

**EFFECTO DE CAMPO ELÉCTRICO SOBRE EL ESPECTRO ELECTRÓNICO DE  
PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS**

**JUAN CARLOS PIÑA VELÁSQUEZ**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
Bucaramanga  
2005**

**EFFECTO DE CAMPO ELÉCTRICO SOBRE EL ESPECTRO ELECTRÓNICO DE  
PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS**

**JUAN CARLOS PIÑA VELÁSQUEZ**

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

**Director  
Dr. ILIA D. MIKHAILOV**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
Bucaramanga  
2005**

*a Dios,*

*A mi querida madre  
Matilde Velásquez Barraza*

*A mi querido padre  
Alfonso Rafael Piña de Avila*

*A mis hermanos  
Luz Dary, Zaida Milena, Ingris Cristina y Danilo  
Alfonso*

*A toda mi familia*

*A María E.*

*Por todo su apoyo e incondicional ayuda*

## AGRADECIMIENTOS

El autor ofrece sus agradecimientos a las personas que de una u otra forma contribuyeron a la realización de este trabajo:

Dr. Ilya Mikhailov  
Dr. Javier Betancur  
Dr. Harold Paredes  
Msc. Jairo Marín Cadavid  
Msc. Francisco García  
Dr. Alvaro Ramírez  
William Gutierrez  
Fernando Quiñónez  
Victor Basto  
Jorge Rueda  
Elkin Ulloa

También quiero dar las gracias a los familiares y amigos que me acompañaron durante esta etapa

## CONTENIDO

	pag.
INTRODUCCIÓN.....	10
1. MODELO DE CONFINAMIENTO.....	12
1.1 PERFILES DE QD.....	12
1.2 ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA UN ELECTRÓN EN UN QD.....	13
2. APROXIMACIÓN ADIABÁTICA.....	15
2.1 PROCEDIMIENTO.....	15
2.2 RESULTADOS PARA EL ESPECTRO ENERGÉTICO EN EL CASO NO PERTURBADO.....	18
3. EFECTO DEL CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO.....	24
3.1 ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA UN ELECTRÓN EN UN QD EN PRESENCIA DE CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO.....	24
3.2 POLARIZABILIDAD.....	25
3.2.1 Polarizabilidad Clásica.....	25
3.2.2 Polarizabilidad Cuántica.y fuerza dr oscilador .....	25
3.3 CÁLCULO DE ELEMENTOS MATRICIALES.....	27
3.4 RESULTADOS.....	29
4. CONCLUSIONES.....	32
5. ANEXOS.....	33
BIBLIOGRAFÍA.....	61

## LISTA DE FIGURAS

	pag.
Fig. 1. Bandas de energías en QW formado por dos materiales semiconductores A y B con diferentes brechas entre las bandas de valencia y de conducción.....	10
Fig.2 imagen 3D de QDs con diferentes formas con sus respectivas funciones:a)disco, b)lente, c)pirámide y d)anillo .....	13
Fig. 3. niveles de energía en a)disco, b)lente, c) pirámide y d) anillo.....	21
Fig. 4. Gráfica de contorno de la probabilidad de distribución de carga del electrón en el plano a lo largo de la sección transversal a través del eje de simetría para los estados 1s, 2s y 3s en el disco cuántico (figura del lado izquierdo) y en la lente (figura del lado derecho).....	22
Fig. 5. Lo mismo que en la Fig. 3 pero para la pirámide (figura del lado izquierdo) y el anillo (figura del lado derecho).....	22
Fig. 6 Posición de los niveles de energía en función del radio externo en una a) pirámide y b) lente.....	23
Fig. 7. Gráfica de la polarizabilidad en función del ángulo de incidencia del campo eléctrico externo.....	30

**TÍTULO: EFECTO DE CAMPO ELÉCTRICO SOBRE EL ESPECTRO ELECTRÓNICO DE PUNTOS CUÁNTICOS AUTOENSAMBLADOS\***

AUTOR: Juan Carlos Piña Velásquez\*\*

PALABRAS CLAVES: Punto cuántico, punto cuántico auto –ensamblado, aproximación adiabática, pozo cuántico

DESCRIPCIÓN: Se encuentra el espectro energético de un electrón confinado en un punto cuántico auto ensamblado de  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  en forma de disco, lente, pirámide y anillo, utilizando la aproximación adiabática para separar el movimiento del electrón en la dirección vertical y en el plano horizontal.

La ecuación que corresponde al movimiento vertical se resuelve de forma analítica, mientras que para resolver la ecuación correspondiente al movimiento en el plano se utilizó el método numérico basado en el procedimiento del barrido trigonométrico.

Se analiza la densidad de la probabilidad de la distribución de carga para los estados 1s, 2s y 3s en los diferentes puntos cuánticos auto – ensamblados y se estudia el cambio que produce la disminución del radio externo de punto cuántico sobre sus respectivos niveles electrónicos. Además, se analiza el efecto de un campo eléctrico externo, aplicado en el plano xz, sobre el espectro electrónico de cada punto cuántico auto – ensamblado. En el campo eléctrico se considera como una perturbación aplicado al sistema y el cálculo se realiza utilizando la teoría de perturbaciones de segunda orden. Se calculan algunos parámetros tales como la polarizabilidad y la fuerza de oscilador entre diferentes niveles y se analizan sus variaciones en función del ángulo de incidencia del campo eléctrico para puntos cuánticos auto-ensamblados con diferentes formas, disco, lente, pirámide y anillo.

---

\* Proyecto de Grado

\*\* Universidad Industrial de Santander

**TITLE: EFFECT OF ELECTRIC FIELD ON ELECTRONIC SPECTRUM OF SELF ASSEMBLED QUANTUM DOTS\***

AUTHOR: Juan Carlos Piña Velásquez\*\*

KEY WORDS: Quantum dot, Self Assembled Quantum Dot, adiabatic approximation, quantum well

ABSTRACT: The energy spectrum of the electron confined in  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  self-assembled quantum dots with different shapes, disk, lens, pyramid and ring are found by using the adiabatic approximation in order to separate the motions of the electron in the vertical and in-plane directions.

The equation corresponding to the vertical motion is solved in an analytical form whereas the trigonometric sweep method is used in order to find the solution of the equation corresponding to in-plane motion.

The probability distribution of the charge density at different points within the self-assembled quantum dots for 1s, 2s and 3s states is analyzed and the evolution of the energy levels provided by decreasing of the quantum dot exterior radius is studied. Additionally, the effect of the electric applied along the XZ plane on the electronic spectrum of the self-assembled quantum dots. The external electric field effect is considered as a perturbation and the calculation is realized by using the second order of the perturbation theory. Some physical parameters such as the polarizability and the oscillator forces between different energy levels are calculated and their dependences on the electric field incident angle in quantum dots with different shapes, disk, lens, pyramid and ring analyzed.

---

\* Proyecto de Grado

\*\* Universidad Industrial de Santander

## INTRODUCCIÓN

El futuro progreso de la micro- y de la opto-electrónica los científicos actualmente lo vinculan con los recientes avances en la fabricación de los sistemas de baja dimensionalidad cuyos tamaños son del orden de nanómetros. Los sistemas de este tipo conocidos actualmente son los pozos cuánticos (QW), superredes (SL), hilos cuánticos (QWW) y puntos cuánticos (QD). Los pozos cuánticos poseen la estructura de un emparedado (Fig. 1) en el cual, una capa de un semiconductor A está totalmente rodeada de otro semiconductor B cuya brecha entre las bandas de valencia y de conducción es mayor que la del semiconductor A. Por este motivo, en las junturas entre dos tipos de semiconductores existen los saltos de las energías en el piso de la banda de conducción y en el techo de la banda de valencia y esto produce el confinamiento de los portadores de carga en las correspondientes bandas

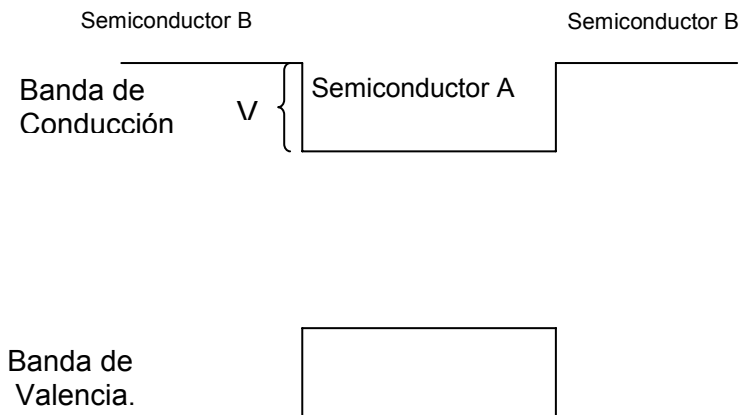


Fig. 1. Bandas de energías en QW formado por dos materiales semiconductores A y B con diferentes brechas entre las bandas de valencia y de conducción.

Cuando el confinamiento se realiza en dos direcciones se forma un sistema casi unidimensional conocido como hilo cuántico y cuando el confinamiento se hace en las tres dimensiones se forma un sistema casi cero dimensional conocido como punto cuántico.

En la década de los 90's aparece una técnica de fabricación de QDs en la base de Stranki-Krastanov, en la cual, un material semiconductor A se deposita sobre otro material semiconductor B cuya constante de red es diferente a la del material semiconductor A. Debido a esta diferencia en la constante de red aparecen tensiones en el material semiconductor B formándose QDs de diferentes formas dependiendo de las condiciones de crecimiento. A estos QDs se les conoce como puntos cuánticos auto ensamblados (SAQDs) y han sido motivo de estudio por

parte de los científicos en los últimos años debido a su posible aplicación en futuros dispositivos. En los últimos años se publicaron varios artículos sobre el cálculo directo del espectro de un electrón en SAQDs de diferentes formas. Estos cálculos se pueden realizar resolviendo la ecuación de Schrödinger tanto en una forma analítica (en el caso potenciales sencillos) como numéricamente utilizando el método de diferencias finitas y el método variacional.

Una de las propiedades más importante de SAQDs es que su tamaño transversal (altura  $d$ ) es mucho menor que su tamaño lateral (Diámetro  $D$ ), razón por la cual, en la mayoría de los trabajos anteriores se consideraron los modelos bidimensionales analizando únicamente el movimiento lateral de los portadores de carga. Este modelo bidimensional fue utilizado para analizar el espectro de uno y dos electrones, excitones y triones en SAQDs [1-5].

Los modelos bidimensionales se hacen inválidos cuando el tamaño transversal es muy pequeño, ya que los niveles energéticos suben drásticamente y se acercan al espectro continuo mientras que la forma del potencial para el movimiento lateral se hace muy sensible al perfil transversal del QD. Con el fin de establecer la forma de este potencial, se puede utilizar la aproximación adiabática como fue propuesta inicialmente en los artículos [6,7]. Esta metodología fue utilizada últimamente en los trabajos del grupo FICOMACO para analizar los espectros electrónicos de las donadoras y excitones en pirámides, lentes y anillos cuánticos [8].

Cuando al sistema se le aplica un campo eléctrico externo ocurre un cambio en el espectro electrónico (efecto Stark). Generalmente, para estudiar el comportamiento de los portadores de carga en cristales en bloque bajo la influencia de un campo eléctrico externo en los semiconductores, se utiliza la aproximación de masa efectiva (AME) en la cual, los portadores se pueden considerar como partículas libres suponiendo que el potencial periódico solo afecta en la renormalización de la masa. Hasta donde nosotros conocemos, el efecto de Stark en SAQD no ha sido estudiado hasta el momento.

En este trabajo se utiliza la aproximación adiabática para encontrar los niveles energéticos de un electrón confinado en SAQDs de diferentes formas, además, se analiza el efecto que produce un campo eléctrico externo sobre el espectro electrónico de este sistema y se calculan algunos parámetros espectroscópicos como la fuerza de oscilador y la polarizabilidad para SAQDs en forma de lente, disco, anillo y pirámide.

## 1. MODELO DE CONFINAMIENTO

Para el propósito de esta investigación se considera al portador de carga como una partícula libre cuando se encuentra dentro del SAQDs el cual posee simetría axial y cuyo perfil en coordenadas cilíndricas está dado por una función  $d(\rho)$  que define la variación de la altura del punto cuántico en la dirección radial. Cuando el portador se encuentra fuera del QD el movimiento del portador se encuentra afectado por un potencial  $V_0$  que es la altura de la barrera proveniente del salto en la banda de conducción en las junturas. De esta manera, el potencial de confinamiento está dado por la función  $V(\rho, z)$  definida en coordenadas cilíndricas como:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} V_0 & z > d(\rho) \cup z < 0 \\ 0 & 0 < z < d(\rho) \end{cases} \quad (2.1)$$

### 1.1 PERFILES DE QD

En los últimos años se realizaron una gran cantidad de investigaciones, en las cuales fueron fabricados SAQDs [9,10]. Se encontró que, dependiendo de las condiciones de crecimiento (régimen de temperaturas, de presión, de concentración de componentes, etc.), SAQDs pueden tener diferentes formas, pero de manera más frecuente crecen en forma de disco, lente, anillo o pirámide. Esta es una de las razones por la cual estos tipos de perfiles descritos por funciones  $d(\rho)$  simples se consideran en adelante en este trabajo. En la Fig. 2 se presentan las formas de SAQDs junto con sus respectivas funciones que se estudian en adelante.

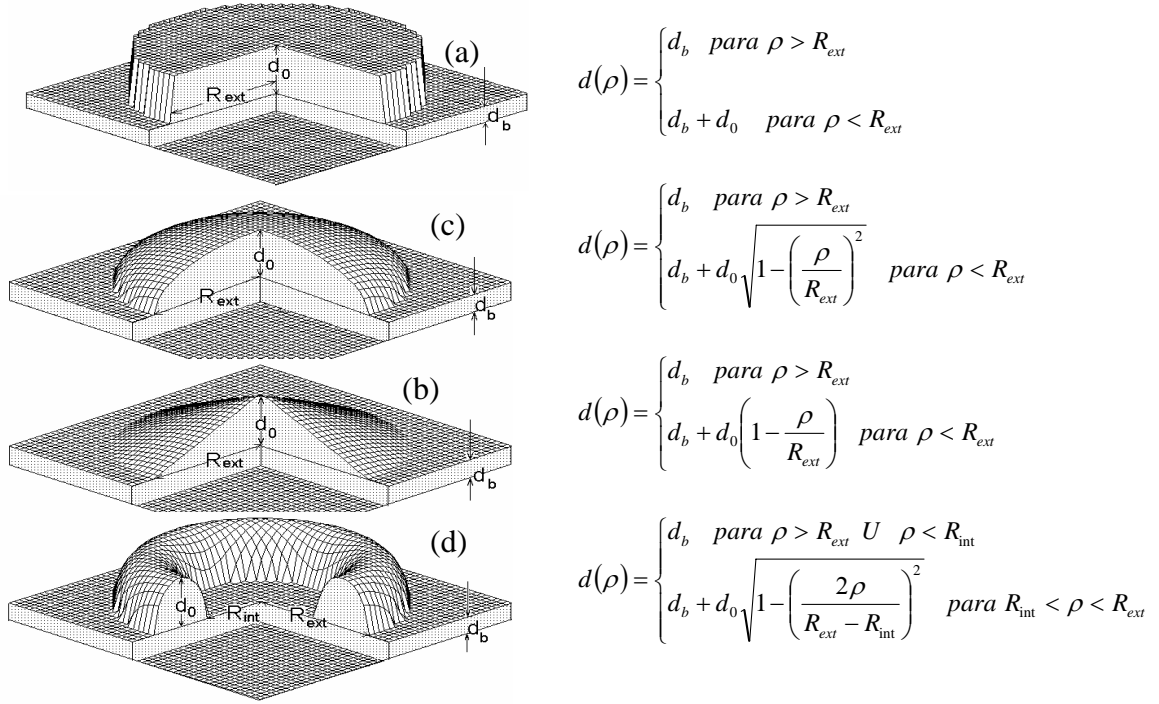


Fig.2 Imagen 3D de SAQDs con diferentes perfiles : a)disco, b)lente, c)pirámide y d)anillo

## 1.2 ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA UN ELECTRÓN EN UN QD

En la aproximación de la masa efectiva, el hamiltoniano que describe un electrón confinado en SAQDs es

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\rho, z) \quad (2.2)$$

Donde  $m^*$  es la masa efectiva del portador de carga,  $V(\rho, z)$  es el potencial descrito en la ecuación (1),  $\hbar$  es la constante de Planck y  $\nabla^2$  es el laplaciano en coordenadas cilíndricas.

Para facilitar la solución del problema se utilizan en adelante unidades adimensionales: las medidas de distancia se encuentran en radios de Bohr efectivos  $a_0^*$  y la energía en Rydberg efectivo  $Ry^*$  definidos de la siguiente forma

$$a_0^* = \left( \frac{m_e}{m^*} \right) a_0 \quad \text{donde } a_0 = 0.053 \text{ nm} \quad (2.3)$$

$$Ry^* = \frac{\hbar^2}{2m^* a_0^*} = \frac{m_e}{\epsilon^2 m^*} Ry \quad \text{donde } Ry=13.6 \text{ eV} \quad (2.4)$$

La ecuación de Schrödinger para este sistema en unidades adimensionales toma la siguiente forma

$$-\nabla^2 \psi + \tilde{V}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \psi = E \psi \quad (2.5)$$

Donde  $\tilde{z} = \frac{z}{a_0^*}$  ;  $\tilde{\rho} = \frac{\rho}{a_0^*}$  y la energía, como ya se mencionó anteriormente, está medida en Rydberg efectivo.

En este trabajo se aplican los resultados obtenidos en [11] para analizar los espectros electrónicos de  $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$  SAQDs. Teniendo en cuenta que el electrón está localizado la mayor parte dentro del pozo, los valores de los parámetros físicos utilizados en los cálculos son los correspondiente al material de  $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ :  $\epsilon = 12.71$ ,  $m^* = 0.076m$  y  $V_0 \approx 258 \text{ meV}$ . Para este material  $a_0^* \approx 8.86 \text{ nm}$ ,  $Ry^* \approx 6.39 \text{ meV}$  y la altura de la barrera en unidades adimensionales es  $V_0 \approx 40 Ry^*$ .

## 2. APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

### 2.1 PROCEDIMIENTO

Una de las propiedades más importantes de los SAQDs es que su tamaño lateral es mucho mayor que su tamaño transversal, por lo tanto, el movimiento del electrón en la dirección lateral es mucho más lento que el movimiento del mismo en la dirección transversal. Esto permite despreciar en primera instancia el movimiento lateral y considerar solo el movimiento transversal del electrón. Por lo tanto, se descompone la función de onda  $\psi$  en una función que describe el movimiento lento del electrón en dirección lateral  $\psi_\ell$  y una función de onda que describe el movimiento rápido en dirección transversal  $\psi_r$ . Es decir,

$$\psi(\rho, \theta, z) = \psi_\ell(\rho, \theta)\psi_r(\rho, z) \quad (3.1)$$

Al sustituir (3.1) en (2.5), considerando que la parte de la función de onda que describe el movimiento rápido casi no depende de los coordenadas  $\rho$  y  $\vartheta$  y asumiendo que por esta razón

$$\frac{\partial^2 \psi_r(\rho, z)}{\partial \rho^2} \approx 0; \quad \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi_r(\rho, z)}{\partial \rho} \approx 0; \quad \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_r(\rho, z)}{\partial \theta^2} \approx 0$$

se obtiene una ecuación separable:

$$-\psi_\ell \frac{\partial^2 \psi_r}{\partial z^2} - \psi_r \frac{\partial^2 \psi_\ell}{\partial \rho^2} - \frac{\psi_r}{\rho} \frac{\partial \psi_\ell}{\partial \rho} - \frac{\psi_r}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi_\ell}{\partial \theta^2} + V(\rho, z)\psi_\ell\psi_r = E\psi_\ell\psi_r \quad (3.2)$$

Al realizar el procedimiento estándar de separación de las variables, se obtiene el siguiente par de ecuaciones para las partes rápida y lenta de la función de onda:

$$-\frac{\partial^2 \psi_r}{\partial z^2} + V(\rho, z)\psi_r = E_0(\rho)\psi_r \quad (3.3a)$$

$$-\nabla_{\rho, \theta}^2 \psi_\ell + E_0(\rho)\psi_\ell = E\psi_\ell \quad (3.3b)$$

La ecuación (3.3a) se soluciona creando una malla de paso constante,  $h$ , en dirección radial en la cual, para cada  $\rho_i$  se resuelve el problema de pozo potencial con barrera finita  $V_0$ , donde el ancho del pozo es igual a la altura del SAQD en esa posición,  $d(\rho_i)$ . Luego, para cada  $\rho_i$  y  $z$  se encuentran, en forma analítica,

$E_0(\rho_i)$  y  $\psi_r(\rho_i, z)$  como solución de una ecuación trascendente y como una función de onda, respectivamente, para este problema dado. Encontrados los valores de la función  $E_0(\rho_i)$  en los puntos de la malla, los valores de esta función en otros puntos que no coinciden con la malla se definen a través de una interpolación definida en nuestro procedimiento por medio de las funciones de splines cúbicos.

La ecuación (3.3b) se simplifica parcialmente, ya que debido a la simetría axial, la función de onda  $\psi_l$  se puede descomponer en una función que depende solamente de ángulo  $\theta$  multiplicada por otra función que depende de  $\rho$ , de manera que

$$\psi_l(\rho, \theta) = \Phi_m(\rho) \text{Exp}(im\theta) \quad (3.4)$$

Reemplazando (3.4) y  $E_0(\rho)$  en (3.3b) se obtiene

$$\frac{d^2 \Phi_m}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d\Phi_m}{d\rho} + (E - V_{\text{eff}}(\rho) - \frac{m^2}{\rho^2}) \Phi_m = 0, \quad (3.5a)$$

donde el potencial efectivo se define como:

$$V_{\text{eff}}(\rho) = \begin{cases} E_0(\rho); & 0 < \rho < R_e \\ V_0; & \rho > R_e \end{cases} \quad (3.5b)$$

y  $R_e$  es el radio exterior de QD.

**2.1.1 solución de la ecuación (3.5a) para  $\rho > R_e$ .** La ecuación (3.5a) para este intervalo queda de la siguiente forma

$$\Phi_m'' + \frac{1}{\rho} \Phi_m' - (\frac{m^2}{\rho^2} + \gamma^2) \Phi_m = 0, \quad (3.6)$$

donde  $\gamma^2 = V_0 - E$ . Realizando el cambio de variable  $x = \gamma\rho$ , se obtiene la ecuación

$$\Phi_m'' + \frac{1}{x} \Phi_m' - (1 + \frac{m^2}{x^2}) \Phi_m = 0, \quad (3.7)$$

cuya solución general es  $\Phi_m = C_1 I_m(x) + C_2 K_m(x)$ . Ya que  $I_m(x \rightarrow \infty) \rightarrow \infty$ , no cumple con el requisito de convergencia de la función, por lo tanto, se hace  $C_1 = 0$  y la solución de la ecuación (3.5a) para este intervalo es:

$$\Phi_m = C_2 K_m(x) = C_2 K_m(\gamma \rho) \quad (3.8)$$

La condición de contorno que surgen de la condición de continuidad de la función de onda y de su primera derivada es la siguiente:

$$\frac{\Phi'(R_e)}{\Phi(R_e)} = \gamma \frac{K'_m(\gamma R_e)}{K_m(\gamma R_e)} \quad (3.9)$$

**2.1.2 solución de la ecuación (3.5a) para  $0 < \rho < R_e$ .** Debido a que la ecuación diferencial (3.5a) posee un potencial variable con respecto a la dirección radial, esta no puede resolverse analíticamente, por consiguiente, se procede a utilizar el método de barrido trigonométrico [12]. La ecuación para este intervalo toma la siguiente forma.

$$\Phi_m'' + \frac{1}{\rho} \Phi_m' + (E - E_0(\rho)) \Phi_m - \frac{m^2}{\rho^2} \Phi_m = 0 \quad (3.10)$$

Realizando el cambio de variable

$$\Phi_m(\rho) = \rho^m u_m(\rho) \quad (3.11)$$

$$\Phi_m'(\rho) = m \rho^{m-1} u_m(\rho) + \rho^m u_m'(\rho) \quad (3.12)$$

$$\Phi_m''(\rho) = m(m-1) \rho^{m-2} u_m(\rho) + 2m \rho^{m-1} u_m''(\rho) + \rho^m u_m''(\rho) \quad (3.13)$$

Reemplazando (3.11), (3.12) y (3.13) en (3.10) se obtiene la ecuación

$$u_m'' + \frac{2m+1}{\rho} u_m' + \alpha(\rho) u_m = 0, \quad (3.14)$$

donde  $\alpha(\rho) = E - E_0(\rho)$ , con la condición de frontera

$$\frac{u_m'(R_e)}{u_m(R_e)} = \gamma \frac{K'_m(\gamma R_e)}{K_m(\gamma R_e)} - \frac{m}{R_e} \quad (3.15)$$

Además, utilizando el cambio de variable

$$\begin{aligned}
u_m(\rho) &= A(\rho)\cos\varphi(\rho); & u'_m(\rho) &= A(\rho)\text{sen}\varphi(\rho); \\
\frac{u'_m(\rho)}{u_m(\rho)} &= \tan\varphi(\rho); & \frac{u''_m(\rho)}{u_m(\rho)} &= \frac{\varphi'(\rho)}{\cos^2\varphi(\rho)} + \tan^2\varphi(\rho) \quad ;
\end{aligned}
\tag{3.16}$$

la ecuación (3.14) de segundo orden se reduce a la siguiente ecuación de primer orden:

$$\varphi'(\rho) = -\left\{ \text{sen}^2\varphi + \frac{2m+1}{\rho}\text{sen}\varphi\cos\varphi + (E - E_0(\rho))\cos^2\varphi \right\}; \quad 0 < \rho < R_e \tag{3.17}$$

con la condición inicial  $\varphi(0) = 0$  y la condición de frontera

$$\varphi(R_e) = \arctan\left\{ \gamma \frac{K'_m(\gamma R_e)}{K_m(\gamma R_e)} - \frac{m}{R_e} \right\} - n\pi; \quad \gamma = \sqrt{V_0 - E} \tag{3.18}$$

donde  $n$  es el número cuántico radial que define la cantidad de los nodos que tiene la función de onda en la dirección radial. La relación (3.18), en realidad, es una ecuación trascendente que define los niveles energéticos dependientes de dos números cuánticos, azimutal  $m$  y radial  $n$ :  $E = E_{n,m} = E(n,m)$ . El procedimiento numérico consiste en encontrar la función  $\varphi(R_e, E)$  como solución del problema de Cauchy en el punto  $\rho = R_e$  para la ecuación diferencial (3.17) para el valor de energía  $E$  dado y se define, de esta manera, la función  $\varphi(R_e, E)$  para resolver la ecuación (3.18) respecto  $E$  utilizando, por ejemplo, método de bisecciones. Una vez encontrada la energía y la solución del problema de Cauchy (3.17), la amplitud  $A(\rho)$  se define a través de la integración numérica mediante la formula:

$$A(\rho) = \bar{A} \exp\left\{ \int_0^\rho \left[ [1 - \alpha(t)]\text{sen}\varphi(t)\cos\varphi(t) - \frac{2m+1}{t}\text{sen}^2\varphi(t) \right] dt \right\} \tag{3.19}$$

Por lo tanto, la solución de la ecuación (3.5a) finalmente es de la siguiente forma

$$\Phi_m(\rho) = \begin{cases} C_2 K_m(\gamma\rho) & \rho > R_e \\ \rho^m A(\rho)\cos(\varphi(\rho)) & 0 < \rho < R_e \end{cases} \tag{3.20}$$

## 2.2 RESULTADOS PARA EL ESPECTRO ENERGÉTICO EN EL CASO NO PERTURBADO

La altura de los puntos cuánticos auto-ensamblados obtenidos en los experimentos, en la mayoría de los casos, son del orden de 2-4nm. Por esta

razón, el ancho del pozo en que está sumergido un electrón en su movimiento rápido a lo largo del eje  $z$  es muy pequeño y como muestran nuestros experimentos numéricos, la ecuación de onda (3.3a) tiene para pozos tan angostos solo una única solución correspondiente al número cuántico  $n_z = 1$ . De esta manera, los niveles energéticos en SAQDs se caracterizan por sólo los dos números cuánticos  $(n, m)$ , radial y azimutal que corresponden al movimiento lento bidimensional en el plano  $(x, y)$ .

Se utilizará en adelante la nomenclatura de niveles energéticos en SAQDs similar a la del átomo de hidrógeno según la siguiente tabla, donde el número principal es igual al número radial  $n$  mas uno.,

	n	0	1	2
m				
0		1s	2s	3s
1		1p	2p	3p
2		1d	2d	3d

Mas adelante se presentan los resultados del cálculo de los niveles energéticos en SAQDs con diferentes perfiles en forma de lente, disco, pirámide y anillo. En cada una de estas estructuras se supone que la altura máxima es 4nm, la altura de la capa húmeda igual a 0 nm, el radio externo es de 40nm, y además, para el anillo el radio interno es de 20nm. Los resultados de los cálculos se presentan en la Tabla I y en las figuras 4a y 4b. Los valores de energía se presentan en unidades de Rydberg efectivo  $\approx 6.39meV$  y las longitudes en unidades de Bohr efectivo  $\approx 8.86nm$ .

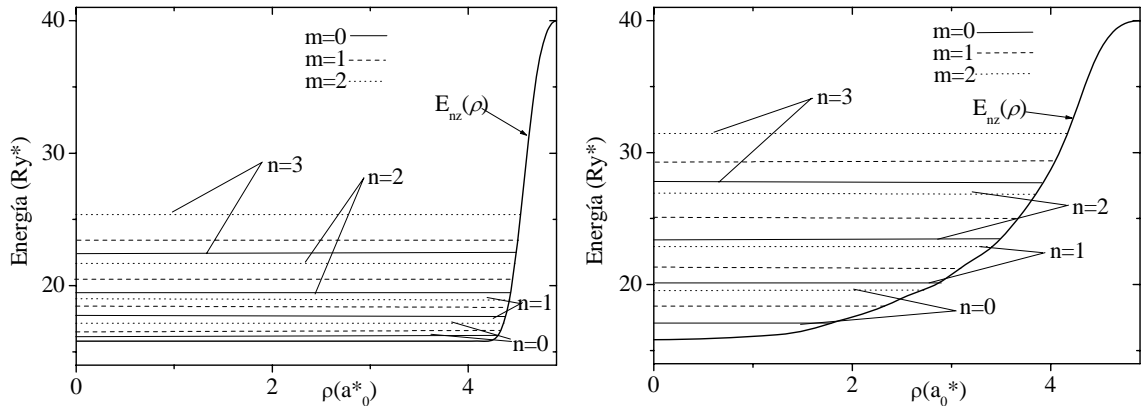
**Tabla I. Niveles de energía en Ry\* para QDs en forma de Disco, lente, pirámide y anillo**

Estado	Disco	Lente	Pirámide	Anillo
1s	15,84	17,10	20,28	18,67
1p	16,24	18,52	23,56	18,76
1d	16,76	19,94	26,18	19,03
2s	16,95	19,96	26,48	25,34
2p	17,79	21,60	28,89	25,44
2d	18,76	23,31	31,34	25,73
3s	18,94	23,35	31, 56	33,18
3p	20,22	25,15	33,78	33,30
3d	21,63	26,04	36,15	33,60

De la Tabla I y los gráficos en la Fig. 3 se puede observar una similitud del espectro de energía de un electrón confinado en QDs con los subniveles vibrato-rotacionales de una molécula. La curva de potencial  $E_{n_z}(\rho)$  para  $n_z = 1$  describe el

movimiento en la dirección  $z$  de forma similar a la curva de potencial molecular electrónico que define la energía del electrón como una función de la separación entre átomos bajo la condición de que estos átomos están congelados. A diferencia de las curvas de potencial de moléculas, las curvas de potencial  $E_{nz}(\rho)$  en SAQDs muestran las energías del movimiento rápido en la dirección vertical para diferentes secciones transversales distanciadas desde el eje de simetría un valor  $\rho$ . A mayor altura del punto cuántico, en esta sección, menor es el confinamiento y mas bajo esta ubicado el nivel de energía. De esta manera, alejándose del eje de simetría, los grosores de las secciones transversales varían para diferentes perfiles de manera diferente produciendo las curvas de potencial  $E_{nz}(\rho)$  diferentes; pero en todos los casos, al acercarse a las regiones de las juntas el ancho del grosor tiende a cero subiendo el nivel energético hacia el valor máximo igual a  $V_0$ .

Comparando los diferentes perfiles de puntos cuánticos, se puede observar que la disminución de la altura de un punto cuántico al alejarse de eje de simetría se produce mas lento en un disco, después en una lente y esta disminución se realiza mas rápidamente en una pirámide. Por esta razón, la curva de potencial es una función casi constante en un disco, es una función creciente suavemente en una lente y una función que crece mas rápido en una pirámide (ver la parte izquierda de Fig. 3).



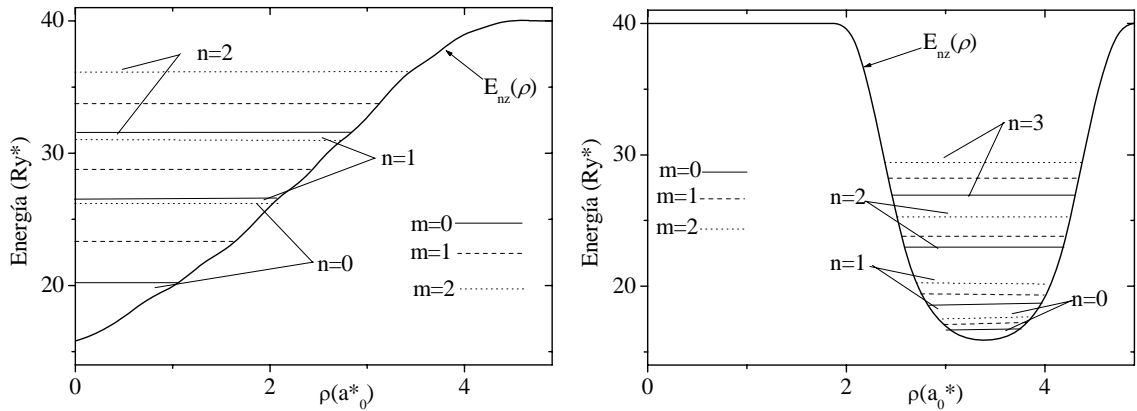


Fig. 3. Niveles de energía en a) disco, b) lente, c) pirámide y d) anillo

Esta diferencia en las formas de las curvas de potencial muestra que el menor confinamiento del electrón en la dirección radial sucede en un disco, mientras que el mayor confinamiento en un pirámide. Pero a mayor confinamiento, mas altas energías tienen los correspondientes niveles en SAQD. Este resultado se refleja en la Tabla I donde se puede observar que las energías de los correspondientes niveles están creciendo al pasar de un disco a una lente y después a la pirámide. La curva de potencial de un anillo es diferente (ver Fig. 3b); posee dos barreras, una interior que corresponde a un núcleo repulsivo y otra exterior.

Los niveles con diferentes números cuánticos  $n$  corresponden, en la Fig. 3, al movimiento en la dirección radial con diferentes energías (el número cuántico  $n$  es igual al número de nodos de función de onda en la dirección radial) y son similares a los subniveles vibracionales en el espectro molecular mientras los grupos de los subniveles con igual número cuántico  $n$  y diferente número cuántico  $m$ , correspondientes a diferentes valores de momento angular, son similares a los subniveles rotacionales.

En las Figs. 4 y 5 se presentan las gráficas de contorno para la densidad de distribución de carga  $D_{n,m}(\rho, z) = \rho \psi_{n,m}^2(\rho, z)$  en el plano a lo largo de una sección transversal a través del eje de simetría para los estados 1s, 2s y 3s en SAQDs con diferente forma geométrica. Comparando la distribución de carga en SAQDs con diferentes formas se puede ver que la compresión grande hacia el eje y el pico más pronunciado es el de la pirámide seguido por la lente mientras la compresión más pequeña la presenta el disco. Cuando el número cuántico radial  $n$  aumenta (desde el estado 1s hasta el 3s) aparecen picos pronunciados en la distribución de carga y la posición del pico con la carga más grande es removido hacia la región periférica. Una evolución similar de la distribución de carga desde el estado 1s al 3s es observado para el anillo con la diferencia de que esta evolución toma lugar en la región del anillo suficientemente separada del eje.

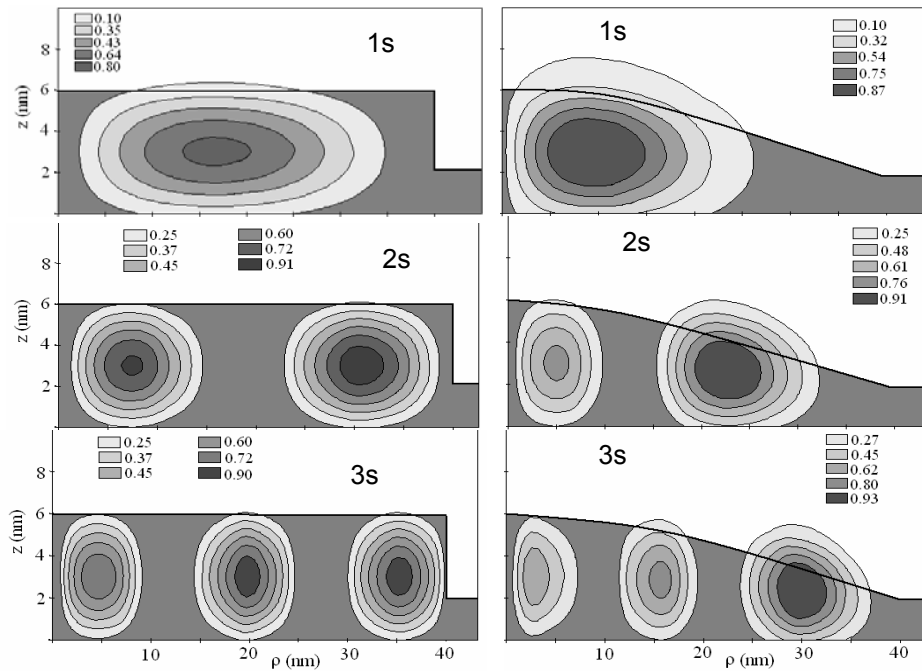


Fig. 4. Gráfica de contorno de la probabilidad de distribución de carga del electrón en el plano a lo largo de la sección transversal a través del eje de simetría para los estados 1s, 2s y 3s en el disco cuántico (figura del lado izquierdo) y en la lente (figura del lado derecho)

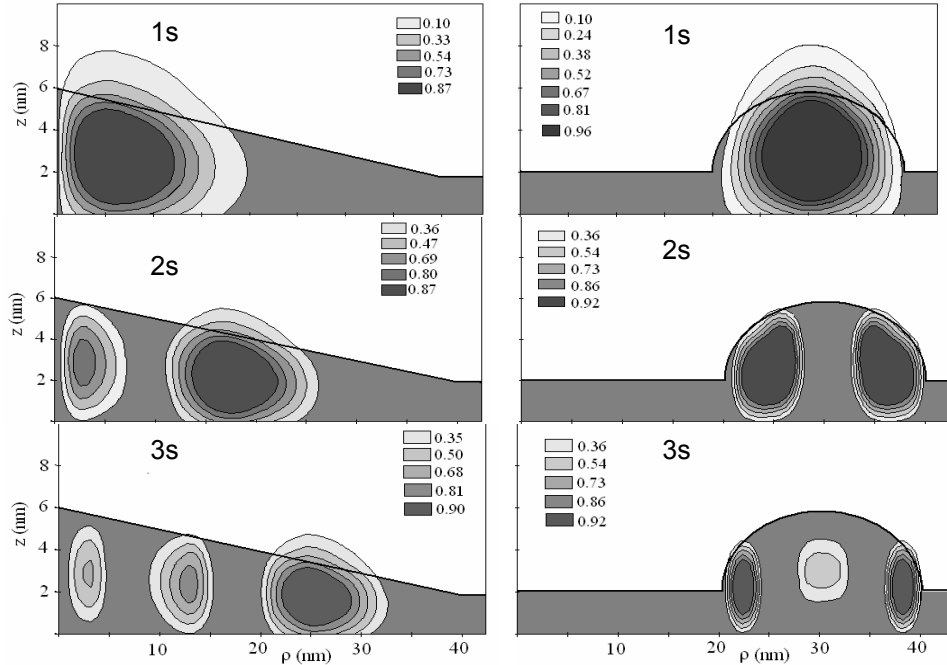


Fig. 5. Lo mismo que en la Fig. 3 pero para la pirámide (figura del lado izquierdo) y el anillo (figura del lado derecho)

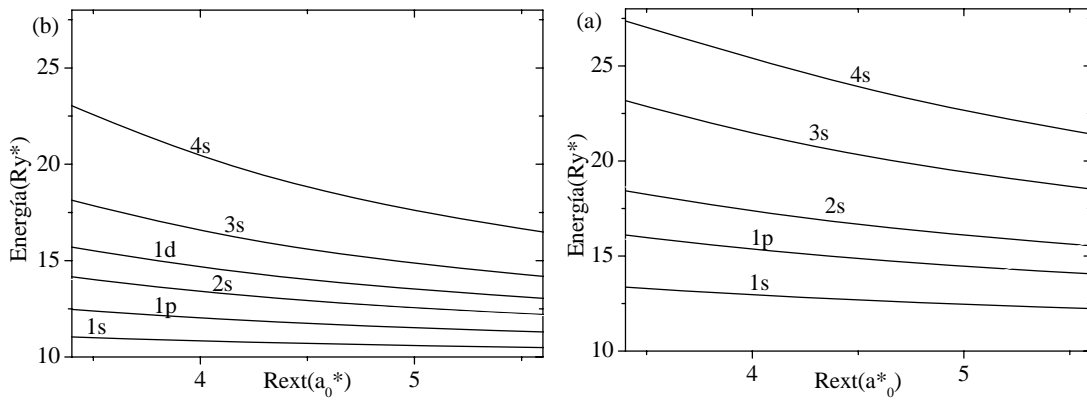


Fig. 6 Posición de los niveles de energía en función del radio externo en una a) pirámide y b) lente

En la fig. 6 se presentan las gráficas de diferentes niveles de energía (en Rydberg efectivo) en función del radio externo (en radios de Bohr efectivo) para SAQDs en forma de pirámide y lente. En esta gráfica se puede observar que al disminuir el radio externo del SAQDs los niveles de energía suben y en la gráfica correspondiente a la pirámide, los niveles de energía suben de forma más pronunciada que para la lente debido a que en la pirámide hay mayor confinamiento del portador de carga.

### 3. EFECTO DEL CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO

#### 3.1 ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA UN ELECTRÓN EN UN QD EN PRESENCIA DE UN CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO

Para el problema del electrón en SAQDs en presencia de un campo eléctrico externo constante  $\vec{F}$  orientado en una dirección que forma un ángulo  $\alpha$  con el eje X, el Hamiltoniano en las unidades adimensionales se escribe como:

$$H = H_0 + H' \quad (4.1)$$

donde

$$H_0 = -\nabla^2 + V(\rho, z) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z) \quad (4.2)$$

es la parte del Hamiltoniano sin campo eléctrico y

$$H' = \beta F(\rho \cos \theta \cos \alpha + z \sin \alpha); \quad \beta = \frac{ea_0^*}{Ry^*} \quad (4.3)$$

es la parte perturbativa del Hamiltoniano relacionada con la interacción del electrón con el campo eléctrico.

La ecuación de Schrödinger para este sistema

$$-\nabla^2 \psi + \tilde{V}(\tilde{\rho}, \tilde{z}) \psi + \beta F(\rho \cos \theta \cos \alpha + z \sin \alpha) = E \psi \quad (4.4)$$

después de la aplicación de la aproximación adiabática ya no se puede resolver la ecuación (4.4) en forma exacta puesto que, las variables radial y angular no se separan y la única manera de analizar el efecto del campo eléctrico en este caso es aplicar la teoría de perturbaciones teniendo en cuenta que la energía relacionada con la interacción del campo eléctrico, para todos valores de campo eléctrico razonables, es mucho menor que la distancia entre los niveles energéticos del punto cuántico.

En este trabajo se consideran intensidades del campo eléctricos del orden de 50 KV/cm y las distancias del orden de nanómetros, por lo tanto, la interacción del Hamiltoniano  $H' = e\vec{F}\vec{r}$  es aproximadamente del orden de  $1Ry^*$  con esto puede concluirse que el hamiltoniano  $H'$  puede considerarse como una perturbación al

sistema ya que los niveles de energía para un electrón confinado en estos QDs son del orden de  $16 \text{ Ry}^*$ .

Utilizando los métodos de la teoría de perturbaciones se puede analizar los efectos relacionados con la polarizabilidad de un sistema cuántico en el caso de aplicación de un campo eléctrico estacionario y las probabilidades de transiciones entre diferentes niveles para un sistema cuántico sumergido en un campo electromagnético. En ambos casos, las características de estas dos situaciones se describen por medio de un parámetro importante que se llama la fuerza del oscilador. En las dos siguientes secciones se explica cómo las características de los sistemas cuánticos están relacionadas con este parámetro.

## 3.2 POLARIZABILIDAD

**3.2.1 Polarizabilidad Clásica.** Al aplicar un campo eléctrico externo  $\vec{F}$  en la dirección del eje de las  $z$ , sobre una distribución de carga, aparece una polarización diferente de cero con un momento dipolar  $P = ez$  donde  $e$  es la magnitud de la carga del electrón y  $z$  el desplazamiento del electrón. El valor del desplazamiento se define de la condición de equilibrio entre las fuerzas elástica y eléctrica

$$eF = kz \Rightarrow z = eF/k = eF/m\omega^2 \quad (4.5)$$

De esta manera, el momento dipolar de un oscilador clásico inducido por un campo eléctrico externo esta relacionado con el valor de intensidad de este campo externo a través de la fórmula

$$P = \frac{e^2}{m\omega^2} F = \alpha F; \quad \alpha = \frac{e^2}{m\omega^2} \quad (4.6)$$

El coeficiente de proporcionalidad  $\alpha$  en esta relación, entre el momento dipolar inducido y la intensidad de campo eléctrico externo, se llama la polarizabilidad clásica.

**3.2.2 Polarizabilidad cuántica y fuerza de oscilador.** Para analizar el comportamiento de un sistema cuántico en presencia de un campo eléctrico externo aplicado en la dirección  $z$ , se considera el Hamiltoniano de este sistema:

$$H = H_0 + eFz \quad eFz \ll H_0 \quad (4.7)$$

Aplicando la teoría de perturbaciones, considerando la parte  $H' \equiv eFz$  como la perturbación y suponiendo como conocida la solución del problema no perturbado:

$$H_0 \varphi_n = E_n \varphi_n \quad (4.8)$$

La función de onda para el sistema perturbado se encuentra, según la teoría de perturbación de primer orden, mediante la siguiente ecuación

$$\psi_0 = \varphi_0 + \varphi^{(1)} = \varphi_0 + \sum_n \frac{\langle 0 | H' | n \rangle}{E_n - E_0} \varphi_n \rightarrow \psi_0 = \varphi_0 + \sum_n \frac{eFz_{0n}}{E_n - E_0} \varphi_n \quad (4.9)$$

Para encontrar la polarización del sistema se debe calcular la integral

$$P = e \int \psi_0 z \psi_0 dV \quad (4.10)$$

Reemplazando (4.9) en (4.10) y despreciando los términos proporcionales al segundo orden de campo externo se obtiene

$$P = e \int \varphi_0 z \varphi_0 dV + 2e \int \sum_n \frac{eFz_{0n}}{E_n - E_0} \varphi_0 z \varphi_n dV$$

Se puede ver que al igual que en el caso clásico la polarización inducida es proporcional al campo externo, pero el coeficiente de polarizabilidad se calcula en forma diferente

$$P = \alpha_{cuántico} F; \quad \alpha_{cuántico} = \frac{2e^2}{\hbar} \sum_n \frac{|z_{0n}|^2}{\omega_{n0}}; \quad \omega_{n0} = \frac{E_n - E_0}{\hbar} \quad (4.11)$$

Para poder establecer una relación entre la polarizabilidad cuántica y la polarizabilidad clásica se define la cantidad

$$f_n \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_0) |z_{n0}|^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega_{n0} |z_{n0}|^2 \quad (4.12)$$

conocida como *fuerza de oscilador*. Reemplazando (4.14) en (4.13) se obtiene

$$\alpha_{cuántico} = \sum_n f_n \frac{e^2}{m\omega_{n0}^2} \quad (4.13)$$

Comparando las formulas (4.6) y (4.13) puede observarse que la polarizabilidad cuántica es la combinación lineal de las polarizabilidades de diferentes osciladores clásicas y los coeficientes en esta combinación son las fuerzas de oscilador que caracterizan los aportes de cada uno de los osciladores.

De manera similar, estudiando el comportamiento de un sistema cuántico sumergido en un campo electromagnético y aplicando la teoría de perturbaciones para analizar el equilibrio entre la absorción, emisión espontánea e inducida se encuentra una relación lineal de la intensidad total de la luz emitida,  $I_{n,n'}$ , las probabilidades de transición espontánea  $A_{n,n'}$  e inducida  $B_{n,n'}$  con la fuerza de oscilador [13]

$$I_{n,n'} = \frac{2e^2(E_{n'} - E_n)^3}{3\hbar^2 mc^3} f_{n,n'}; \quad A_{n,n'} = \frac{2e^2(E_{n'} - E_n)^2}{3\hbar^2 mc^3} f_{n,n'}; \quad B_{n,n'} = \frac{e^2}{24\pi^2 \hbar^2 m(E_{n'} - E_n)} f_{n,n'} \quad (4.14)$$

### 3.3 CÁLCULO DE LOS ELEMENTOS MATRICIALES

Los elementos de matriz de la coordenada  $x$  correspondiente a una transición desde el estado  $n_z n m$  al estado  $n_z' n' m'$ , donde  $x = \rho \cos \varphi$ , está dado por

$$x_{n,n'}^{m,m'} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \rho \Psi_r^2(\rho, z) \Phi^{n'm'}(\rho) \Phi^{nm}(\rho) \rho d\rho dz \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} \cos \varphi e^{i(m-m')} d\varphi \quad (4.15)$$

Si  $m' \neq m \pm 1$  la integral respecto  $\varphi$  se hace cero y se obtiene la siguiente regla de selección para la radiación emitida con polarización paralela a  $x$

$$\Delta m = \pm 1 \quad (4.16)$$

Si la regla de selección (4.16) se satisface, la integración sobre  $\varphi$  da exactamente 1. En este caso (4.15) se reduce a

$$x_{n,n'}^{m,m'} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} \rho \Psi_r^2(\rho, z) \Phi^{n'm \pm 1}(\rho) \Phi^{nm}(\rho) \rho d\rho dz \quad (4.17)$$

Los elementos de matriz de la coordenada  $z$  correspondiente a una transición desde el estado  $n_z n m$  al estado  $n_z' n' m'$  está dado por

$$z_{n,n'}^{m,m'} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} z \Psi_r^2(\rho, z) \Phi^{n'm'}(\rho) \Phi^{nm}(\rho) \rho d\rho dz \int_0^{2\pi} \frac{1}{2\pi} e^{i(m-m')} d\varphi \quad (4.18)$$

Si  $m' \neq m$  la integral sobre  $\varphi$  se hace cero y se obtiene la siguiente regla de selección para la radiación emitida con polarización paralela a  $z$

$$\Delta m = 0 \quad (4.19)$$

Si la regla de selección (4.19) se satisface, la integración sobre  $\varphi$  da exactamente 1. En este caso (4.23) se reduce a

$$z_{nm}^{n'm} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^{\infty} z \Psi_r^2(\rho, z) \Phi^{n'm}(\rho) \Phi^{nm}(\rho) \rho d\rho dz \quad (4.20)$$

Teniendo en cuenta las reglas de selección (4.21) y (4.24), la corrección de segundo orden para la energía del estado  $n_z nm$  es

$$\Delta E_{nm} = \gamma^2 \left[ \cos^2 \alpha \left( \sum_{n'} \frac{|x_{nm}^{n'm+1}|^2}{E_{nm} - E_{n'm+1}} + \frac{|x_{nm}^{n'm-1}|^2}{E_{nm} - E_{n'm-1}} \right) + \text{sen}^2 \alpha \sum_{n' \neq n} \frac{|z_{nm}^{n'm}|^2}{E_{nm} - E_{n'm}} \right], \quad (4.21)$$

donde  $\gamma = \beta F$ , y  $\beta$  está definido en (4.3). Como el campo eléctrico se encuentra orientado formando un ángulo  $\alpha$  con respecto al eje de las x, la fuerza de oscilador para este sistema se define como

$$f_{nn'} = f_{nn'}^x + f_{nn'}^z, \quad (4.22)$$

donde

$$f_{nn'}^x = (E_{n'} - E_n) |x_{nn'}|^2 \cos^2 \alpha; \quad f_{nn'}^z = (E_{n'} - E_n) |z_{nn'}|^2 \text{sen}^2 \alpha \quad (4.23)$$

en unidades adimensionales. Utilizando los resultados anteriores tenemos para elementos matriciales de la fuerza oscilador diferentes de cero las siguientes formulas:

$$\left. \begin{aligned} f_{nm}^{n'm+1} &= (E_{n'm+1} - E_{nm}) |x_{nm}^{n'm+1}|^2 \cos^2 \alpha \\ f_{nm}^{n'm-1} &= (E_{n'm-1} - E_{nm}) |x_{nm}^{n'm-1}|^2 \cos^2 \alpha \\ f_{nm}^{n'm} &= (E_{n'm} - E_{nm}) |z_{nm}^{n'm}|^2 \text{sen}^2 \alpha \end{aligned} \right\} \quad (4.24)$$

La polarizabilidad cuántica, la intensidad total de luz emitida y la probabilidad de transición para este sistema en unidades adimensionales se calculan

$$\alpha_{nm} = \sum_{n'm'} \frac{f_{nm}^{n'm'}}{(E_{n'm'} - E_{nm})^2} \quad (4.25)$$

$$I_{nm}^{n'm'} = (E_{n'm'} - E_{nm})^3 f_{nm}^{n'm'} \quad (4.26)$$

$$A_{nm}^{n'm'} = (E_{n'm'} - E_{nm})^2 f_{nm}^{n'm'} \quad (4.27)$$

### 3.4 RESULTADOS

Tabla II. Corrección de la energía para un campo externo de 50 KV/cm

Estado	Anillo	Disco	Lente	Pirámide
1s	0,00615	0,12044	0,53767	1,21567
2s	0,01018	0,40856	0,96724	1,28893
3s	0,01011	0,68503	1,02536	0,98291
1p	0,00276	0,13835	0,54099	0,98834
2p	0,00525	0,39875	0,80823	0,93389
3p	0,00584	0,51139	0,693	0,62912
1d	0,0016	0,13872	0,5462	1,00714
2d	0,00302	0,40124	0,81445	0,92316
3d	0,00307	0,51133	0,67756	0,57388

En la tabla II se encuentran registrados los valores de la corrección de las energías (en Rydberg efectivo) de los diferentes niveles energéticos para un electrón confinado en QDs en forma de anillo, disco, lente y pirámide bajo la interacción de un campo eléctrico externo de 50 KV/cm perpendicular a la dirección de crecimiento del QD. Al comparar los resultados de cada uno de los niveles de energías para los diferentes QDs registrados en la tabla I con su respectiva corrección registrada en la tabla II se ve que la corrección es insignificante ya que es del orden de una milésima de Rydberg efectivo. Además, para el QDs en forma de anillo la corrección es menor (en 1 orden de magnitud) comparada con la corrección de los demás QDs lo que demuestra que el campo eléctrico externo aplicado en esta dirección afecta en menor grado el espectro energético del anillo debido a que el portador de carga posee una región más reducida para moverse.

En la fig. 7 se presentan las gráficas de la polarizabilidad en función del ángulo de incidencia del campo eléctrico externo para el estado 1s en QDs de diferentes formas. En estas gráficas se puede observar una disminución en el valor de la polarizabilidad a medida que se aumenta el ángulo de incidencia del campo eléctrico externo lo que da a entender que el campo eléctrico tiene un mayor efecto sobre el movimiento lateral que para el movimiento transversal y esto es debido a la diferencia entre la altura del QD y su respectivo radio.

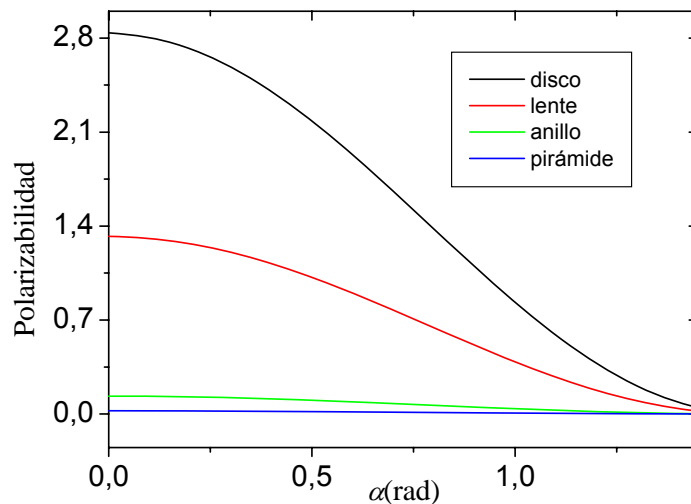


Fig. 7. Gráfica de la polarizabilidad en función del ángulo de incidencia del campo eléctrico externo

Además, se puede observar en el gráfico que el valor mas grande de la polarizabilidad es para el QD en forma de disco seguida de la lente , anillo y por último la pirámide que es el gráfico para el cual la polarizabilidad prácticamente se mantiene estable sin importar el ángulo de incidencia del campo eléctrico. Lo anterior se puede relacionar con el hecho de que el sistema que presenta el menor confinamiento del electrón es el QD en forma de disco, seguido de la lente hasta llegar a la pirámide que es el sistema donde es mayor el confinamiento. Se observa que para cada uno de los SAQDs el máximo valor para la polarizabilidad se obtiene cuando el campo eléctrico se aplica paralelo al plano del QD y que decae hasta un valor mínimo, aproximadamente igual a cero, para el caso cuando el campo eléctrico externo se aplica en la dirección de crecimiento del SAQD lo que muestra que el campo eléctrico afecta de manera sensible el movimiento del portador en la dirección vertical pero este efecto es despreciable comparada con el efecto del campo eléctrico al movimiento del portador en la dirección paralela al plano del SAQD.

La tabla III contiene la fuerza del oscilador, definida en (4,29), para el estado inicial 1s. La fuerza del oscilador entre el estado 1s – 1s y entre el estado nd no se encuentran debido a que no cumplen con las reglas de selección (4.21) y (4.24). Además, la fuerza de oscilador para los estados finales 2s y 3s son diferentes de cero siempre y cuando la polarización de la onda sea en la dirección de crecimiento del QD y para los estados finales 1p, 2p y 3p los valores de la fuerza de oscilador se encuentran para una onda polarizada en la dirección del plano donde se encuentra el QD según lo indican las reglas de selección (4.21) y (4.24). en la tabla IV se presentan los cálculos del la intensidad de luz emitida (debo analizar las unidades de la intensidad y la probabilidad)

Tabla III. fuerza de oscilador para QDs de diferentes formas. Estado inicial 1s

Estado inicial	1s			
Estado final	Anillo	Disco	Lente	Pirámide
1s	-----	-----	-----	-----
2s	1,4952E-10	8,90671E-09	2,08004E-05	1,8065E-04
3s	4,13232E-10	6,333E-08	3,8417E-07	3,5353E-05
1p	2,3239E-02	2,11689E-01	2,1957E-01	2,1859E-01
2p	2,14117E-02	5,9222E-03	1,27618E-06	1,0092E-03
3p	5,43089E-11	9,54935E-04	6,6262E-05	8,9385E-05

#### 4. CONCLUSIONES

Se presentó un método simple para calcular el espectro energético de un electrón confinado en un punto cuántico auto-ensamblado. En este cálculo se utilizó la aproximación adiabática para separar los movimientos transversal y radial debido a que la razón entre la altura máxima y el radio externo del QD es muy pequeña.

Se presentaron las gráficas de contorno para la densidad de distribución de carga para los estados 1s, 2s y 3s en QDs con diferente forma geométrica en el plano a lo largo de una sección transversal a través del eje de simetría donde se muestra la evolución de la distribución de carga en los diferentes estados. Se demostró que el pico correspondiente a la mayor distribución de carga se mueve hacia la región periférica a medida que aumenta el número cuántico  $n$ .

Se presentaron los niveles de energía en función del radio de la base del QD donde se mostró el incremento del valor de la energía cuando se disminuye el radio.

Se analizaron los efectos de un campo eléctrico externo sobre el espectro energético del electrón en un punto cuántico auto ensamblado utilizando la teoría de perturbación para lo cual se consideró campos eléctricos del orden de 50 KV/cm donde se mostró que la corrección al valor de la energía es prácticamente insignificante para campos eléctricos de este orden de magnitud. Se encontraron los valores esperados de la posición y se encontró las reglas de selección correspondiente a las polarización en dirección del eje de crecimiento del QD y en dirección radial. Se encontraron algunos parámetros como la fuerza de oscilador y la polarizabilidad. Se realizó una gráfica de la polarizabilidad en función del ángulo de incidencia del campo eléctrico externo en donde se observó una dependencia de la polarizabilidad con la forma geométrica del QDs.

Los resultados de este trabajo fueron parcialmente presentados en el II encuentro de computación e informática cuántica realizado en la ciudad de Popayán y fueron sometidos para publicar en la revista: Unicauca ciencia. En el futuro se plantea realizar el cálculo de intensidad total de luz emitida, probabilidades de emisión y absorción mediante el uso de los resultados de la fuerza de oscilador y la energía calculados en este trabajo.

## 5. ANEXOS

### 5.1 TABE.FOR

\$debug

```
c-----  
c programa test  
  parameter(np=50,nl=100)  
  implicit real*8(a-h,o-z)  
  dimension ancho(np),Etab(np,nl),Epar(nl),Eimpar(nl)  
  V0=40.0  
  dmax=0.852  
  call tab_Eniv(V0,np,nl,dmax,Niv,ancho,Epar,Eimpar,Etab)  
  write(*,*)niv  
  read(*,*)  
  stop  
  end  
c-----  
  subroutine tab_Eniv(V0,np,nl,dmax,Niv,da,Epar,Eimpar,Etab)  
  implicit real*8(a-h,o-z)  
  dimension Etab(np,nl),Epar(nl),Eimpar(nl),da(np)  
  open(1,file='TabE.dat')  
  dmin=0.001  
  h=(dmax-dmin)/(np-1)  
  call Eniveles(dmax,V0,nl,npar,nimpar,Epar,Eimpar)  
  Niv=npar+nimpar  
  do i=1,np  
    do j=1,Niv  
      Etab(i,j)=V0  
    end do  
  end do  
  do i=1,np  
    da(i)=dmin+h*(i-1)  
    call Eniveles(da(i),V0,nl,npar,nimpar,Epar,Eimpar)  
    do k=1,npar  
      Etab(i,2*k-1)=Epar(k)  
    end do  
    do k=1,nimpar  
      Etab(i,2*k)=Eimpar(k)  
    end do  
  end do  
  do i=1,np  
    nn=Niv
```

```

        if(nn.gt.8) nn=8
        write(1,11)da(i),(Etab(i,j),j=1,nn)
11      format (2x,f5.2,8f9.4)
        end do
        close(1)
        return
        end
c -----
      subroutine Eniveles(d,V0,nl,npar,nimpar,Epar,Eimpar)
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      dimension Epar(nl),Eimpar(nl)
      external funp
      external funimp
      a=1.0d-10
      b=V0-1.0d-3
      eps=1.0d-8
      c calculo de los valores de las raices para la funcion par
      call allraiz1(a,b,funp,d,V0,eps,npar,Epar)
      c calculo de los valores de las raices para la funcion impar
      call allraiz1(a,b,funimp,d,V0,eps,nimpar,Eimpar)
      return
      end
c-----
c La función externa para programa-test para Raiz1
      function funp(d,V0,E)
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      ak=dsqrt(E)
      x=ak*d/2.0
      akp=dsqrt(V0-E)
      funp=ak*dsin(x)-akp*dcos(x)
      return
      end
c -----
c La función externa para programa-test para Raiz1
      function funimp(d,V0,E)
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      ak=dsqrt(E)
      x=ak*d/2.0
      akp=dsqrt(V0-E)
      funimp=ak*dcos(x)+akp*dsin(x)
      return
      end
c-----

```

c c lculo de la funci3n de onda en el punto x para el pozo de ancho  
c al, altura de la barrera V0, nivel de energa E y nPa toma los  
c valores 0 si es la soluci3n par y 1 si es la soluci3n impar

```

function fonda_par(d,V0,E,x)
implicit real*8(a-h,o-z)
ak=dsqrt(E)
if(x.gt.0.0.and.x.lt.d)then
fonda_par=dcos(ak*(x-d/2.0))
else if(x.lt.0.0)then
akp=dsqrt(V0-E)
fonda_par=dcos(d*ak/2)*exp(akp*x)
else if(x.gt.d)then
akp=dsqrt(V0-E)
fonda_par=dcos(d*ak/2)*exp(-akp*(x-d))
end if
return
end

```

c-----

c funcion de onda impar

```

function fonda_impar(d,V0,E,X)
implicit real*8(a-h,o-z)
ak=dsqrt(E)
if(x.gt.0.0.and.x.lt.d)then
fonda_impar=dsin(ak*(x-d/2.0))
else if(x.lt.0.0)then
akp=dsqrt(V0-E)
fonda_impar=dsin(d*ak/2)*exp(akp*x)
else if(x.gt.d)then
akp=dsqrt(V0-E)
fonda_impar=dsin(d*ak/2)*exp(-akp*(x-d))
end if
return
end

```

c-----

Subroutine allraiz1(a,b,fun,d,V0,eps,nraiz,xraiz)

```

parameter (n=1000)
implicit real*8 (a-h,o-z)
logical existe
dimension xraiz(100)
external fun
h=(b-a)/(n-1)
nraiz=0
xl=a

```

```

xr=a+h
fl=fun(d,V0,xl)
10  fr=fun(d,V0,xr)
    existe=.false.
    call raiz1(fun,xl,xr,eps,d,V0,existe,xraz)
if(existe) then
  nraiz=nraiz+1
  xraiz(nraiz)=xraz
end if
xl=xr
fl=fr
xr=xl+h
if(xr.lt.b) go to 10
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  
c

```

subroutine Raiz1(func,a,b,eps,d,V0,existe,xraiz)
implicit real*8 (a-h,o-z)
logical existe
existe=.false.
c los parametros del extremo izquierda
xl=a
fl=func(d,V0,xl)
c los parametros del extremo derecho
xr=b
fr=func(d,V0,xr)
c comparación de los signos de la función en los extremos
if(fl*fr.le.0.0) then
  existe=.true.
c inicialización del proceso de bisección
10  x=(xl+xr)/2.0d0
c si la distancia entre los extremos es menor que eps
c entonces ya el centro del intervalo x define la raiz
c con la precisión sugerida
if((xr-xl).le. eps) go to 40
c definición el valor de la función en el centro del intervalo
f=func(d,V0,x)
c comparación de los signos de la función en el centro del
c intervalo y en el extremo izquierda

```

```

                if(f*fl) 20,40,30
c si signos son diferentes se escoge el subintervalo izquierda
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
        return
        end

```

## 5.2 RADIAL.FOR

```

$debug
parameter(npp=100,mp=1,nm=500)
parameter(np=25,np1=35,np2=46)
parameter(nsp=49)
parameter (nrmax=2,mrmax=2)
implicit real*8(a-h,o-z)
common/qdot/d0,Rint,Rext,db,V0,Gam
common/Espl/x(nsp),y(nsp),b(nsp),c(nsp),d(nsp),e(nsp)
common /estate/ nz,nr,mr
common /LIMITS/ Vmin,Vmax
common /fi_radial/ xonda(nm),fi_onda(nm)
common/Fspl/fonda(nm),bf(nm),cf(nm),df(nm),ef(nm)
common /ground/ Elibre
common /Anorm/ Snorm
real xp(np2),yp1(0:nrmax,np2)
character*10 name
gam=0.0
V0=40.0
d0nm=4.0
dbnm=0.0
Rintnm=20.0
Rextnm=40.0
am=0.076
epsilon=12.71

```

```

RBohr=0.053*epsilon/am
d0=d0nm/RBohr
db=dbnm/RBohr
Rint=Rintnm/RBohr
Rext=Rextnm/RBohr
c Guardar la informacion sobre curvas de potencial
rmax=1.5*Rext
Rmin=1.0d-6
hpaso=(Rmax-Rmin)/(npp-1)
call pre_spline(x,y,b,c,d,e)
c Encontrar el minimo y maximo de curva de potencial
Vmin=V0
Vmax=0.0
do i=1,npp
  ro=Rmin+hpaso*(i-1)
  Ena=Ez(ro)
  if(Ena.gt.Vmax) Vmax=Ena
  if(Ena.lt.Vmin) Vmin=Ena
end do
c Números cuanticos radiales, nr y mr
write(*,*) ' mr ....?'
read(*,*) mr
do nr=0,nrmax
  Ener=Energy(nr,mr)
c Encontrar los coeficientes de spline para funcion radial
Elibre=Ener
CALL F_MALLA (NM,xonda,fi_onda,fonda)
KPR=0
CALL SPLINE(NM,xonda,fonda,BF,CF,DF,EF,KPR,INT)
cc Normalizar la funcion de onda fro1
S=0.0
do i=1,npp
  ro=rmin+hpaso*(i-1)
  yy=fro1(ro)
  S=S+ro*yy**2
end do
S=S*hpaso
Snorm=1.0d0/dsqrt(S)
c graficar funcion de onda fro(ro)
romin=1.0d-10
romax=Rext
h=(romax-romin)/(np-1)
ro=romin

```

```

do i=1,np
  xp(i)=ro
  yp1(nr,i)=fro(ro)
  ro=ro+h
end do
  h=Rext/(np1-np-1)
do i=np+1,np1
  xp(i)=ro
  yp1(nr,i)=fro(ro)
  ro=ro+h
end do
  h=2*Rext/(np2-np1-1)
do i=np1+1,np2
  xp(i)=ro
  yp1(nr,i)=fro(ro)
  ro=ro+h
end do
end do
write(*,*)'nombre del archivo'
read(*,'(a)')name
open(1,file=name)
do i=1,np2
  write(1,11) xp(i),(yp1(nr,i),nr=0,nrmax)
end do
close(1)
11 format(2x,(5e12.4))
stop
end

C-----
subroutine pre_spline(x,y,b,c,d,e)
parameter(nsp=49)
implicit real*8(a-h,o-z)
dimension x(nsp),y(nsp),b(nsp),c(nsp),d(nsp),e(nsp)
open(1,file='Tabe.dat',status='old')
KPR=0
do i=1,nsp
  read(1,*)x(i),y(i)
end do
CALL SPLINE(NSP,x,y,B,C,D,E,KPR,INT)
close(1)
return
end

C-----

```

```

function Ez(ro)
parameter(nsp=49)
implicit real*8(a-h,o-z)
common/Espl/x(nsp),y(nsp),b(nsp),c(nsp),d(nsp),e(nsp)
da=dfun(ro)
KPR=0
Ez=SEVAL(KPR,Nsp,da,X,Y,B,C,D,E)
return
end

```

```

c-----
function dfun(ro)
implicit real*8(a-h,o-z)
common/qdot/d0,Rint,Rext,db,V0,Gam
dfun=db
if(ro.le.Rext.and.ro.ge.Rint)then
  x=ro/Rext

```

```

c Anillo
  Rmed=(Rext+Rint)/2.0
  R=Rext-Rmed
  xro=(ro-Rmed)/R
  dfun=db+d0*dsqrt(1-xro**2)
end if
return
end

```

```

c-----
c Funcion de onda radial no normalizada
function fro1(ro)
parameter(nm=500,nmax=10)
implicit real*8(a-h,o-z)
common /fi_radial/ xonda(nm),fi_onda(nm)
  common/Fspl/fonda(nm),bf(nm),cf(nm),df(nm),ef(nm)
common /ground/ elibre
  common/qdot/d0,Rint,Rext,db,V0,Gam
common /estate/ nz,nr,mr
common /LIMITS/ Vmin,Vmax
dimension BI(0:nmax), DI(0:nmax), BK(0:nmax), DK(0:nmax)
if(ro.le.Rext) then
  KPR=0
  fro1=SEVAL(KPR,Nm,ro,Xonda,Fonda,BF,CF,DF,EF)
  if(mr.ne.0) fro1=fro1*ro**mr
else
  KPR=0
  rot=Rext-0.00001d0

```

```

        frot=SEVAL(KPR,Nm,rot,Xonda,Fonda,BF,CF,DF,EF)
    if(mr.ne.0) frot=frot*rot**mr
c    if(mr.ne.0) fro1=fro1*ro**mr
        rz=Vmax-Elibre
c    if(rz.le.0.0)rz=1.0d-20
        akap=dsqrt(rz)
        xx=akap*Rext
        if(mr.eq.0) then
            call IK01A(XX,BI0,DI0,BI1,DI1,BK0,DK0,BK1,DK1)
            BA=BK0
c        write(*,*) 'BA= ',BA
        else
            CALL IKNA(mr,xx,NMax,BI,DI,BK,DK)
            BA=BK(mr)
        end if
        xx=akap*ro
        if(mr.eq.0) then
            call IK01A(XX,BI0,DI0,BI1,DI1,BK0,DK0,BK1,DK1)
            BB=BK0
c        write(*,*) 'BB= ',BB
        else
            CALL IKNA(mr,xx,NMax,BI,DI,BK,DK)
            BB=BK(mr)
        end if
        fro1=frot*BB/BA
    end if
    return
end
cc Normalizar la funcion de onda fro1
c-----
c funcion de onda del estado base para electron en direccion radial
c NORMALIZADA
function fro(ro)
implicit double precision(a-h,o-z)
common /Anorm/ Snorm
fro=fro1(ro)*Snorm
return
end
c-----
c funcion de onda del estado base
c para electron en direccion transversal
function fz(z,ro)
implicit double precision(a-h,o-z)

```

```

common/qdot/d0,Rint,Rext,db,V0,Gam
common /LIMITS/ Vmin,Vmax
d=dfun(ro)
ak=dsqrt(Ez(ro))
akap=(Vmax-ak**2)
cs=dcos(0.5*ak*d)
if(akap.lt.0.0d0) akap=1.0d-20
akap=dsqrt(akap)
if(z.le.0.0) then
  fz=cs*dexp(akap*z)
else if(z.le.d) then
  fz=dcos(ak*(z-0.5*d))
else
  fz=cs*dexp(-akap*(z-d))
end if
c normalizr
  AN=cs*cs/akap+d/2.0+dsin(ak*d)/(2*ak)
  fz=fz/dsqrt(AN)
return
end

c-----
c funcion de onda bidimensional del estado base
c para electron en direccion radial
function ff(z,ro)
implicit double precision(a-h,o-z)
ff=fz(z,ro)*fro(ro)
return
end

c-----
c Calcula los valores de funcion de onda radial sobre la malla
Subroutine F_malla (NM,xonda,fi_onda,fonda)
implicit double precision(a-h,o-z)
common /ground/ Elibre
common /estate/ nz,nr,mr
common/qdot/d0,Rint,Rext,db,V0,Gam
dimension xonda(nm),fi_onda(nm),fonda(nm)
dimension sbfun(1000)
E=Elibre

c
c Calcular la funcion subintegral para A(z) en los puntos d e la malla
c Calcular los valores de la funcion subintegral sobre la malla
do kk=1,nm
  ro=xonda(kk)

```



```

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
C
7  IF(NDIM-3)12,11,8
C
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
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

```

### 5.3 QNC8.FOR

\$debug

```

real*8 function sub_x(ro)
implicit real*8(a-h,o-z)
parameter(nn=22,n=46)
common/enz/XE(nn),YE(nn),BE(nn),CE(nn),DE(nn),FE(nn)
common/frr/XF(n),YF(n),BF(n),CF(n),DF(n),FF(n)
common/Elevel/V0
common/niveles/n1,n2,m1,m2
common/prm/pro
external sub_u
Real*8 a,b,Abserr,Relerr,Result,Errest,Flag
Integer Nofun
Relerr=1.0d-10
Abserr=1.0d-10
pro=ro
a=-0.45
b=1.0
Call Quanc8(sub_u,a,b,Abserr,Relerr,Result,
$ Errest,Nofun,Flag)
call pre_fspline(N1,m1,XF,YF,BF,CF,DF,FF)
sub_x=result*fro(ro)*ro**2
ndelta=abs(m2-m1)

```

```

if(ndelta.eq.1)then
  call pre_fspline(N2,m2,XF,YF,BF,CF,DF,FF)
  sub_x=sub_x*fro(ro)
else
  sub_x=0.0
end if
return
end

```

```

C-----
      function sub_u(z)
      implicit real*8(a-h,o-z)
      common/prm/pro
      ro=pro
      sub_u=fz(z,ro)**2
      return
      end

```

```

C-----
      function Ez(ro)
      parameter(n=22)
      implicit real*8(a-h,o-z)
      common/Elevel/V0
      common/enz/XE(n),YE(n),BE(n),CE(n),DE(n),FE(n)
      KPR=0
      Ez=SEVAL(KPR,N,ro,XE,YE,BE,CE,DE,FE)
      if(ro.gt.XE(n))then
        rot=XE(n)
        Ez=YE(n)
      end if
      if(Ez.ge.V0)Ez=39.28
      return
      end

```

```

C-----
      subroutine Pre_espline(x,y,b,c,d,f)
      parameter(n=22)
      implicit real*8(a-h,o-z)
      dimension x(n),y(n),b(n),c(n),d(n),f(n)
      open(1,file='perfil.dat',status='old')
      do i=1,n
        read(1,*)x(i),y(i)
      end do
      KPR=0
      CALL SPLINE(N,x,y,B,C,D,F,KPR,INT)
      close(1)

```

```
return  
end
```

```
c-----  
function dfun(ro)  
parameter(n=22)  
implicit real*8(a-h,o-z)  
common/perfil/XD(n),YD(n),BD(n),CD(n),DD(n),FD(n)  
KPR=0  
dfun=SEVAL(KPR,N,ro,XD,YD,BD,CD,DD,FD)  
if(ro.gt.XD(n))then  
  rot=XD(n)  
  dfun=SEVAL(KPR,N,rot,XD,YD,BD,CD,DD,FD)  
end if  
return  
end
```

```
c-----  
subroutine Pre_dspline(x,y,b,c,d,f)  
parameter(n=22)  
implicit real*8(a-h,o-z)  
dimension x(n),y(n),b(n),c(n),d(n),f(n)  
open(1,file='perfil.dat',status='old')  
do i=1,n  
  read(1,*)x(i),A,y(i)  
end do  
KPR=0  
CALL SPLINE(N,x,y,B,C,D,F,KPR,INT)  
close(1)  
return  
end
```

```
c-----  
c funcion de onda del estado base  
c para electron en direccion transversal  
function fz(z,ro)  
implicit double precision(a-h,o-z)  
common/Elevel/V0  
d=dfun(ro)  
ak=dsqrt(Ez(ro))  
akap=(V0-ak**2)  
cs=dcos(0.5*ak*d)  
if(z.le.0.0) then  
  akap=dsqrt(akap)  
  an=2.0*akap/cs**2  
  an=dsqrt(an)
```

```

    fz=an*cs*dexp(akap*z)/3.0
  else if(z.le.d) then
    an=2.0/(d+sin(ak*d)/ak)
    an=dsqrt(an)
    fz=an*dcos(ak*(z-0.5*d))/3.0
  else
    akap=dsqrt(akap)
    an=2.0*akap/cs**2
    an=dsqrt(an)
    fz=an*cs*dexp(-akap*(z-d))/3.0
  end if
c normalizr
  return
end

c-----
function fro(ro)
  parameter(n=46)
  implicit real*8(a-h,o-z)
  common/frr/XF(n),YF(n),BF(n),CF(n),DF(n),FF(n)
  KPR=0
  fro=SEVAL(KPR,N,ro,XF,YF,BF,CF,DF,FF)
  return
end

c-----
  subroutine pre_fspline(Niv,mniv,x,y,b,c,d,f)
  parameter(nsp=46)
  implicit real*8(a-h,o-z)
  dimension x(nsp),y(nsp),b(nsp),c(nsp),d(nsp),f(nsp)
  if(mniv.eq.0)then
    open(1,file='fonm0.dat',status='old')
  else if(mniv.eq.1)then
    open(1,file='fonm1.dat',status='old')
  else
    open(1,file='fonm2.dat',status='old')
  end if
  if(niv.eq.0)then
    KPR=0
    do i=1,nsp
      read(1,*)x(i),y(i)
    end do
  else
    KPR=0
    do i=1,nsp

```

```

        read(1,*)x(i),(a,j=1,niv),y(i)
    end do
end if
CALL SPLINE(NSP,x,y,B,C,D,F,KPR,INT)
close(1)
return
end

```

C-----

```

function fonda(ro,z)
parameter(n=46)
implicit real*8(a-h,o-z)
fonda=fz(ro,z)*fro(ro)
return
end

```

C-----

```

Subroutine Quanc8a(Fun,a,b,Abserr,Relerr,Result,
$               errest,nofun,flag)
Real*8  Fun,a,b,abserr,relerr,result,errest,flag
Integer nofun

```

```

c
c Encontrar integral para fun(x) de a hasta b
c con la precision definida por usuario
c Programa es automatica y adaptiva y esta fundada
c en la formula de Newton - Cotes del orden 8
c
c INFORMACION DE LA ENTRADA:
c
c FUN   - nombre de la funcion fun(x) bajo
c        de la integral que debe ser definida
c        en una subprograma del usuario
c a,b   - limites inferior y superior del intervalo
c        de integracion
c relerr - error relativo aceptable (nonegativo)
c abserr - error absoluto aceptable (nonegativo)
c
c INFORMACION DE LA SALIDA:
c
c result - el valor aproximado de la integral
c errest - estimacion del valor real del error
c nofun  - numero de accesos al calculo de la
c        funcion fun(x) para calcular result
c flag   - el parametro de confianza.Si flag es igual
c        a 0, el result satisface a una de las

```

```

c      condiciones - abserr o relerr. Si flag
c      =XXX.YYY, entonces XXX - es el numero de
c      los intervalos en los cuales el proceso no
c      se convierge, a 0.YYY -es la parte del
c      intervalo inicial, no pasado en el momento
c      cuando NOFUN se acerco a su valor limite
c
c
c      Real*8 W0,W1,W2,W3,W4,Area,X0,F0,Stone,Step,
$      Cor11,Temp
c      Real*8 Qprev,Qnow,Qdiff,Qleft,Esterr,Tolerr
c      Real*8 Qright(31),F(16),X(16),Fsave(8,30),
$      Xsave(8,30)
c      Integer Levmin,Levmax,Levout,Nomax,Nofin,
$      Lev,Nim,I,J
c
c      ETAPA NUMERO 1
c
c      Definicion de los valores iniciales de las
c      variables, no dependientes del intervalo de
c      integracion y de las constantes
c
c      Levmin=1
c      Levmax=30
c      Levout=6
c      Nomax=5000
c      Nofin=Nomax-8*(Levmax-Levout+2**(Levout+1))
c
c
c      Si Nofun se aumenta hasta Nofin, entonses Alerta!!!
c
c
c      W0=3956.0d0/14175.0d0
c      W1=23552.0d0/14175.0d0
c      W2=-3712.0d0/14175.0d0
c      W3=41984.0d0/14175.0d0
c      W4=-18160.0d0/14175.0d0
c      Asignar el valor zero a las sumas variables
c
c      Flag=0.0d0
c      Result=0.0d0
c      Cor11=0.0d0
c      Errest=0.0d0

```

```

Area=0.0d0
Nofun=0
If (a.eq.b) Return
c
c   ETAPA NUMERO 2
c
c   Asignar los valores iniciales a las variables
c   que dependen del intervalo, en concordancia
c   con el primer intervalo
c
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 j=2,16,2
  F(j)=Fun(X(j))
End do
Nofun=9
c
c   ETAPA NUMERO 3
c
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
c
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
    Nofun=Nofun+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
c   Chequeo de convergencia para el intervalo
c
   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(Nofun.gt.Nofin) go to 60
   If(Esterr.le.Tolerr) go to 70
c
c   ETAPA NUMERO 5
c
c   No hay convergencia
c   Definir el intervalo siguiente
c
50  Nim=2*Nim
   Lev=Lev+1
c
c   Almacenar los elementos de la parte derecha
c   del intervalo para usarlos en adelante
c
   Do i=1,8
       Fsave(i,Lev)=F(i+8)
       Xsave(i,Lev)=X(i+8)
   End do
c
c   Organizar los elementos de la parte izquierda
c   del intervalo para usarlos

```

```

c
  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
c   ETAPA NUMERO 6 (Alerta)
c
c  Numero de los calculos de la funcion
c  se acerco al numero critico y puede
c  superar el limite establecido
c
60  Nofin = 2*Nofin
    Levmax=Levout
    Flag=Flag+(b-X0)/(b-a)
    Go to 70

c
c  Numero de bisecciones
c  es igual a Levmax
c
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
c????????????????????????????????????????????????????????????
    Lev=Lev-1
c????????????????????????????????????????????????????????????

```

```

    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 Quanc8(Fun,a,b,Abserr,Relerr,Result,
    $                errest,nofun,flag)
c
c
c  Real*8  Fun,a,b,abserr,relerr,result,errest,flag
c  Integer nofun
c
c  Encontrar integral para fun(x) de a hasta b
c  con la precision definida por usuario
c  Programa es automatica y adaptiva y esta fundada

```

```

c en la formula de Newton - Cotes del orden 8
c
c INFORMACION DE LA ENTRADA:
c
c FUN - nombre de la funcion fun(x) bajo
c de la integral que debe ser definida
c en una subprograma del usuario
c a,b - limites inferior y superior del intervalo
c de integracion
c relerr - error relativo aceptable (nonegativo)
c abserr - error absoluto aceptable (nonegativo)
c
c INFORMACION DE LA SALIDA:
c
c result - el valor aproximado de la integral
c errest - estimacion del valor real del error
c nofun - numero de accesos al calculo del la
c funcion fun(x) para calcular result
c flag - el parametro de confianza. Si flag es igual
c a 0, el result satisface a una de las
c condiciones - abserr o relerr. Si flag
c =XXX.YYY, entonces XXX - es el numero de
c los intervalos en los cuales el proceso no
c se convierge, a 0.YYY -es la parte del
c intervalo inicial, no pasado en el momento
c cuando NOFUN se acerco a su valor limite
c
c
c Real*8 W0,W1,W2,W3,W4,Area,X0,F0,Stone,Step,
$ Cor11,Temp
c Real*8 Qprev,Qnow,Qdiff,Qleft,Esterr,Tolerr
c Real*8 Qright(31),F(16),X(16),Fsave(8,30),
$ Xsave(8,30)
c Integer Levmin,Levmax,Levout,Nomax,Nofin,
$ Lev,Nim,I,J
c
c ETAPA NUMERO 1
c
c Definicion de los valores iniciales de las
c variables, no dependientes del intervalo de
c integracion y de las constantes
c
c Levmin=1

```

```
Levmax=30
Levout=6
Nomax=5000
Nofin=Nomax-8*(Levmax-Levout+2**(Levout+1))
```

```
c
c
c Si Nofun se aumenta hasta Nofin, entonses Alerta!!!
c
```

```
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
```

```
c
Flag=0.0d0
Result=0.0d0
Cor11=0.0d0
Errest=0.0d0
Area=0.0d0
Nofun=0
If (a.eq.b) Return
```

```
c
c ETAPA NUMERO 2
c
c Asignar los valores iniciales a las variables
c que dependen del intervalo, en concordancia
c con el primer intervalo
```

```
c
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 j=2,16,2
  F(j)=Fun(X(j))
End do
Nofun=9
c
c   ETAPA NUMERO 3
c
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
c
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
    Nofun=Nofun+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
c   Chequeo de convergencia para el intervalo
c
    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(Nofun.gt.Nofin) go to 60

```

```

    If(Esterr.le.Tolerr) go to 70
c
c   ETAPA NUMERO 5
c
c   No hay convergencia
c   Definir el intervalo siguiente
c
50  Nim=2*Nim
    Lev=Lev+1
c
c   Almacenar los elementos de la parte derecha
c   del intervalo para usarlos en adelante
c
    Do i=1,8
        Fsave(i,Lev)=F(i+8)
        Xsave(i,Lev)=X(i+8)
    End do
c
c   Organizar los elementos de la parte izquierda
c   del intervalo para usarlos
c
    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
c   ETAPA NUMERO 6 (Alerta)
c
c   Numero de los calculos de la funcion
c   se acerco al numero critico y puede
c   superar el limite establecido
c
60  Nofin = 2*Nofin
    Levmax=Levout
    Flag=Flag+(b-X0)/(b-a)
    Go to 70
c
c   Numero de bisecciones
c   es igual a Levmax
c

```

```

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
c????????????????????????????????????????????????????????
    Lev=Lev-1
c????????????????????????????????????????????????????????
    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
```

## BIBLIOGRAFÍA

- [1] J. L. Zhu, J. Z. Yu, Y. Kawazoe, J. Phys: Condens. Matter 8, 7857 (1996)
- [2] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov, Phys. Stat. Sol. B 213, 325 (1999)
- [3] B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek, Phys. E 5, 185 (2000)
- [4] M. V. Broek, F. M. Peeters, Phys. E 11, 345 (2001)
- [5] B. Szafran, J. Adamowski, S. Bednarek, J. Phys.: Condens. Matter 14, 73 (2002)
- [6] F. M. Peeters and V. A. Schweigert, Phys. Rev. B 53, 1468 (1996)
- [7] J.-L. Zhu, Z. Dai and X. Hu, Phys. Rev. B 68, 045324 (2003); H. Hu, J. L. Zhu, and J. J. Xiong, Phys. Rev B62 ,16777 (2000)
- [8] J. H. Marín, F. García and F. J. Betancur Electron-hole pair in a quantum pyramid, Congr. Nac. Medellin; F. García, F. J. Betancur, I. Mikhailov , W. Gutiérrez, R. Robayo and J. H. Marín, Negatively charged donor and trion in quantum disks SLAFES, Habana; F. García, J. H. Marín, H. Paredes Gutiérrez and I. D. Mikhailov, Low-lying states of two-electron quasi-one-dimensional ring, SLAFES, Habana
- [9] T. Raz, D. Ritter, G. Bahir, Appl. Phys. Lett. 82, 1706 (2003)
- [10] D. Granados, J. M. García, Appl. Phys. Lett. 82, 2401(2003)
- [11] Y. Li, O. Voskoboynikov, C. P. Lee, S. M. Sze, and O. Tretyak; J. Appl. Phys. 90 (2001) 6416
- [12]. Betancur, F. J; Mikhailov, I. D. and Oliveira, L. E. J. Phys. D **31**, 3391 (1998).
- [13] Bethe and Salpeter; Quantum Mechanics of one- and two- electrón systems; Plenum Publishing Corporation. 1977. 255 p.