal. La carga total  $Q$  encerrada dentro de una esfera de radio  $R$  centrada en la posición del donador para este estado se calcula como:

$$Q = \int_0^R J_{lm}(r) dr, \quad (3.3)$$

donde  $J_{lm}$  está definido por (2.31). Asumiendo que la dependencia de  $Q$  con  $R$  similarmente a (3.1), es de tipo  $Q \sim R^D$ , donde  $D$  es la dimensión fractal por lo tanto, la dependencia de  $J_{lm}(r)$  con la separación electrón-donador

$$J_{lm}(r) = C(r)r^{D-1} \quad (3.4)$$

la parte radial de la ecuación (2.33) coincide en este caso con el Laplaciano (3.2) en el espacio  $D$  dimensional. Por lo tanto, las definiciones de la dimensión fraccional basadas en las relaciones (3.1) y (3.2), son compatibles con la ecuación (2.33) y esta puede ser interpretada como la ecuación de Schrödinger para un átomo hidrogenoide en un espacio  $D$  dimensional.

Si la dependencia del Jacobiano (2.31) con  $r$  fuera exactamente tipo ley de potencias, entonces, de acuerdo con el concepto de Mandelbrot, la densidad de carga podría ser considerada un fractal exacto (auto-similar). Ya que la dependencia del Jacobiano con el radio dado por la relación (2.31), no es una ley de potencias, excepto para casos muy especiales, la densidad de carga no puede ser considerada en este caso como un fractal exacto y rigurosamente la dimensión fractal puede ser definida únicamente en forma local, de esta forma, se asume que los parámetros  $C$  y  $D$  en la ecuación de escalamiento (3.4) dependen de  $r$ . La dimensión fractal local  $D^*(r)$  está relacionada con  $J_{lm}$  por la relación

$$D^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J_{lm}(r)}{dr} = 3 + r \frac{d \ln P_{lm}(r)}{dr} \quad (3.5)$$

donde se ha impuesto una condición para definir unívocamente la relación (3.4). Se considera como una condición adicional la relación entre  $D^*(r)$  y  $J_{lm}$  válida para cualquier fractal exacto para el cual  $C(r)$  y  $D^*(r)$  son exactas

$$\frac{d \ln C(r)}{dr} + \ln(r) \frac{d D^*(r)}{dr} = 0 \quad (3.6)$$

las ecuaciones (2.31), (3.5) y (3.6) establecen la relación entre el espacio actual cuyas propiedades están definidas por la geometría de la heteroestructura y un espacio efectivo con dimensión fractal variable dada por (3.5).

El resultado de los cálculos para los estados  $1s$  y  $2p$  de la dimensión fractal  $D^*(r)$  para un donador  $D^0$  centrado en un pozo cuántico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con diferentes anchos de pozo se muestra en la figura 2.

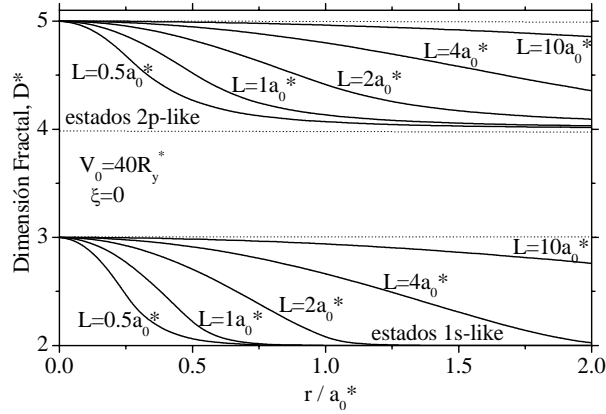


Fig. 3. Dimensión fractal como función de la separación electrón-donador para los estados  $1s$  y  $2p$  para un donador  $D^0$  centrado en un pozo cuántico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As.

Usándose las relaciones (2.31) y (3.5) se puede encontrar el comportamiento asintótico de la dimensión fractal del donador para pequeñas separaciones o grandes separaciones entre el electrón y el donador. Cuando  $r \rightarrow 0$ ,  $P_{lm} \rightarrow f_0^2 r^{2l}$  y por lo tanto,  $D^*$  en la vecindad del donador para el estado- $l$  es igual a  $D^* \rightarrow 3 + 2l$ . Para el caso cuando  $r \rightarrow \infty$   $P_{lm} \rightarrow r^{2l-1}$  y por lo tanto,  $D^* \rightarrow 2 + 2l$ . De esta manera,  $D^*$  decrece monótonamente desde  $3 + 2l$  hasta  $2 + 2l$ . por lo tanto,  $D^*$  es isomorfo con el momento angular orbital,  $l$ , un incremento en  $l$  produce un incremento en dos en la dimensión fractal. Este resultado se conoce en la teoría *Dimension Scaling* para números enteros de dimensiones  $D$  como *isomorfismo del momento angular* [19]. Los resultados de los cálculos para la dimensión fractal,  $D^*(r)$ , para un donador centrado en un pozo cuántico de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As con diferentes anchos del pozo se muestran en la Fig. 2. Se ve que para los diferentes anchos del pozo,  $D^*(r)$  decrece monótonamente desde 3 a 2 para los estados  $1s$ -like y desde 5 a 4 para los estados  $2p$ -like, además, anchos del pozo mas grandes la dimensión fractal decrece lentamente. La dimensión fractal esta relacionada con la densidad de electrón libre en el pozo cuántico y un análisis en detalle de su distribución da una interpretación de tal comportamiento de  $D^*(r)$ . Para una separación entre el electrón y el donador muy pequeña, la interacción de Coulomb es dominante y la influencia del confinamiento es despreciable y, la distribución de carga en la vecindad del donador es similar a la del átomo hidrogenoide, es decir, la carga dentro de la esfera de radio  $R$  decrece como  $\sim R^{-3}$  para estados  $1s$ -like y  $\sim R^{-5}$  para estados  $2p$ -like, un objeto fractal de 3 y 5 dimensiones. Con el incremento en la separación entre el electrón y el donador la influencia del confinamiento gradualmente se incrementa y la interacción de Coulomb llega ser despreciable obteniéndose que la distribución de carga sea similar a un electrón libre en un pozo de potencial. Por lo tanto, para una separación entre el

electrón y el donador amplia, el radio de la esfera  $R$  llega ser considerablemente mas grande que el ancho del pozo y la carga dentro de esta esfera se incrementa como  $\sim R^2$  para los estados  $1s$ -like y como  $\sim R^4$  para los estados  $2p$ -like, siendo para objetos fractales de dimensión 2 y 4 respectivamente.

### 3.1.2 EFECTO DE LA POSICIÓN DE IMPUREZA

Un resultado similar se grafica en la Fig. 3(a, b) para diferentes posiciones del donador en el pozo cuántico. El comportamiento de la dimensión fractal  $D^*(r)$  cambia de acuerdo al desplazamiento del donador en la barrera de potencial, las curvas son inicialmente crecientes partiendo de la dimensión 3 del estado  $1s$ -like llegando a hasta un pico máximo siendo después monótonamente decrecientes hasta 2. A mayor desplazamiento del centro del pozo cuántico, mayor es el valor máximo de la dimensión fractal. La razón para el incremento de la dimensión fractal en la parte inicial de las curvas en la Fig. 3 para el donador descentrado, es debido a que el electrón tiende a estar localizado en el centro del pozo cuántico producido por el fuerte confinamiento a lo largo del eje de crecimiento en el pozo, aunque,

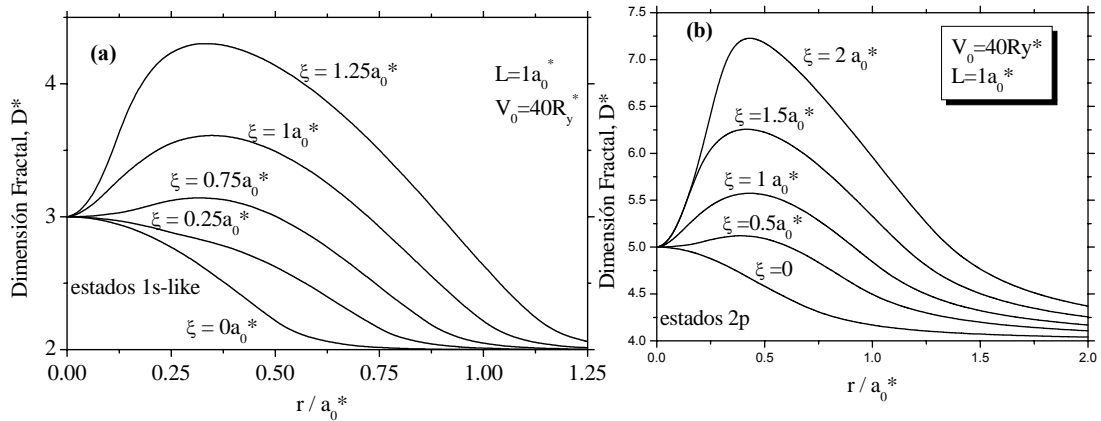


Fig. 4. Dimensión fractal para un donador no centrado en un pozo de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As como función de la separación del electrón y donador, para diferentes posiciones del donador: (a) estado  $1s$ -like (b) estado  $2p$ -like

el donador esta desplazado del centro y la densidad de carga se incrementa a lo largo de la posición del donador hasta el centro del pozo. Como el donador esta localizado cerca de la barrera, la distribución de carga del estado  $1s$ -like del donador llega ser similar a la distribución del estado  $2p$ -like, por lo tanto, la carga total dentro de la esfera de radio  $R$  se incrementa como  $\sim R^5$  de manera similar como para el estado  $2p$ -like. De esta manera, la distribución de la densidad de carga y la dimensión fractal, experimentan transformaciones como si el número angular orbital del estado hubiera sido incrementado.

### 3.2 ESPECTRO ELECTRÓNICO DE UNA DONADORA EN UN POZO CUÁNTICO

En esta sección se presentan los resultados obtenidos para la energía de enlace de un donador en un pozo cuántico. Para resolver este problema en forma aproximada, se utilizó el método de dimensión fractal partiendo del principio variacional de Schörodinger. Para poder calcular la energía de enlace fue necesario recurrir a métodos numéricos tal como el método de barrido trigonométrico.

En la Tabla 1. se presentan algunos valores de las energías de enlace para el estado base de una impureza centrada en un pozo de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As para diferentes anchos del pozo donde nuestros resultados obtenidas a través del método de dimensión fractal columna (b) se comparan con los resultados en Ref. [4] obtenido a través del método variacional, con los resultados en Ref. [20] obtenido a través del método Monte Carlo y con los resultados exactos para el modelo de pozo cuántico de barrera infinita .

L(Å)	(a)R*y	(b) R*y	(c) R*y	(d) R*y
0	—	—	—	4.0
10	2.70	—	—	—
20	2.80	2.13	—	—
50	2.47	2.30	—	—
100	2.17	2.05	2.09	—
200	1.73	1.68	1.74	—
∞	—	1.09	—	1.0

Tabla 1. Energías de enlace para el estado 1s de una impureza centrada en un pozo de GaAs/Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As para diferentes anchos del pozo: (a) resultados de la referencia [4], (b) resultados del presente trabajo (c) resultados del método Monte Carlo y (d) valores teóricos exactos de las energías para el caso de la barrera infinita

Al comparar estos resultados hay que tener en cuenta que el cálculo de la Ref. [4] se ha obtenido para un modelo en que se consideraron masas efectivas del electrón en el pozo y en la barrera diferentes y que para esto modelo siempre se obtienen las energías mayores. Por otro lado, el cálculo de la Ref. [20] puede considerarse como exacto debido a la alta precisión del método Monte Carlo. Por esta razón, nuestro resultado pueden considerarse como muy buenos, teniendo en cuenta que aplicación posterior del método de Galerkin aplicado a nuestra función de base debe mejorar nuestro resultado y acercarlos mas al del método Monte Carlo.

Para el análisis del efecto del ancho del pozo sobre una impureza donadora en un pozo cuántico se usará la fórmula exacta para los niveles energéticos de un átomo hidrogenoide en un espacio de dimensión

$$E_N = -\frac{1}{[N + (D-3)/2]^2}; \quad D = 1, 2, 3, \dots; \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (3.7)$$

donde  $N$  es el número cuántico principal, en nuestra notación  $N = n + l$ . Estas energías pueden considerarse como estimativas para nuestro cálculo cuando el ancho del pozo tiende al infinito y cuando tiende al cero. En el primer caso nuestros resultados deben coincidir con los de la fórmula (3.7) para  $D = 3$ . En el segundo caso cuando el ancho del pozo se hace muy pequeño y la barrera del pozo es muy grande nuestros resultados deben coincidir con los de la fórmula (3.7) para el caso  $D = 2$ . En el caso general debe cumplirse la siguiente estimación:

$$\frac{1}{[n+l]^2} < E_b(n, l, m) < \frac{1}{[n+l-1/2]^2} \quad (3.7a)$$

donde  $E_b(n, l, m)$  es la energía de enlace para el estado con los números cuánticos  $(n, l, m)$  de una donadora confinada en un pozo cuántico. Para facilitar el análisis de los resultados de cálculo, nosotros en la Tabla 2 presentamos los valores de las energías de enlace para diferentes estados cuando la dimensión del espacio es dos y tres.

N \ D	D	
	2	3
1	4.00	1.00
2	0.44	0.25
3	0.16	0.11
4	0.08	0.06
5	0.05	0.04

Tabla 2. Las energías de enlace para los primeros cinco niveles energéticos en unidades de Rydberg efectivo para el átomo de hidrógeno en dos y tres dimensiones. Las energías de enlace para  $D = 3$  sirven como estimaciones para niveles correspondientes de una donadora cuando  $L \rightarrow \infty$  y las energías de enlace para  $D = 2$  sirven como estimaciones para niveles correspondientes de una donadora cuando el ancho del pozo es muy pequeño.

### 3.2.1 EFECTO DEL ANCHO DEL POZO

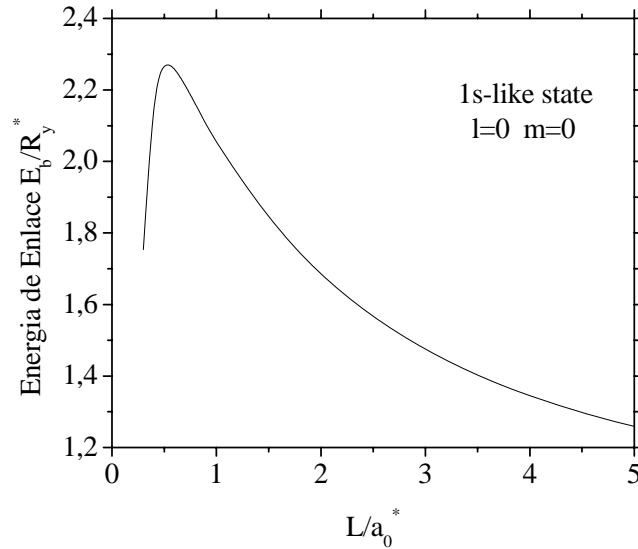


Fig 5. Energía de enlace en función del ancho del pozo para el estado base,  $n=1$ ,  $l=0$ ,  $m=0$

La figura 5 indica que para distancias entre la barrera y la impureza menor a un radio de Bohr, el sistema está fuertemente confinado, indicado por el pico de la gráfica. Bastard fue el primero en demostrar tal comportamiento de la energía de enlace con la distancia entre la barrera y la donadora, ver referencia [5]. En esta gráfica también se observa el cambio de dimensión en las orbitas electrónicas, para ello hay que comparar los casos límites. (1) cuando la distancia entre la donadora y la barrera es grande, la energía de enlace tiende a un valor próximo a uno, que está de acuerdo con la tabla 2 para el caso de un sistema tridimensional, con número cuántico principal uno. (2) para el caso cuando la distancia entre la barrera y la donadora se hace muy pequeña, la energía de enlace tiende a el valor de 4 (ver tabla 2, para  $n=1$ ) para una donadora confinada en un pozo infinito. En este trabajo la donadora está confinada en un pozo de potencial finito por lo cual al disminuir la distancia entre la barrera y la donadora las orbitas electrónicas dejan de estar confinadas y se desbordan del pozo de potencial comportándose como orbitas del átomo hidrogenoide en tres dimensiones.

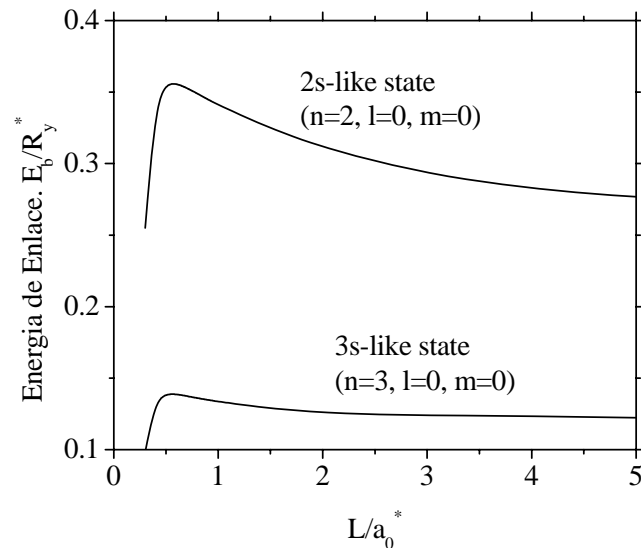


Fig. 6. Energía de enlace para los dos primeros estados excitados,  $n=2, 3$ , con  $l=0$ ,  $m=0$

Las figuras 6 representan la energía de enlace para estados excitados, 2s-like y 3s-like. Para estos casos la energía de enlace se hace mucho menos intensa pero aun así, estos estados excitados muestran como las orbitas electrónicas se van volviendo casi planares a medida que la distancia entre la barrera y el donador se hace pequeña. Para ello compárese el valor para  $N=2$ ,  $D=2$  en la tabla 2 con la grafica del estado 2s-like. La grafica muestra una tendencia a 0.4 pero debido a que la barrera es finita, las orbitas electrónicas se desbordan de la barrera, esto es cuando el ancho del pozo es pequeño. Para el caso cuando el ancho del pozo es extenso, la donadora se comporta como un átomo hidrogenoide libre. La tabla 2 indica que para el caso cuando  $N=2$  y  $D=3$  la energía de enlace es 0.25 para un átomo hidrogenoide libre. La grafica muestra una tendencia a 0.25. Para el estado 3s-like se observa el mismo comportamiento: para anchos del pozo pequeños, la grafica debería tender a 0.16 ( $N=3$ ,  $D=2$ ), sistema bi-dimensional. Nuevamente no llega a este valor debido al desbordamiento de los estados electrónicos. Para el caso cuando la distancia del pozo es grande, hay un comportamiento de átomo de hidrogeno libre y según la tabla 2 la energía de enlace debe ser 0.11, valor al cual la energía de enlace del estado 3s-like tiende.

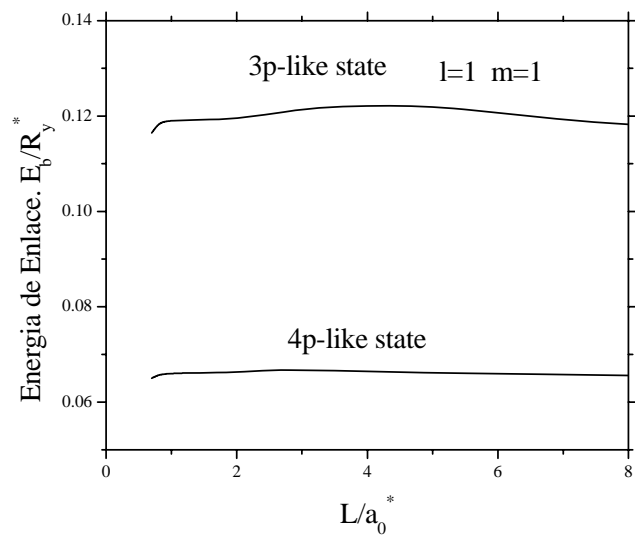


Fig. 7 Energía de enlace para  $n=2,3$   $l=1$ ,  $m=1$

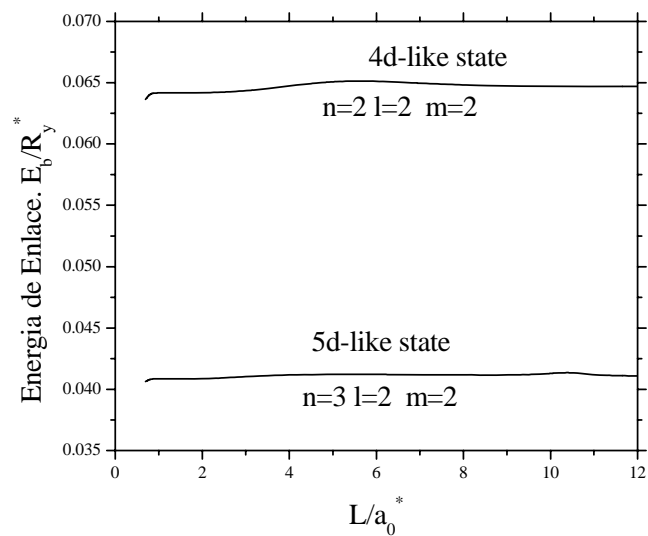
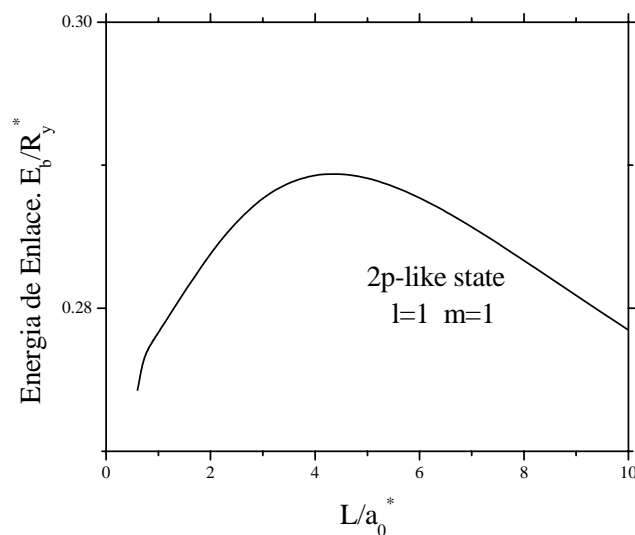


Fig.8 Energía de enlace para  $n=2,3$  con  $l=2$ ,  $m=2$

Debido a que las orbitas electrónicas de los estados 3p-like, 4p-like (figura 7) y 4d-like, 5d-like (Figura 8) tienen una gran extensión en el espacio, dichas orbitas no son muy sensibles a un cambio en el ancho del pozo conduciendo a que siempre se comporten como a tomos hidrogenoides libres. En la figura 7, para el caso del estado 3p-like se observa que a pesar que el ancho del pozo cambia el valor de la energía de enlace mantiene un promedio de 0.12. En la tabla 2 corresponde al caso cuando  $N=3$  que corresponde al estado 3p-like y  $D=3$  para un átomo hidrogenoide libre, cuyo valor de energía de enlace es 0.111. Para el estado 4p-like,  $N=4$   $D=3$ , debe estar próximo al valor 0.0625 que es para el caso de un átomo hidrogenoide libre en tres dimensiones. De igual forma, la figura 8 muestra que la energía de enlace tiene un comportamiento tipo átomo de hidrogeno libre en tres dimensiones cuyos valores exactos son 0.0625 y 0.04 para los estados 4d-like y 5d-like respectivamente.



*Fig. 9. Energía de enlace para  $n=1, l=1, m=1$*

En la figura 9 se observa que para el estado 2p-like con  $m=1$ , la energía de enlace tiene un fuerte comportamiento con el ancho del pozo, debido a la pendiente de la grafica, pero sin alejarse del valor de 0.25 que corresponde para un átomo hidrogenoide en 3 dimensiones para los estados p,  $N=2$   $D=3$  en tabla 2.

#### **4.CONCLUSIONES**

Se ha presentado un procedimiento que se puede considerar una extensión del Método de Dimensional Fractal aplicado anteriormente solo para el estado base.

Partiendo del principio variacional de Schödinger, se logro establecer las funciones de base necesarias para aplicar el método de Galerkin, siendo ellas consistentes con los resultados ya observados a lo largo de varias décadas de estudio de las donadoras confinadas en pozos cuánticos.

Se ha desarrollado el método numérico para calcular las funciones de base necesarias en el método de Galerkin

Se calculo las energías de enlace para diferentes estados en función del ancho del pozo y la posición de la impureza

Se calcularon las dimensiones fraccionarias para diferentes estados en función de la separación electrón-ion para diferentes posiciones de las impurezas y diferentes anchos del pozo.

Se ha establecido una concordancia entre el momento angular orbital del estado del electrón y la dimensión fraccionario, conocida en la teoría atómica como isomorfismo dimensional.

## 5. APÉNDICE

### 5.1 Principio Variacional de Schrödinger

Supóngase que se tiene un Hamiltoniano no separable como (2.16)

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (\text{A.1})$$

Por lo tanto, para resolver este problema analíticamente se utilizara métodos aproximados, tales como teoría de perturbaciones, método variacional, principio variacional de Schrödinger, etc. Este último se empleará en este trabajo. Se minimizará el siguiente funcional:

$$F[\Psi] = \langle \Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle \quad (\text{A.2})$$

donde  $\hat{H}$  y  $E$  representan el Hamiltoniano y la energía del sistema, respectivamente y  $\Psi(\mathbf{r})$  es una función de prueba. Si  $F[\Psi]$  es mínimo, entonces:

$$\delta F[\Psi] = \langle \delta\Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle + \langle \Psi | \hat{H} - E | \delta\Psi \rangle = 0 \quad (\text{A.3})$$

Puesto que  $(\hat{H} - E)$  es auto-adjunto, se tiene que:

$$\langle \delta\Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H} - E | \delta\Psi \rangle \quad (\text{A.4})$$

entonces (A.3) puede escribirse como:

$$2\langle \delta\Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{A.5})$$

y considerando que esta relación es válida  $\forall \delta\Psi^*$ , debe cumplirse que

$$(\hat{H} - E)|\Psi\rangle = 0 \quad (\text{A.6})$$

o bien

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{A.7})$$

Por lo tanto, el problema variacional

$$F[\Psi] = \langle \Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle \rightarrow \min \quad (\text{A.8})$$

es equivalente a la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (\text{A.9})$$

Este es el principio variacional de Schrödinger y su ventaja respecto al método variacional de Ritz, radica en que se pueden utilizar una función de prueba sin parámetros variacionales, es decir, la función de prueba puede estar expresada en términos de otra función lo cual permite elegir una función mas precisa y flexible para describir mejor el sistema físico en cuestión.

## 5.2. Programa Principal

```

$DEBUG
$LARGE
  PARAMETER (N=500,np=200,nj=70,mst=3)
  IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
  dimension naa(20), nbb(20), cc(20), dd(20)
  dimension Fmalla(n),Rmalla(n),fond(n,20)
  EXTERNAL ETPAR,FZ
c PARAMETROS DE POZO: V0-ALTURA DE BARRERA, AL-ANCHO DEL POZO,
C      Zi-POSICION DE LA IMPUREZA
  COMMON /POZO/ V0,AL,Zi
  common /Jacobian/xj(nj),yj(nj),aj(nj),bj(nj),cj(nj),dj(nj)
  common /logjac/xlj(nj),ylj(nj),alj(nj),blj(nj),clj(nj),dlj(nj)
c DONDE aj,bj,cj,d, son los coeficientes para S-PLINE.
C ylj VA ESTAR RELACIONADO CON EL LOGARITMO DEL JACOBIANO
  common /enerZ/ Ez
  Common /enivel/ Eniv
  Common /etheta/ Etheta
  common /front/ Rmax,Rmaxtheta
  common /state/ mr,nr,lr
c Real*8 a,b,Abserr,Relerr,Result,Errest,Flag
c PARA GRAFICAS NO SE NECESITA DOBLE PRECISION POR ESO LOS
PARAMETROS
C zp, yp, xpj, ypj son sencillos
  real zp(np),yp(1,np),xpj(nj),ypj(2,nj),xplj(nj),yplj(1,nj)
  real xpe(n),ype(mst,n), eb(mst)
  character*11 name
  external fright
c Parametros del pozo adimensionales
  V0=40.0
  EL=0.0
  write(*,*) 'al---?'
  read(*,*) al
  zi=0.0
  nest=mst
  open(5,file='D0enlace.dat')
  write(*,*) ' mr,lr-----?'
  read(*,*) mr,lr
  eps=1.0D-8
  CALL Raiz1(ETPAR,EL,eps,EZ)
c WRITE(*,*)'ENERGIA DEL ESTADO BASE'

```

```

c  WRITE(*,*) EZ
  open(1,file='funp.dat')
c Encontramos energia del electron libre, resolviendo ecuacion transendente
c dado por funcion ETPAR con tolerancia EPS
c  Crear una tabla para graficar las funciones de onda
  zmax=2*AL
  zmin=-zmax
  hp=(zmax-zmin)/(np-1)
  do i=1,np
    z=zmin+hp*(i-1)
    zp(i)=z
    ikp=1
    yp(ikp,i)=FP(EZ,Z)
    write(1,11) zp(i),yp(IKP,i)
  end do
11  format(1x,22f10.5)
  close(1)
  m=1
  name='fz.pcx'
c  call graphic(zp,yp,m,np,name)
c C lculo del Jacobiano en nj,ver PARAMETER, puntos entre r=0 y r=Rmax
  do nr=0,nest-1
    Rmax=20.0*al*(nr+mr+1)**2
    hj=Rmax/(nj-1)
    do j=1,nj
      r=0.0001+hj*(j-1)
      xj(j)=r
      xlj(j)=r
      yyy=FunJac(r)
      yj(j)=FunJac(r)
      P=yyy
c      P=yyy/(r**(2*(1+mr)))
      ylj(j)=dlog(P)
      xpj(j)=r
      xplj=r
      ypj(1,j)=yj(j)
    end do

c-----
c  Encontrar los coeficientes SPLINE para Jacobiano
  CALL SPLINE(nj,xj,yj,aj,bj,cj,dj,KPR,INT)
  CALL SPLINE(nj,xlj,ylj,alj,blj,clj,dlj,KPR,INT)
c Graficar Jacobiano en funcion de r
  do j=1,nj
    r=hj*(j-1)
    ypj(2,j)=FunJacS(r)
  end do
  m=2
  name='jac2m1.pcx'
c  call graphic(xpj,ypj,m,nj,name)
  open(2,file='logjac.dat')
  do j=1,nj

```

```

        r=0.0001+hj*(j-1)
        xplj(j)=r
        yplj(1,j)=wFun(r)
        write(2,11) xplj(j), yplj(1,j)
    end do
    close(2)
    m=1
    name='logj.pcx'
c    do j=1,nj
c        read(2,11) xplj(j), yplj(3,j)
c    end do
c    call graphic(xplj,yplj,m,nj,name)
c Encontrar las energias de D0
    ITMAX=500
    Call Sweep(Fright,Ener,DISCREP,ITMAX)
    naa(nr+1)=nr
    nbb(nr+1)=mr
    cc(nr+1)=ener
    dd(nr+1)=discrep
C    call Fun_Env(Rmax,Ener,Rmalla,Fmalla)
    write(5,*) ' nr= ',nr, ' mr= ',mr
c    Write(5,*) ' Energy= ', Ener, ' Discrepancia= ', Discrep
    eb(nr+1)=-Ener
    do i=1,n
        fond(i,nr+1)=Fmalla(i)
c    write(5,11) Rmalla(i),Fmalla(i)
    end do
end do
    write(5,*) ' energies'
    write(5,13) al,(eb(jjj),jjj=1,mst)
13 format(2x,f5.1,6f10.5)
    close(5)
    open(3,file='FOEnvol.dat')
    do i=1,n
        write(3,11) Rmalla(i),(fond(i,j),j=1,nest)
        xpe(i)=Rmalla(i)
        do j=1,nest
            ype(j,i)=fond(i,j)
        end do
    end do
    close(3)
    name='fun_en.pcx'
c    call graphic(xpe,ype,nest,n,name)
    STOP
    END
C=====
====
c TODO PARA FUNCION DE ONDA FZ(z) Y ENERGIA EZ
C-----
C ECUACION TRASCENDENTE PARA LAS FUNCIONES DE ONDA PAR
    FUNCTION ETPAR(Ez)

```

```

IMPLICIT REAL*8(a-h,o-z)
COMMON /POZO/ V0,AL,Zi
AK=DSQRT(Ez)
AKAPA=DSQRT(V0-Ez)
X=0.5*AK*AL
ETPAR=AKAPA*DCOS(X)-AK*DSIN(X)
RETURN
END

```

C=====

```

C FUNCION DE ONDA PAR
FUNCTION FP(Ez,Z)
IMPLICIT REAL*8(a-h,o-z)
COMMON /POZO/ V0,AL,Zi
AK=DSQRT(Ez)
AKAPA=DSQRT(V0-Ez)
ZZ=ABS(Z)
X=0.5*AL*AK
Y=DCOS(X)
IF(ZZ.LT.AL*0.5) THEN
  FP=DCOS(AK*Z)
ELSE
  FP=Y*DEXP(AKAPA*(AL*0.5-ZZ))
END IF
RETURN
END

```

C-----

c El subprograma Raiz1 busca la solución de la ecuación  $func(x)=0$   
c dentro del intervalo (a,b) con la precisión eps,  
c usando el m,todo de bisección

```

subroutine Raiz1(func,a,eps,xraiz)
implicit real*8 (a-h,o-z)
COMMON /POZO/ V0,AL,Zi
HSTEP=0.01*V0
xl=a
fl=func(xl)

```

c los parametros del extremo derecho

```

1  xr=XL+HSTEP
  IF (XR.LE.V0-0.000001) THEN
    fr=func(xr)

```

c comparación de los signos de la función en los extremos

```

  if(fl*fr.GT.0.0) then
    XL=XR
    FL=FR
    GOTO 1
  ELSE

```

c inicialización del proceso de bisección

```

10  x=(xl+xr)/2.0d0
    if((xr-xl).le. eps) go to 40
    f=func(x)
    if(f*fl) 20,40,30
20  xr=x

```

```

        fr=f
c volver al siguiente paso del proceso bisección
    go to 10
c si signos son iguales se escoge el subintervalo derecha
30    xl=x
        fl=f
c volver al siguiente paso del proceso bisección
    go to 10
40    xraiz=x
        end if
c salir de subprograma
    ELSE
        WRITE(*,*)'EXCESO EN',XR
        read(*,*)
    END IF
    RETURN
    END

c -----
c TODO PARA EL JACOBIANO
c -----
c C lculo de la Integral de Jacobiano
    Function FunJac(rr)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    common /prm/ rp
    external FunSubInt
    if(rr.lt.0.0001) rr=0.0001
    r=rr
    a=-r
    b=r
    rp=r
    Relerr=1.0d-10
    Abserr=1.0d-10
    Call Quanc8(FunSubInt,a,b,Abserr,Relerr,Result,
    $          Errest,Nofun,Flag)
c    Write(*,*) Result,Errest
    FunJac=Result/r
    return
    end

c -----
    Function FunSubInt(z)
    parameter (mm=10)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    COMMON /POZO/ V0,AL,Zi
    common /enerZ/ Ez
    common /state/ mr,nr,lr
    common /prm/ rp
    DIMENSION PM(0:100,0:10),PD(0:100,0:10)
    r=rp
    ff1=fp(Ez,z-Zi)
    x=z/r
    call LPMN(100,8,10,X,PM,PD)

```

```

FunSubInt=ff1*ff1*pm(mr,lr)**2
return
end
C-----
c Funcion Spline para la FunJac(r)
function FunJacS(r)
parameter (Nj=70)
implicit double precision(a-h,o-z)
common /Jacobian/xj(nj),yj(nj),aj(nj),bj(nj),cj(nj),dj(nj)
c KPR, parametro que indica si se quiere obtener la funcion, KPR=0.Para
C las derivadas o integrales hay otros valores
KPR=0
FunJacS=SEVAL(KPR,nj,r,xj,yj,aj,bj,cj,dj)
return
end
C-----
C-----
c Funcion Spline para la derivada de log de FunJac(r)
function wFun(r)
parameter (Nj=70)
implicit double precision(a-h,o-z)
common /logjac/xlj(nj),ylj(nj),alj(nj),blj(nj),clj(nj),dlj(nj)
KPR=1
wFun=SEVAL(KPR,nj,r,xlj,ylj,alj,blj,clj,dlj)
return
end
C-----
SUBROUTINE LPMN(MM,M,N,X,PM,PD)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION (P,X)
DIMENSION PM(0:MM,0:N),PD(0:MM,0:N)
DO 10 I=0,N
DO 10 J=0,M
PM(J,I)=0.0D0
10 PD(J,I)=0.0D0
PM(0,0)=1.0D0
IF (DABS(X).EQ.1.0D0) THEN
DO 15 I=1,N
PM(0,I)=X**I
15 PD(0,I)=0.5D0*I*(I+1.0D0)*X**(I+1)
DO 20 J=1,N
DO 20 I=1,M
IF (I.EQ.1) THEN
PD(I,J)=1.0D+300
ELSE IF (I.EQ.2) THEN
PD(I,J)=-0.25D0*(J+2)*(J+1)*J*(J-1)*X**(J+1)
ENDIF
20 CONTINUE
RETURN
ENDIF
LS=1
IF (DABS(X).GT.1.0D0) LS=-1

```

```

XQ=DSQRT(LS*(1.0D0-X*X))
XS=LS*(1.0D0-X*X)
DO 30 I=1,M
30   PM(I,I)=-LS*(2.0D0*I-1.0D0)*XQ*PM(I-1,I-1)
DO 35 I=0,M
c   write(*,*) i
c   read(*,*)
35   PM(I,I+1)=(2.0D0*I+1.0D0)*X*PM(I,I)
DO 40 I=0,M
DO 40 J=I+2,N
    PM(I,J)=((2.0D0*J-1.0D0)*X*PM(I,J-1)-
&      (I+J-1.0D0)*PM(I,J-2))/(J-I)
40  CONTINUE
    PD(0,0)=0.0D0
DO 45 J=1,N
45   PD(0,J)=LS*J*(PM(0,J-1)-X*PM(0,J))/XS
DO 50 I=1,M
DO 50 J=I,N
    PD(I,J)=LS*I*X*PM(I,J)/XS+(J+I)
&      *(J-I+1.0D0)/XQ*PM(I-1,J)
50  CONTINUE
    RETURN
    END

```

### 5.3 Librería SWP.for

```

$debug
$large
c-----
c ELECTRON LIBRE
c-----
c Subprograma que describe las partes derechas
c de la ecuacion de onda para electron desacoplado
  Subroutine Fright(r,y,yp)
C  x es phi, y es teta y yp la derivada de teta respecto de phi
  Implicit Real*8 (a-h,o-z)
  Common /enivel/ Eniv
  common /state/ mr,nr,lr
  external wfun
    sn=dsin(y)
    s2=sn*sn
    cs=dcos(y)
    cs2=cs*cs
    ww=wfun(r)
    u=(2.0d0/r+Eniv)
    u=u+ww*lr/r
    w=2*(1+lr)/r+wfun(r)
    yp=-(s2+w*sn*cs+u*cs2)
  return
  end
c-----
  Subroutine Sweep(Fright,Ener,DISCREP,ITMAX)

```

```

c PARA ESTADOS PARES!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!
  parameter (NM=2000)
  Implicit Real*8 (a-h,o-z)
  Common /En_Front/ Emin,Emax
  dimension fonda(NM),xonda(NM)
  Common /nivel/ Eniv
  common /state/ mr,nr,lr
  common /front / Rmax
  external Fright
c Solucion de ecuacion transcendente
  pi=4.0d0*datan(1.0)
  rinit=1.0d-8
  rout=Rmax
c Condiciones iniciales
  rr=0.0
  ww=wfun(rr)
  yinit=-datan((1.0d0+ww*lr/2.0)/(lr+1))
c Condiciones de frontera
  yfin=-pi*(0.5d0+nr)
c Limites para energias buscadas
  Emin=-4.0d0/(nr+mr+1)**2
  Emax=0.0d0
c inicio de busqueda de raices
  El=Emin
  Eniv=El
c el numero de iteraciones lo denotamos por it
  it=1
c Resolver problema de Cauchy
  call rngkt(Fright,rinit,rout,yinit,NM,xonda,fonda)
c Discrepancia o diferencia entre solucion encontrada en la frontera y yfin
  DISCREP=fonda(NM)-yfin
  write(*,*) it,Eniv,DISCREP
c Valor de discrepancia
  fl=DISCREP
c Pasar a siguiente valor de la energia
  Er=Emax
5   Eniv=Er
   it=it+1
   call rngkt(Fright,rinit,rout,yinit,NM,xonda,fonda)
   DISCREP=fonda(NM)-yfin
   fr=DISCREP
   write(*,*) it,Eniv,DISCREP
c Analizar las diferencias de los signos de discrepancias
  If(fl*fr.ge.0.0d0) then
    write(*,*) 'no hay ninguna raiz'
    read(*,*)
    Ener=Emax
    return
  end if
c En caso contrario iniciar la biseccion
10  Ex=(El+Er)/2.0d0

```

```

        Eniv=Ex
        it=it+1
    call rngkt(Fright,rinit,rout,yinit,NM,xonda,fonda)
    DISCREP=fonda(NM)-yfin
    fx=DISCREP
    write(*,*) it,Eniv,DISCREP
    if(it.gt.ITMAX) go to 40
    if(dabs(Er-EI).le.1.d-14) go to 40
c    if(dabs(DISCREP).le.1.d-20) go to 40
    if(fx*fl) 30,60,50
30    Er=Ex
    fr=fx
    go to 10
50    EI=Ex
    fl=fx
    go to 10
40    continue
60    Ener=Ex
    Return
    End

```

```

c-----
c Subrutina que realiza N pasos de Runge Kutta
c para una ecuaci3n diferencial de primera orden
c Parametros de entrada:
c  xin -el punto inicial
c  xout -el punto final
c  N - numero de los nodos de la malla
c  yin-valor de la funci3n en el punto inicial
c Parametros de salida:
c  x(i) -coordenadas de la malla, i=1,2,...,N
c  y(i)-valores de la funci3n sobre la malla
c-----

```

```

    subroutine rngkt(right,xin,xout,yin,N,x,y)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    dimension x(n),y(n)
    external right
c El paso de la malla
    h=(xout-xin)/(n-1)
c primer punto de la malla
    x(1)=xin
    y(1)=yin
    xpred=x(1)
    ypred= y(1)
    do i=2,N
c Paso de Runge-Kutta al siguiente punto de la malla
        call RK(right,xpred,ypred,h,xnext,ynext)
        x(i)=xnext
        y(i)=ynext
c Preparacion de los datos iniciales para siguiente paso
        xpred=xnext
        ypred=ynext
    end do
    end subroutine

```

```

    end do
    return
end
C-----
c Subrutina que realiza un paso de Runge Kutta
c para una ecuacin diferencial de primera orden  $dy/dx=f(y,x)$ 
c Las funciones de la parte derecha deben ser definidas
c en una subrutina externa "subroutine right(x,y,f)"
c Parametros de entrada:
c   x0 -el punto inicial
c   h  - longitud del paso
c   y0-valor de la funcin al inicio del intervalo
c Parametros de salida:
c   yf-valor de la funcin al final del intervalo
c   xf-el punto final
C-----
    subroutine RK(right,x0,y0,h,xf,yf)
    implicit real*8(a-h,o-z)
c Valores iniciales de la funcin
    yt=y0
    xt=x0
c C lculo del termino k1 en la formula de Runge Kutta
    call right (xt,yt,ak1)
c Preparacin del valor de la funcin para el segundo
c paso Runge-Kutta
    yt=y0+h*ak1/2.0d0
    xt=x0+h/2.0
c C lculo de los cofficientes k2
    call right (xt,yt,ak2)
c Preparacin del valor de la funcin para el tercer
c paso Runge-Kutta
    yt=y0+h*ak2/2.0d0
c   xt=x0+h/2.0
c C lculo de los cofficientes k3
    call right (xt,yt,ak3)
c Preparacin del valor de la funcin para el cuarto
c paso Runge-Kutta
    yt=y0+h*ak3
    xt=x0+h
c C lculo de los cofficientes k4
    call right (xt,yt,ak4)
c C lculo del valor de la funcin al final del intervalo
    yf=y0+h*(ak1+2*ak2+2*ak3+ak4)/6.0d0
    xf=xt
    return
    end
C-----
c subrutina para caulcular la funcion theta
c dados Ei, Rmax, Nmalla
C-----
    Subroutine Fun_Env(Rmax,Energy,Rmalla,Fmalla)

```

```

Parameter (Nmalla=500)
Implicit Real*8 (a-h,o-z)
dimension theta(nmalla), A(nmalla), Fun_Sub(nmalla)
dimension Rmalla(nmalla),Fmalla(nmalla)
c   Common /enivel/ Eniv
common /state/ mr,nr,lr
external fright
Eniv=Energy
rinit=1.0d-8
rout=Rmax
yinit=-datan(1.0d0/(mr+1))
call rngkt(Fright,rinit,rout,yinit,Nmalla,Rmalla,theta)
do i=1,Nmalla
  R=Rmalla(i)
  u=2.0d0/r+Eniv
  w=2*(1+mr)/r+wfun(r)
  t=theta(i)
  sn=dsin(t)
  s2=sn*sn
  cs=dcos(t)
  Fun_Sub(i)=(1-u)*sn*cs-w*s2
end do
h=(rout-rinit)/(Nmalla-1)
call dqsf(h,Fun_sub,A,Nmalla)
do i=1,Nmalla
  A(i)=dexp(A(i))
  Fmalla(i)=A(i)*dcos(theta(i))
end do
return
end

```

#### 5.4 Librería Libdon.for

```

$large
$debug
c
c 1. Subroutine Quanc8(fun,a,b,abserr,relerr,result,errest,nofun,flag)
c 2. SUBROUTINE SPLINE(N,X,Y,B,C,D,E,KPR,INT)
c 3. FUNCTION SEVAL(KPR,N,U,X,Y,B,C,D,E)
c 4. subroutine graphic(xp,yp,m,npoint,name)
c-----
c   Subroutine Quanc8(fun,a,b,abserr,relerr,result,
$           errest,nofun1,flag)
c   implicit double precision (a-h,o-z)
c   External Fun
c   Integer nofun1
c   Real*8 Qright(31),F(16),X(16),Fsave(8,30),
$   Xsave(8,30)
c
c   ETAPA NUMERO 1
c   Definicion de los valores iniciales de las
c   variables, no dependientes del intervalo de

```

```

c integracion y de las constantes
  Levmin=1
  Levmax=30
  Levout=6
  Nomax=5000
  Nofin=Nomax-8*(Levmax-Levout+2**(Levout+1))
c Si Nofun se aumenta hasta Nofin, entonces Alerta!!!
  W0=3956.0d0/14175.0d0
  W1=23552.0d0/14175.0d0
  W2=-3712.0d0/14175.0d0
  W3=41984.0d0/14175.0d0
  W4=-18160.0d0/14175.0d0
c Asignar el valor zero a las sumas variables
  Flag=0.0d0
  Result=0.0d0
  Cor11=0.0d0
  Errest=0.0d0
  Area=0.0d0
  Nofun1=0
  If (a.eq.b) Return

c
c   ETAPA NUMERO 2
c Asignar los valores iniciales a las variables
c que dependen del intervalo, en concordancia
c con el primer intervalo
  Lev=0
  Nim=1
  X0=a
  X(16)=b
  Qprev=0.0d0
  F0=Fun(x0)
  Stone=(b-a)/16.0d0
  X(8)=(X0+X(16))/2.0d0
  X(4)=(X0+X(8))/2.0d0
  X(12)=(X(8)+X(16))/2.0d0
  X(2)=(X0+X(4))/2.0d0
  X(6)=(X(8)+X(4))/2.0d0
  X(14)=(X(12)+X(16))/2.0d0
  X(10)=(X(8)+X(12))/2.0d0
  Do k=1,8
    j=k*2
    F(j)=Fun(X(j))
  End do
  Nofun1=9
c   ETAPA NUMERO 3
c Calculos principales. Se utilizan valores,Qprev,
c X0,X2,X4,....,X16
c y F0,F2,F4,....,F16 para calcular X1,X3,X5,....,X15 y F1,F3,
c F5,....,F15,Qleft,Qright,Qnow,Qdiff,Area
30 X(1)=(X0+X(2))/2.0d0
   F(1)=Fun(X(1))

```

```

Do j=3,15,2
  X(j)=(X(j-1)+X(j+1))/2.0d0
  F(j)=Fun(X(j))
End do
Nofun1=Nofun1+8
Step=(X(16)-X0)/16.0d0
Qleft=(W0*(F0+F(8))+W1*(F(1)+F(7))+W2*(F(2)+F(6))
$   +W3*(F(3)+F(5))+W4*(F(4))*Step
Qright(Lev+1)=(W0*(F(8)+F(16))+W1*(F(9)+F(15))+
$   W2*(F(10)+F(14))+W3*(F(11)+F(13))+
$   W4*(F(12))*Step
Qnow=Qleft+Qright(Lev+1)
Qdiff=Qnow-Qprev
Area=Area+Qdiff
c
c   ETAPA NUMERO 4
c   Chequeo de convergencia para el intervalo
  Esterr=dabs(Qdiff)/1023.0d0
  Tolerr=Relerr*Dabs(Area)
  If(Abserr.gt.Tolerr) Tolerr=Abserr
  Tolerr=Tolerr*Step/Stone
c   Tolerr=Damax1(Abserr,Relerr*Dabs(Area))*
c   $   (Step/Stone)
  If(Lev.lt.Levmin) go to 50
  If(Lev.ge.Levmax) go to 62
  If(Nofun1.gt.Nofin) go to 60
  If(Esterr.le.Tolerr) go to 70
c
c   ETAPA NUMERO 5
c   No hay convergencia
c   Definir el intervalo siguiente
50  Nim=2*Nim
  Lev=Lev+1
c   Almacenar los elementos de la parte derecha
c   del intervalo para usarlos en adelante
  Do i=1,8
    Fsave(i,Lev)=F(i+8)
    Xsave(i,Lev)=X(i+8)
  End do
c   Organizar los elementos de la parte izquierda
c   del intervalo para usarlos
  Qprev=Qleft
  Do i=1,8
    j=-i
    F(2*j+18)=F(j+9)
    X(2*j+18)=X(j+9)
  End do
  Go to 30
c   ETAPA NUMERO 6 (Alerta)
c   Numero de los calculos de la funcion
c   se acerco al numero critico y puede

```

```

c  superar el limite establecido
60  Nofin = 2*Nofin
    Levmax=Levout
    Flag=Flag+(b-X0)/(b-a)
    Go to 70
c  Numero de bisecciones
c  es igual a Levmax
62  Flag=Flag+1.0d0
c
c    ETAPA NUMERO 7
c
c  El proceso para el intervalo converge
c  Adicionar nuevos resultados a las sumas
c  variables
c
70  Result=Result+Qnow
    Errest=Errest+Esterr
    Cor11=Cor11+Qdiff/1023.0d0
c  Write(*,*) result
c
c  Establecer el intervalo siguiente
c
72  If(Nim.eq.2*(Nim/2)) go to 75
    Nim=Nim/2
    Lev=Lev-1
    Go to 72
75  Nim=Nim+1
    If(Lev.le.0) go to 80
c
c  Organizar los elementos
c  para el intervalo siguiente
c
    Qprev=Qright(Lev)
    X0=X(16)
    F0=F(16)
    Do i=1,8
        F(2*i)=Fsave(i,Lev)
        X(2*i)=Xsave(i,Lev)
    End do
    Go to 30
c
c    ETAPA NUMERO 7
c
c  Operaciones finales y salida
c  de los resultados
c
80  Result=Result+Cor11
c
c  El valor del Errest debe ser mayor
c  del error por redondeo
c

```

```

      If (Errest.eq.0.0d0) Return
82   Temp=Dabs(Result)+Errest
      If(Temp.ne.Dabs(Result)) Return
      Errest=2.0d0*Errest
      Go to 82
      End

```

```

C-----
      SUBROUTINE SPLINE(N,X,Y,B,C,D,E,KPR,INT)
      REAL*8 X(N),Y(N),B(N),C(N),D(N),E(N),U,T
      NM1=N-1
      IF (N.LT.2) RETURN
      IF (N.LT.3) GOTO 50
      D(1)=X(2)-X(1)
      C(2)=(Y(2)-Y(1))/D(1)
      DO 10 I=2,NM1
      D(I)=X(I+1)-X(I)
      B(I)=2.0*(D(I-1)+D(I))
      C(I+1)=(Y(I+1)-Y(I))/D(I)
      C(I)=C(I+1)-C(I)
10   CONTINUE
      B(1)=-D(1)
      B(N)=-D(N-1)
      C(1)=0.0
      C(N)=0.0
      IF(N.EQ.3) GOTO 15
      C(1)= C(3)/(X(4)-X(2))-C(2)/(X(3)-X(1))
      C(N)=C(N-1)/(X(N)-X(N-2))-C(N-2)/(X(N-1)-X(N-3))
      C(1)=C(1)*D(1)**2/(X(4)-X(1))
      C(N)=-C(N)*D(N-1)**2/(X(N)-X(N-3))
15   DO 20 I=2,N
      T=D(I-1)/B(I-1)
      B(I)=B(I)-T*D(I-1)
      C(I)=C(I)-T*C(I-1)
20   CONTINUE
      C(N)=C(N)/B(N)
      DO 30 IB=1,NM1
      I=N-IB
      C(I)=(C(I)-D(I)*C(I+1))/B(I)
30   CONTINUE
      B(N)=(Y(N)-Y(NM1))/D(NM1)+D(NM1)*(C(NM1)+2.*C(N))
      DO 40 I=1,NM1
      B(I)=(Y(I+1)-Y(I))/D(I)-D(I)*(C(I+1)+2.0*C(I))
      D(I)=(C(I+1)-C(I))/D(I)
      C(I)=3.0*C(I)
40   CONTINUE
      C(N)=3.0*C(N)
      D(N)=D(N-1)
      IF (KPR.EQ.9) THEN
      IF (INT.EQ.0) THEN
      U=-0.5
      ELSE

```

```

U=0.0
END IF
DO I=1,N-1
E(I)=U
DX=X(I+1)-X(I)
U=E(I)+DX*(Y(I)+DX*(B(I)/2.0D0+DX*(C(I)/3.0D0+DX*D(I)/4.0D0)))
END DO
E(N)=U
END IF
RETURN
50  B(1)=(Y(2)-Y(1))/(X(2)-X(1))
    C(1)=0.
    D(1)=0.
    B(2)=B(1)
    C(2)=0.
    D(2)=0.
    RETURN
END

C-----
FUNCTION SEVAL(KPR,N,U,X,Y,B,C,D,E)
REAL*8 X(N),Y(N),B(N),C(N),D(N),E(N)
REAL*8 U,DX,SEVAL
DATA I/1/
IF (I.GE.N) I=1
IF(U.LT.X(I)) GOTO 10
IF(U.LE.X(I+1)) GOTO 30
10  I=1
    J=N+1
20  K=(I+J)/2
    IF(U.LT.X(K)) J=K
    IF(U.GE.X(K)) I=K
    IF(J.GT.I+1) GOTO 20
30  DX=U-X(I)
    IF ( KPR.EQ.0 )
* SEVAL=Y(I)+DX*(B(I)+DX*(C(I)+DX*D(I)))
    IF ( KPR.EQ.1 )
* SEVAL=B(I)+DX*(2.0D0*C(I)+DX*3.0*D(I))
    IF ( KPR.EQ.2 )
* SEVAL=2.0*C(I)+DX*6.0*D(I)
    IF ( KPR.EQ.9)
* SEVAL=E(I)+DX*(Y(I)+DX*(B(I)/2.0+
* DX*(C(I)/3.0+DX*D(I)/4.00)))
    RETURN
END

C-----
subroutine graphic(xp,yp,m,npoint,name)
real xp(npoint),yp(m,npoint),ypp(10000),
@ ymin,ymax,xmin,xmax
character*10 name
c Calculo xmax,xmin,ymin , ymax
xmin=xp(1)

```

```

      xmax=xp(1)
      ymin=yp(1,1)
      ymax=yp(1,1)
      do i=1,npoint
        if(xp(i).lt.xmin) xmin=xp(i)
        if(xp(i).gt.xmax) xmax=xp(i)
        do j=1,m
          if(yp(j,i).lt.ymin) ymin=yp(j,i)
          if(yp(j,i).gt.ymax) ymax=yp(j,i)
        end do
      end do
      xmin = xmin-0.1
      ymin=ymin-0.1
c   Regimen grafico
      CALL GRINIT
c   Pagina
      CALL PAGE(30.,20.,'GRAF',4,0)
c   Mapping
      call limits(xmin,xmax,ymin,ymax)
      CALL REGION(8.,8.,18.,18.,0,0,0)
c   Color
      CALL SETPEN(16)
c   Ejes
      call axes(0,0,0.,0,0,0,0.,0,0)
      do j=1,m
c   color del grafico
        call setpen(j)
        do i=1,npoint
          ypp(i)=yp(j,i)
        end do
        call linum(xp,ypp,npoint)
      end do
c   salvar del grafico
      call wrpcx(16#a000,name)
c   Salir del regimen grafico
      CALL ENDPG(0)
      CALL MODA(3)
      return
      end
C
C .....
C
C   SUBROUTINE DQSF
C
C   PURPOSE
C   TO COMPUTE THE VECTOR OF INTEGRAL VALUES FOR A GIVEN
C   EQUIDISTANT TABLE OF FUNCTION VALUES.
C
C   USAGE
C   CALL DQSF (H,Y,Z,NDIM)
C
C   DESCRIPTION OF PARAMETERS

```

```

C      H   - DOUBLE PRECISION INCREMENT OF ARGUMENT VALUES.
C      Y   - DOUBLE PRECISION INPUT VECTOR OF FUNCTION VALUES.
C      Z   - RESULTING DOUBLE PRECISION VECTOR OF INTEGRAL
C            VALUES. Z MAY BE IDENTICAL WITH Y.
C      NDIM - THE DIMENSION OF VECTORS Y AND Z.
C
C      REMARKS
C          NO ACTION IN CASE NDIM LESS THAN 3.
C
C      SUBROUTINES AND FUNCTION SUBPROGRAMS REQUIRED
C          NONE
C
C      METHOD
C          BEGINNING WITH Z(1)=0, EVALUATION OF VECTOR Z IS DONE BY
C          MEANS OF SIMPSONS RULE TOGETHER WITH NEWTONS 3/8 RULE OR
A
C          COMBINATION OF THESE TWO RULES. TRUNCATION ERROR IS OF
C          ORDER H**5 (I.E. FOURTH ORDER METHOD). ONLY IN CASE NDIM=3
C          TRUNCATION ERROR OF Z(2) IS OF ORDER H**4.
C          FOR REFERENCE, SEE
C          (1) F.B.HILDEBRAND, INTRODUCTION TO NUMERICAL ANALYSIS,
C              MCGRAW-HILL, NEW YORK/TORONTO/LONDON, 1956, PP.71-76.
C          (2) R.ZURMUEHL, PRAKTISCHE MATHEMATIK FUER INGENIEURE UND
C              PHYSIKER, SPRINGER, BERLIN/GOETTINGEN/HEIDELBERG, 1963,
C              PP.214-221.
C
C      .....
C
C      SUBROUTINE DQSF(H,Y,Z,NDIM)
C
C      DIMENSION Y(1),Z(1)
C      DOUBLE PRECISION Y,Z,H,HT,SUM1,SUM2,AUX,AUX1,AUX2
C
C      HT=.3333333333333333D0*H
C      IF(NDIM-5)7,8,1
C
C      NDIM IS GREATER THAN 5. PREPARATIONS OF INTEGRATION LOOP
1 SUM1=Y(2)+Y(2)
  SUM1=SUM1+SUM1
  SUM1=HT*(Y(1)+SUM1+Y(3))
  AUX1=Y(4)+Y(4)
  AUX1=AUX1+AUX1
  AUX1=SUM1+HT*(Y(3)+AUX1+Y(5))
  AUX2=HT*(Y(1)+3.875D0*(Y(2)+Y(5))+2.625D0*(Y(3)+Y(4))+Y(6))
  SUM2=Y(5)+Y(5)
  SUM2=SUM2+SUM2
  SUM2=AUX2-HT*(Y(4)+SUM2+Y(6))
  Z(1)=0.D0
  AUX=Y(3)+Y(3)
  AUX=AUX+AUX

```

```

Z(2)=SUM2-HT*(Y(2)+AUX+Y(4))
Z(3)=SUM1
Z(4)=SUM2
IF(NDIM-6)5,5,2
C
C  INTEGRATION LOOP
2 DO 4 I=7,NDIM,2
  SUM1=AUX1
  SUM2=AUX2
  AUX1=Y(I-1)+Y(I-1)
  AUX1=AUX1+AUX1
  AUX1=SUM1+HT*(Y(I-2)+AUX1+Y(I))
  Z(I-2)=SUM1
  IF(I-NDIM)3,6,6
3  AUX2=Y(I)+Y(I)
  AUX2=AUX2+AUX2
  AUX2=SUM2+HT*(Y(I-1)+AUX2+Y(I+1))
4  Z(I-1)=SUM2
5  Z(NDIM-1)=AUX1
  Z(NDIM)=AUX2
  RETURN
6  Z(NDIM-1)=SUM2
  Z(NDIM)=AUX1
  RETURN
C  END OF INTEGRATION LOOP
7  IF(NDIM-3)12,11,8
C  NDIM IS EQUAL TO 4 OR 5
8  SUM2=1.125D0*HT*(Y(1)+Y(2)+Y(2)+Y(2)+Y(3)+Y(3)+Y(3)+Y(4))
  SUM1=Y(2)+Y(2)
  SUM1=SUM1+SUM1
  SUM1=HT*(Y(1)+SUM1+Y(3))
  Z(1)=0.D0
  AUX1=Y(3)+Y(3)
  AUX1=AUX1+AUX1
  Z(2)=SUM2-HT*(Y(2)+AUX1+Y(4))
  IF(NDIM-5)10,9,9
9  AUX1=Y(4)+Y(4)
  AUX1=AUX1+AUX1
  Z(5)=SUM1+HT*(Y(3)+AUX1+Y(5))
10 Z(3)=SUM1
  Z(4)=SUM2
  RETURN
C  NDIM IS EQUAL TO 3
11 SUM1=HT*(1.25D0*Y(1)+Y(2)+Y(2)-.25D0*Y(3))
  SUM2=Y(2)+Y(2)
  SUM2=SUM2+SUM2
  Z(3)=HT*(Y(1)+SUM2+Y(3))
  Z(1)=0.D0
  Z(2)=SUM1
12 RETURN
  END

```

## BIBLIOGRAFIA

- [1] Jasprit Singh, *Dispositivos semiconductores*. Mc Grall-Hill
- [2] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*. Halsted, New York, 1988
- [3] L. Esaki and R. Tsu, I.B.M. J. Res. Dev 14, **61** (1970)
- [4] R. L. Greene and K.K. Bajaj, Phys. Rev. **B31**, 913(1985)
- [5] G. Bastard, Phys. Rev. **B24**, 4714 (1981).
- [6] C. Mailhot, Yia-Chung Chang and T.C. McGill, Phys. Rev. **B26**, 44429 (1982).
- [7] R.L. Greene and K.K. Bajaj, Solid State Commun. **45**, 825 (1983).
- [8] Chaudhuri, S., Phys. Rev. **B 28** 4480 (1993)
- [9] Lane Pat. and Greene, Ronald L., Phys. Rev. **B 33**, 5871 (1986)
- [10] P. Lefebvre, P. Christol, H. Mathieu y S. Glotsh, Phys Rev. **B 52**, 5756 (1995)
- [11] A. Thilagam, Phys. Rev. **B 55**, 7804 (1997); **56**, 9798 (1997)
- [12] E. Reyes-Gómez, A. Matos-Abiague, C. A. Perdomo-Leiva, M. De Dios-Leiva y L.E. Oliveira, Phys. Rev. **B 61**, 13104 (2000)
- [13] P. Lefebvre, P. Christol, H. Mathieu, Phys. Rev. **B 61**, 13104 (2000)
- [14] H. J. Lee, L.Y. Juravel, J. C. Wolley and A. J. Springhorpe, Phys. Rev. **B 21**, 659 (1980)
- [15] I.D. Mikhailov, F.J. Betancur, R. A. Escorcía y J. Sierra-Ortega, Phys. Stat. Sol. 234, No 2, 590-610 (2002) , Phys. Rev. B **67**, 115317 (2003), Phys B, 66, 348 (2004)
- [16] B.B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, W.H. Freeman & Co (1988)
- [17] Pruefer H, *Mathematische Annalen* 95 (1926)
- [18] R. Miller *et al* Phys. Rev. **B 29**, 7085 (1984)
- [19] F. Betancur. I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira, J. Phys. D: Appl. Phys **31** (23) 3391 (1998)
- [20] Yu Peter and Cardona Manuel, *Fundamentals of Semiconductors*, Berlín Heidelberg: Springer-Verlag, 1996.
- [21] Chirstopher Beattie, arXiv:math/9805028.

[22] D. R. Herrick and F. H. Stillinger, *Phys. Rev. A*, **11**, No. 1, 43 (1975); F. H. Stillinger, *J. Math. Phys.* **18**, No. 6, 1224 (1977)

[23] D. R. Herschbach, J. Avery and O. Goscinski, *Dimensional Scaling in Chemical Physics*, Kluwer Academic Publishers (1993)

[24] I.D. Mikhailov, F.J. Betancur, L. F. Garcia, *Phys. Stat. Sol.* **224**, No 2, 757 (2001)