

**ANÁLISIS NUMÉRICO DEL PROBLEMA DE UNO Y DOS ELECTRONES EN UN
CAMPO CENTRAL**

WILLIAM GUTIERREZ NIÑO

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga, enero del 2005**

**ANÁLISIS NUMÉRICO DEL PROBLEMA DE UNO Y DOS ELECTRONES EN UN
CAMPO CENTRAL**

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

WILLIAM GUTIERREZ NIÑO

**Director
Dr. ILIA D. MIKHAILOV**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
Bucaramanga, enero del 2005**

*A mis padres Gabriel y Miriam.
A mis tres hermanos.
A Mary.*

AGRADECIMIENTOS

Mis más profundos agradecimientos:

A Dios, arquitecto del universo y Señor de mi vida.

Al profesor Ilia Mikhailov, porque su don más grande no ha sido compartir conmigo su gran riqueza, sino enseñarme a descubrir y construir la mía.

A mis padres, porque todo su amor me ha llevado a ser lo que soy, y a estar donde estoy.

A mis hermanos: Giovanni, Liliana y Nelson, por todo su cariño y aguante.

A Mary, por darle a mi vida la forma de una constante oración.

A Jairo Marín y Francisco García, por su sincera amistad, su contagioso entusiasmo y todo su apoyo.

A los Profesores Javier Betancur y Harold Paredes, por su ayuda recibida durante la realización de este trabajo.

A todos mis compañeros y amigos, por brindarme su compañía y afecto.

A la eterna memoria del genial Richard Feynman, quien a través de sus libros fue quien me inspiró esta fascinación por la física.

CONTENIDO

	Pág.
RESUMEN	10
INTRODUCCION	11
1. MÉTODOS APROXIMADOS EN LA TEORÍA DE UN ELECTRÓN	16
1.1 Generalidades	16
1.2 Modelo matemático	19
1.3 Método de diferencias finitas	21
1.3.1 Malla equidistante	22
1.3.1.1 Aplicación al cálculo de los niveles energéticos del átomo de hidrógeno	23
1.3.2 Malla no equidistante	28
1.3.3 Algoritmo de Numerov	30
2. MÉTODOS APROXIMADOS EN LA TEORÍA DE DOS ELECTRONES	32
2.1 Generalidades	32
2.2 Método variacional	35
2.2.1 Funciones de prueba tipo Chandrasekhar y Hylleraas	35
2.2.2 Procedimiento de Hylleraas para dos electrones en 2-D	36
2.3 Método de dimensión fractal	41
2.3.1 Método de dimensión fractal para el átomo de helio en 3-D	43
2.3.2 Extensión del método de dimensión fractal para el átomo de helio en 3-D	45
2.4 Aplicación del procedimiento de Hylleraas en los problemas de trión y D^- en disco cuántico	47
2.5 Aplicación del procedimiento de Hylleraas en los problemas de trión y D^- en anillo cuántico	53
CONCLUSIONES	56
REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	57
BIBLIOGRAFÍA	59

INDICE DE FIGURAS

	Pág.
Fig. 1. Representación de diferentes formas de puntos cuánticos autoensamblados	14
Fig. 2. Representación de una donadora D^0 en GaAs	15
Fig. 3. Ilustración de los nodos de una malla equidistante	20
Fig. 4. Ilustración de los nodos de la malla para átomo de hidrógeno	22
Fig. 5. Ilustración de los nodos de una malla no equidistante	27
Fig. 6. Tipos de sistemas de dos electrones	31
Fig. 7. Esquema del problema de dos electrones en un campo central. Problema clásico problema actual.	32
Fig. 8. Sistema de coordenadas para el problema de dos electrones en 2-D.	35
Fig. 9. Sistema de coordenadas para el problema de dos electrones en 3-D.	42
Fig. 10. Energías laterales del electrón: 1) En estado desacoplado, e^- , 2) Ligado a la donadora D^0 y 3) Ligado al hueco, X, como función del radio del disco cuántico, para dos alturas del disco diferentes: (a) $d=1\text{nm}$ y (b) $d=4\text{nm}$.	49
Fig. 11. Las energías laterales de la donadora cargada negativamente, D^- y el trión como funciones del radio del disco cuántico son comparadas con las energías respectivas de las donadora neutra D^0 y el excitón, X con electrón desligado, para dos alturas diferentes del disco.	50
Fig.12 Las energías laterales de la donadora cargada negativamente, D^- y el trión como funciones del radio exterior del anillo cuántico son comparadas con las energías respectivas de las donadora neutra D^0 y el excitón, X con electrón desligado.	52
.13 Las energías de correlación de la donadora cargada negativamente, D^- y el trión como funciones del radio exterior del anillo.	53

INDICE DE TABLAS

	Pág.
Tabla. 1 Resultados del método de diferencias finitas con malla equidistante para los niveles S del átomo de hidrógeno para dos esquemas diferentes, todos los valores están dados en Ry.	
Tabla. 2 Resultados del método de diferencias finitas con malla equidistante para diferentes pasos. El parámetro $r_{\max} = 100$ se mantuvo fijo en los tres casos. Todos los valores están dados en Ry	
Tabla. 3 Resultados del algoritmo de Numerov para diferentes pasos. Todos los valores están dados en Ry	

ACRONIMOS

D^0 : Impureza donadora neutra.

D : Impureza ionizada negativamente

X : Excitón

X : Trión

QD: Punto cuántico.

QW: Pozo cuántico.

QWW: Hilo cuántico.

AME: Aproximación de masa efectiva.

MDF: Método de Dimensión Fractal

RESUMEN

TITULO: ANALISIS NUMERICO DEL PROBLEMA DE UNO Y DOS ELECTRONES EN UN CAMPO CENTRAL*

AUTOR: WILLIAM GUTIERREZ NIÑO**

PALABRAS CLAVES: Campo central, Método variacional, Método de dimensión fractal, Método de diferencias finitas, Algoritmo de Numerov, Donadora, Trión, Punto cuántico.

Se presenta un análisis comparativo de diferentes técnicas para la solución numérica del problema de uno y dos electrones en presencia de campos centrales, considerando espacios de dos y tres dimensiones. Se presenta la importancia del análisis del problema en las áreas de física atómica y física del estado sólido.

Para el caso del problema de un electrón se plantea el método de diferencias finitas considerando la malla equidistante, la malla no equidistante, y además el algoritmo de Numerov. Para el caso de dos electrones se plantean el método variacional y el método de dimensión fractal considerando funciones de prueba tipo Hylleraas. El procedimiento de Hylleraas fue desarrollado para el problema del ión de hidrógeno negativamente cargado en dos dimensiones, y fue extendido para los casos de una donadora y un trión negativamente cargados.

Para cada método se elaboraron los algoritmos y el software correspondiente. La precisión de los métodos fue controlada mediante su aplicación a iones y átomos con uno y dos electrones. El método variacional y el método de dimensión fractal se aplicaron al cálculo de las energías del estado base de una donadora neutra D^0 , un excitón X , una donadora cargada negativamente D^- y un trión cargado negativamente X^- , confinados en puntos cuánticos auto-ensamblados. Las formas de los puntos cuánticos considerados fueron: anillo y disco.

* Proyecto de grado.

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Illia D. Mikhailov.

ABSTRACT

TITLE: NUMERICAL ANALYSIS OF PROBLEM OF ONE AND TWO ELECTRONS IN A CENTRAL FIELD*.

AUTHOR: WILLIAM GUTIERREZ NIÑO**

KEYWORDS: Central field, Variational method, Dimension fractal method, Finite differences method, Numerov algorithm, Donor, Trion, Quantum dot.

Different techniques and comparative analysis are presented for the numerical solutions of problem of one and two electrons in a central field, it is considered in spaces of two and tree dimensions. The importance of the analysis of problem of one and two electrons in the areas of atomic physics and state solid physic is presented.

For the one electron case is proposed finite differences method considering the equidistant mesh, and furthermore Numerov algorithm. For the two electron case are used the variational and dimension fractal methods considering trial functions type Hylleraas. The Hylleraas`s procedure was doing for the problem of the negative charged hydrogen ion in two dimensions, and it was extended for the cases: negative charged donor and trion in quantum disk and ring.

For each method were doing their software and algorithms. The accuracy of these methods was controlling doing one application to ions and atoms with one and two electrons. The method variational and dimension fractal was used to calculate the ground state energies of an neutral donor D^0 , an exciton X , an negative charged donor D^- and negative charged trion X^- , confined in self assembled quantum dots. The shapes of the quantum dots considered were disk and ring quantum.

* Proyecto de Grado.

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física; PhD. Illia D. Mikhailov

INTRODUCCIÓN

Desde los albores de la mecánica cuántica, el problema de uno y dos electrones en campos centrales despertó un gran interés en los físicos teóricos de la época, debido a la importancia que dichos sistemas tienen en la descripción de micro-procesos a nivel atómico, además de ser una base de comprobación para los diferentes métodos aproximados. Existe una descripción detallada de estudios realizados entre los años 30's y 50's [1-4] para sistemas atómicos donde uno o dos electrones son retenidos por un potencial de confinamiento Coulombiano. En dichos trabajos se demostró que cuando la carga nuclear es pequeña el efecto de la correlación electrónica en átomos con pocos electrones es predominante y las aproximaciones auto-consistentes del tipo Hartree-Fock en este caso son poco aplicables. Además, solo utilizando el método variacional con funciones de prueba tipo Hylleraas y Chandrasekhar se logró obtener para el H^- y el He resultados que están en buena concordancia con datos experimentales.

El interés en el problema surgió otra vez en los años 80's en relación con el estudio de las propiedades de nuevos materiales llamados nanoestructuras, particularmente puntos cuánticos, los cuales han sentado la base para una nueva revolución en el mundo conocida como: nanotecnología. Debido a la importancia que puede tener su aplicación en el diseño de nuevos dispositivos electrónicos, en las últimas dos décadas se han publicado un gran número de trabajos de investigación sobre nanoestructuras. Para hacernos una idea cabal de los nuevos conceptos que emergen hoy en esta área de la física precisamos situar la perspectiva histórica. Solo así parece posible apreciar el sentido de los espectaculares avances que hoy vive la ciencia y la gran importancia que tiene el estudio de sistemas cuánticos de pocas partículas.

Desde el muy recordado 29 de diciembre de 1959, cuando el premio Nóbel de Física Richard. Feynman expreso: "¡Hay muchísimo espacio al fondo! " (¡There is plenty of room at the bottom!) en su ya clásica conferencia en el congreso anual de la American Physical Society, se ha venido dando una gran revolución en un sin número de campos de la ciencia. El fondo al que se refería Feynman era el de las fronteras de la física, el mundo que existe a escala molecular, atómica y subatómica. El fondo último de un material es el nivel atómico, y esta frase se ha convertido en el emblema para muchos físicos cuya investigación consiste en diseñar y construir sistemas en lo que se ha denominado la escala nanométrica. La gran atención que la comunidad

científica ha puesto sobre el mundo mesoscópico se debe a las fascinantes propiedades que se pueden obtener de la materia haciendo arreglos de átomos uno por uno de la forma que se quiera. La física del estado sólido ha sido una de las áreas más ampliamente desarrolladas alrededor de este interesante tema.

El desarrollo vertiginoso que se ha venido dando en las últimas dos décadas en el mundo mesoscópico gracias a los modernos avances en nanotecnología, ha permitido una sorprendente sofisticación en las técnicas empleadas para la fabricación de novedosos tipos de heteroestructuras de semiconductores. Dicho progreso ha hecho posible la fabricación de estructuras de dimensiones reducidas: pozos cuánticos, estructuras casi bidimensionales (tamaño nanométrico en una dimensión), hilos cuánticos, estructuras casi unidimensionales (tamaño nanométrico en dos dimensiones) y la situación extrema, estructuras de dimensión casi cero (tamaño nanométrico en las tres dimensiones) llamadas puntos cuánticos (QD's).

Esencialmente, los QD's son pequeñas islas de un material semiconductor (por ejemplo, GaAs) formadas dentro de un bloque de otro material semiconductor, (por ejemplo, $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) con una mayor brecha entre las bandas de valencia y de conducción. Dentro de los QD's pueden habitar uno o varias portadoras de carga (electrones y/o huecos) cuyo movimiento es confinado por un salto de potencial debido a la diferencia que existe entre las brechas de energía en la juntura. Los QD's semiconductores con dimensiones entre 1 y 100 nm y que comprenden entre 2 y 200 núcleos atómicos de una red cristalina en cada dirección, son frecuentemente descritos como átomos artificiales o átomos de estado sólido. Al igual que los átomos naturales, estos pequeños sistemas electrónicos pueden contener solo unos cuantos electrones y tienen un espectro discreto de niveles de energía, lo cual está en contraste con los sistemas semiconductores en bloque. Un electrón en un punto cuántico puede ser descrito por una función de onda cuántica que es similar a la usada para un electrón en un átomo, aunque su energía se extienda coherentemente sobre la red de núcleos atómicos, además dicha función de onda es frecuentemente designada con la misma notación atómica (por ejemplo, niveles de energía S y P). Se debe tener en cuenta que los QD's cuánticos son nanoestructuras de estado sólido, y a diferencia de los sistemas atómicos, estos pueden presentar diversas formas: disco, anillo, lente o pirámide, etc.

A primera vista, el problema de uno o dos electrones en un QD no debiera ser más complicado que el problema análogo para los sistemas atómicos del hidrogeno y del helio. No obstante, la realidad es otra, debido a que el confinamiento en los QD's es mucho más débil que en los átomos naturales, y entonces, los efectos de correlación sobre el espectro electrónico en los QD's son mucho más fuertes, de tal manera que los métodos

usados en la teoría de átomos con uno o dos electrones son poco útiles para puntos cuánticos. Además se debe tener en cuenta el efecto del confinamiento cuántico relacionado con la reducción de la dimensión, lo cual afecta profundamente los niveles de los electrones, aumentando o reduciendo en gran medida la magnitud de sus interacciones de cada uno con los otros, con el medio que los rodea y con campos externos [5].

Los sistemas de dos electrones confinados en un QD presentan una analogía con el caso especial del ión del átomo de hidrógeno negativamente cargado, H^- , donde el potencial de confinamiento es mucho más débil que en otros átomos. Como fue establecido en los primeros años del desarrollo de la mecánica cuántica, la mayoría de los métodos que funcionaban bien para el átomo de helio no servían para el H^- . Este sistema por ser uno de los sistemas cuánticos más simples en el cual el efecto del confinamiento y la correlación juega un papel muy importante puede considerarse como modelo de prueba para verificar la eficiencia y la exactitud de los diferentes métodos de la teoría cuántica de pocas partículas. Los QD's con diferentes potenciales de confinamiento, cuya forma puede variarse según las condiciones de su fabricación, al captar uno o dos electrones llegan a ser los análogos artificiales del átomo de hidrógeno o del átomo de helio respectivamente. Como los QD's auto-ensamblados tienen un tamaño en la dirección transversal mucho menor que en la dirección lateral, el potencial de confinamiento en estos sistemas es casi-bidimensional y por eso pueden considerarse como átomos artificiales de hidrógeno o de helio casi-bidimensionales. Los QD's con uno o dos electrones que tienen las formas de un cilindro con un radio muy pequeño o un anillo delgado pueden considerarse como análogos de los átomos de hidrogeno y de helio casi-unidimensionales.

El estudio teórico ha mostrado la importancia que tiene el efecto de la interacción electrón-electrón en sistemas de dimensionalidad reducida. Recientemente se ha realizado el cálculo de los niveles energéticos de sistema de dos electrones confinados en QD's utilizando diferentes técnicas, entre los cuales cabe mencionar: los métodos de diagonalización de matrices [6], variacional [7-8], escalamiento dimensional [9], Monte Carlo [10] y dimensión fractal [11-14]. Por ejemplo, en el trabajo de Zhu y coinvestigadores [6], se calcularon los niveles de energía de una D^0 y una D^- confinadas en un pozo cuántico; en el trabajo de Sandler y colaboradores [7], se realizó un calculo variacional de los estados base de una D^- en dos dimensiones usando funciones de prueba tipo Chandrasekhar; y en el trabajo de Marín y colaboradores [8], se estudian sistemas atómicos de uno y dos electrones confinados por cajas penetrables esféricas. El método de Monte Carlo se aplicó por Pang y

coinvestigadores [10] para analizar el problema de una D^- en un campo magnético en semiconductores y pozos cuánticos.

El método de dimensión fractal elaborado por el grupo de Física Computacional de Materia Condensada de la UIS [11-14] también ha sido utilizado para analizar sistemas con dos electrones fuertemente correlacionados. Recientemente el método de diagonalización de matrices [15] se aplicó en el trabajo de Xie en el cual se encuentra el espectro de energía del segundo estado ligado para una D^- en un punto cuántico; y también en el trabajo de Ruan y coinvestigadores [16] donde la ecuación de Schrödinger para una D^- en dos dimensiones es resuelta utilizando este método. Para resolver este mismo problema Busser y colaboradores [17] hace poco aplicaron el método escalamiento dimensional. La solución exacta para el problema de dos electrones confinados en puntos cuánticos con potencial parabólico fue encontrada por, Zhu con coinvestigadores [18] y Mikhailov y colaboradores [19].

Como se ha podido observar, el problema de uno y dos electrones en un campo central tiene un gran interés en la actualidad. Además dicho problema es aún un problema abierto al cual se pueden hacer grandes aportes, a pesar de haberse publicado un buen número de trabajos sobre el tema. En este contexto, se puede argumentar que existe un sector importante en física de semiconductores que implica un estudio de sistemas de uno y dos electrones confinados en campos centrales cuyos potenciales son esencialmente mas débiles en comparación de los potenciales de sistemas atómicos y donde por esta razón el efecto de la correlación electrónica tiene una gran importancia. Los puntos se pueden fabricar con diferentes geometrías en una forma controlada y de esta forma artificialmente diseñar los diferentes potenciales de campos centrales para cambiar sus propiedades opto-electrónicas, pero esto implica un gran esfuerzo por parte de investigadores teóricos y experimentales. La naturaleza nos ha dado átomos, los científicos pueden hacer puntos cuánticos. Los futuros avances en este excitante campo de la ciencia y la tecnología dependen fuertemente de la creatividad de físicos, químicos y especialistas en tecnología de nuevos materiales, quienes han hecho realidad estas pequeñas estructuras.

1. METODOS APROXIMADOS EN LA TEORIA DE UN ELECTRON

1.1. Generalidades

El sistema conformado por un electrón sometido a la acción de un campo central además de ser el sistema ligado más simple que se encuentra en la naturaleza, es el caso más importante. El átomo de hidrógeno, posee un gran valor en virtud de que desde el punto de vista histórico fue el primer sistema al que Schrödinger aplicó su teoría de la mecánica cuántica; lo cual constituyó la primera verificación de esta. Además, y por encima de su importancia intrínseca e histórica, la teoría de átomos con un solo electrón es de gran importancia práctica ya que ha constituido la base del tratamiento mecánico-cuántico de todos los átomos multielectrónicos, así como también de moléculas.

Los átomos de tipo hidrogenoide tienen sus análogos en la física del estado sólido; sistemas de dos partículas de carga opuesta como una donadora D^0 (sistema electrón-ión) o un excitón (sistema electrón-hueco) confinados en puntos cuánticos. Estos nuevos sistemas aunque no parecen más complicados que el caso del átomo de hidrógeno, presentan algunas diferencias importantes, como el tipo de potencial de confinamiento, el cual no es Coulombiano; además en el caso del excitón se tiene una gran diferencia debido a que las dos partículas (electrón y hueco) se encuentran en una danza perpetua, complicándose así el análisis del problema. Otra diferencia notoria es la variedad de formas que pueden presentar los puntos cuánticos. En la literatura se puede encontrar puntos cuánticos auto-ensamblados de forma piramidal, de disco, anillo o lente (ver Fig.1).

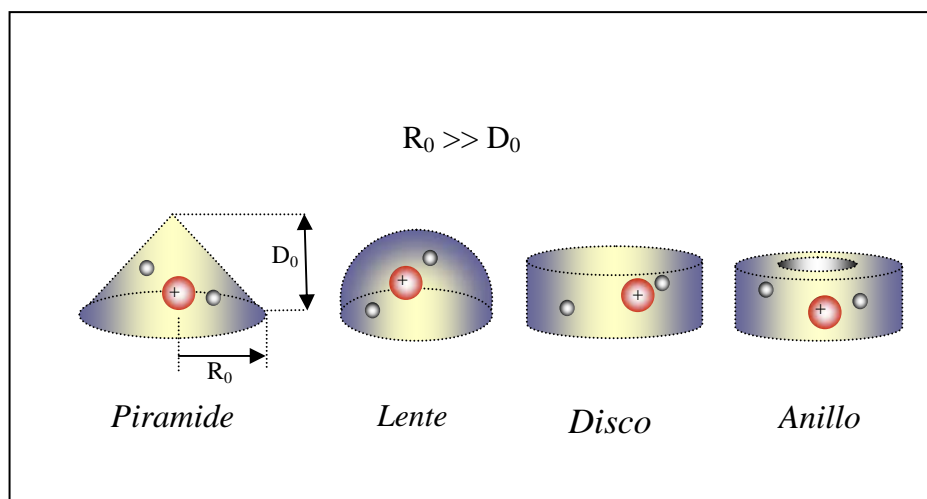


Fig. 1. Representación de diferentes formas de puntos cuánticos autoensamblados

El caso del excitón resulta ser un problema más complicado que el de la donadora D^0 . En el excitón el notorio movimiento del hueco es debido a que este no es mucho más pesado que el electrón (la masa del hueco, por ejemplo en GaAs es cuatro veces la del electrón), por lo tanto no permanece lo suficientemente quieto. Esta circunstancia junto con el hecho de que el espacio dentro de QD no es ni isotrópico ni homogéneo hace que la técnica de masa reducida usada en el caso atómico ya no sea aplicable para un excitón confinado en QD. Este es el motivo para revalorar las diferentes técnicas aproximadas para la solución de este tipo de problema mecánico-cuántico.

Varios autores han hecho estudios sobre excitones en diferentes tipos de heteroestructuras, tales como pozos cuánticos (QW), hilos cuánticos (QWW), y puntos cuánticos (QD) utilizando el método variacional. Entre estos cabe mencionar los trabajos de Bajaj y coinvestigadores [20], en el cual calculan utilizando el método variacional los niveles de energía de enlace del estado base y de algunos pocos estados excitados del excitón como función del ancho del pozo cuántico para varios valores de la altura de la barrera potencial; los trabajos de Bastard [21] en los cuales se calcula la energía del estado base de un excitón en un pozo cuántico de barrera infinita en función del ancho del pozo utilizando el método variacional; el trabajo de Stébe [22] en el cual también calculan la energía del estado base de un excitón en un punto cuántico cilíndrico con potencial de barrera finita utilizando el método variacional. También se han realizado trabajos utilizando el método de diferencias finitas, dentro de los que cabe resaltar el trabajo de Peeters y colaboradores [23] donde se analiza la dependencia de la energía de un excitón en un disco cuántico con respecto a la variación de campos magnéticos externos.

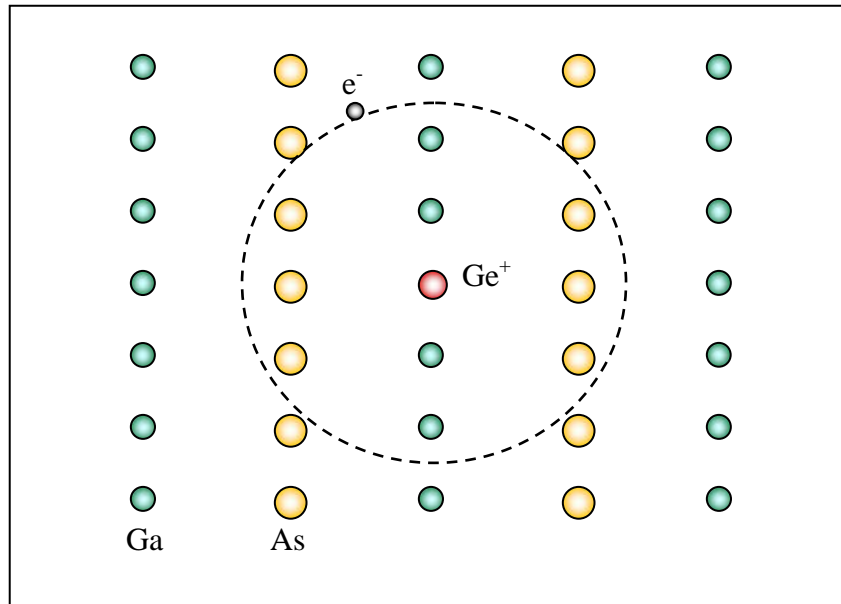


Fig. 2. Representación de una donadora D^0 en GaAs

El problema similar para la impureza donadora neutra es más sencillo que para el excitón. Cuando una impureza donadora neutra es introducida en un cristal, la periodicidad se destruye. Alrededor de la impureza el potencial periódico es perturbado por el de la impureza. Bajo ciertas condiciones el problema de los niveles

electrónicos asociados a la impureza puede ser reducido al problema de un átomo hidrogenoide en la aproximación de masa efectiva (AME). La interacción Coulombiana entre el electrón excesivo de la donadora y la carga positiva de la impureza hidrogenoide, es más débil que la del átomo de hidrógeno, debido al apantallamiento y por eso la donadora puede ser ionizada más fácilmente. El confinamiento produce la reducción de la dimensionalidad del espacio, hasta dos en QW, hasta uno en QWW y hasta cero en QD. El confinamiento de los portadores de carga en las heteroestructuras semiconductoras produce un cambio notorio en el espectro energético de las donadoras. En la teoría de escalamiento dimensional [4] se demuestra que los niveles de energía para el átomo de hidrógeno en un espacio de D dimensiones obedecen la siguiente relación:

$$E_n = -\frac{Ry}{\left[n + \left(\frac{D-3}{2}\right)\right]^2} \quad (1.1)$$

de donde obtenemos para el estado base ($n=1$) los siguientes valores de energía para los casos tridimensional, bidimensional y unidimensional:

$$E_1 = \begin{cases} -1 Ry, & D = 3 \\ -4 Ry, & D = 2 \\ -\infty Ry, & D = 1 \end{cases}$$

El problema de la variación de los niveles energéticos de una donadora con la reducción de la dimensión en la heteroestructura fue analizado, dentro del marco de la AME, por muchos autores. Bastard fue el pionero en aplicar la AME para el cálculo de la energía de enlace del estado base de un D^0 en un QW considerando el modelo de confinamiento con potencial rectangular infinito [24] y finito [25], usando el método variacional. Posteriormente se realizaron estudios de estados de impurezas en QW y se analizaron los efectos de campos externos sobre estos estados [26-28] considerando el modelo Bastard. El análisis de impurezas D^0 en puntos cuánticos esféricos (SQDs) se ha desarrollado utilizando entre otros métodos: Diferencias finitas [29], principio variacional de Schrödinger [30] y expansión en serie [31].

Recientemente para calcular la energía de enlace se desarrolló el método de Dimensión Fraccionaria [32-35], en el cual el espacio real anisotrópico se reemplaza por otro espacio efectivo, isotrópico y homogéneo con una dimensión reducida. En este método, la dimensión fraccionaria se considera como un parámetro de la teoría que depende de la altura de la barrera y del ancho del pozo, pero es la misma para toda la heteroestructura. El método permite en muchos casos encontrar la solución del problema en forma mucho más compacta que otros métodos. Sin embargo, como lo anotaron algunos autores [34], el método pierde su validez en condiciones cuando el confinamiento es muy fuerte. Además este método se hace menos exacto cuando el confinamiento es multilateral, como por ejemplo en QWW y QD donde el confinamiento es más fuerte que en QW y superredes.

En una situación real la función de onda de la D^0 en la heterojuntura semiconductoras sufre cambios significativos de acuerdo a la geometría de la heterojuntura, tamaño, forma del potencial de confinamiento y la

posición de la impureza dentro o fuera de ésta. Cuando se considera el modelo de confinamiento con altura de barrera infinita, se encuentra que la energía de enlace de una D^0 en un QW, aumenta cuatro veces con respecto a su valor en el bloque, cuando el ancho del pozo de potencial tiende a cero [36]. La gran diferencia de energía de enlace del átomo de hidrogeno tridimensional ($1Ry^*$) y el bidimensional ($4Ry^*$), es interpretado como una disminución en la dimensionalidad del espacio desde tres hasta dos, cuando el ancho del pozo tiende a cero. Además se ha encontrado que también existe un cambio en la dimensionalidad del espacio cuando varía la posición de la impureza en la heterojuntura [37], por esta razón en una teoría rigurosa debe incluirse la dimensionalidad del espacio, no “en promedio” como lo hace el método de dimensión fraccionaria [34], sino como un parámetro que depende del ancho, altura del pozo, y de la posición de la impureza en la heterojuntura.

El método de Dimensión Fractal (MDF) implementado por nuestro grupo [37], ha extendido el método de dimensión fraccionaria eliminándole las limitaciones. En el se demuestra que la dimensión del espacio depende de la separación entre las partículas y sus posiciones dentro de la heteroestructura. En esta teoría, dentro del marco de la aproximación de masa efectiva, tanto las características del espacio efectivo, como las ecuaciones diferenciales, para los sistemas de pocas partículas en un espacio con dimensión reducida, se deducen a partir del principio variacional de Schrödinger. A diferencia con otras teorías este método sin ninguna modificación se puede aplicar para heteroestructuras con una configuración arbitraria e incluir efectos relacionados con diferentes formas de potencial de confinamiento, variación de los parámetros del material, no-parabolicidad de la banda de conducción, etc.

Como se ha podido ver, existe una amplia bibliografía sobre el tema. Resumiendo todas las publicaciones anteriores se puede decir que el problema de una donadora neutra se reduce en la AME al problema similar de una partícula en un campo central con un potencial de confinamiento adicional.

1.2 Modelo matemático

Cuando una impureza es introducida en un cristal, la periodicidad del cristal es destruida y el potencial de la impureza modifica el potencial del cristal en ese punto de la red. Mientras esto suceda, el cálculo de la interacción Coulombiana entre el electrón y el ión donador es muy complicado, pues depende de las interacciones de muchos cuerpos: los electrones de la impureza y los electrones del cristal.

Una manera simple de evitar este problema es asumir que la carga positiva del ión donador esta apantallada por la función dieléctrica ϵ del cristal en el cual se encuentra la impureza. En este caso la ecuación de Schrödinger de la donadora esta dado por:

$$(H_0 + U) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}) \quad (1.2)$$

Donde H_0 es el Hamiltoniano de un electrón en el cristal perfecto, U es la energía potencial de interacción entre el electrón y el ion apantallado, dada por:

$$U = -1/V_s \quad (1.3)$$

con $V_s = +1/\epsilon_0 \epsilon_r$ que es una aproximación del potencial de Coulomb del donador, donde ϵ_0 es la constante dieléctrica estática del cristal y $\psi(r)$ es la función de onda del electrón donador.

Para resolver (1.2) podemos utilizar la aproximación de masa efectiva, con la cual el problema original de un electrón moviéndose en presencia del potencial atómico y de los otros potenciales se reduce al problema de un electrón con una masa efectiva m^* (que depende de parámetros conocidos de la estructura de banda del cristal) moviéndose en la presencia del potencial periódico del cristal y los campos externos aplicados al sistema.

De este modo la ecuación de Schrödinger para una impureza donadora neutra en una heteroestructura semiconductor está dada por la expresión:

$$\left[\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + V(r) - W(r) = E \right] \psi(r) \quad (1.4)$$

donde $V(r)$ es el potencial de confinamiento.

Los estados ligados de los electrones en una impureza en un semiconductor masivo pueden tratarse de manera simplificada mediante la aproximación de masa efectiva, el problema es análogo al del átomo de hidrógeno, pero reemplazando la masa del electrón libre y la constante dieléctrica del vacío por la masa efectiva del electrón y la constante dieléctrica del semiconductor, respectivamente. En el estado fundamental la función envolvente es una exponencial decreciente con simetría esférica, cuyo radio efectivo de Bohr es:

$$a^* = 0.53 \frac{m_0}{m^*} \text{ \AA} \quad (1.5a)$$

por ejemplo, en el GaAs el valor de la constante dieléctrica es $\epsilon = 12.85$ y la masa efectiva del electrón en la banda de conducción es $m^* = 0.067m_0$, por lo que resulta $a^* \sim 100 \text{ \AA}$. La energía de ligadura del electrón en ese estado fundamental es el Rydberg efectivo,

$$Ry^* = \frac{136700 m^*}{\epsilon^2} \text{ meV} \quad (1.5b)$$

que en el caso del GaAs resulta ser de unos 5.83 meV.

Una de las ventajas del compuesto GaAs es que su estructura de bandas es aproximadamente parabólica, entonces su masa efectiva m^* , es aproximadamente isotrópica e independiente de la energía. El uso de las unidades efectivas tiene sus ventajas, pues permiten liberar al Hamiltoniano de todo tipo de constantes. De esta manera se tiene un Hamiltoniano completamente adimensional, permitiendo que los resultados teóricos que se obtengan se puedan utilizar en una gran variedad de situaciones.

Dentro de los posibles sistemas de un electrón en un campo central existentes tenemos como casos que son de nuestro interés los sistemas atómicos tipo hidrogenoide, y los sistemas análogos en la física del estado sólido dentro de los que podemos destacar una donadora neutra en bloque, una donadora neutra confinada en un QD, y un electrón confinado en un QD. A continuación se obtendrá el modelo matemático para cada uno de los sistemas mencionados anteriormente.

Considerando en primer término el caso de los sistemas en física del estado sólido. Se parte de la siguiente ecuación de Schrödinger tipo hidrogenoide en unidades efectivas (1.5):

$$(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + U)w(r) = Ew(r) \quad (1.6a)$$

$$(1.6b)$$

$$U = -\frac{qV_0}{r} + j_3 V(r)$$

donde U representa el potencial efectivo, el cual está conformado por la interacción Coulombiana, junto con el efecto del confinamiento $V(r)$, para el caso en que se tenga el sistema en un QD. Dependiendo del valor de los parámetros j_3 y qV_0 en (1.6b) podemos modelar los siguientes sistemas:

de los

- $j_3 = 1; qV_0 = 0$ ~ Do en bloque
- $j_3 = 1; qV_0 = 1$ ~ DO en QD
- $j_3 = 0; qV_0 = 1$ ~ 1 electrón en QD

Ahora para obtener el modelo matemático para sistemas atómicos se considerará la última ecuación (1.6a), pero con la clara diferencia, que se deben tomar como unidades efectivas el radio de Bohr del átomo de hidrógeno, para los radios, y el Rydberg, para la energía:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m^* e^2}; Ry = \frac{m^* e^4}{2\hbar^2} \quad (1.7)$$

Además se debe establecer como valores para los parámetros del potencial (1.6b): $j_3 = 0$ y $qV_0 = 1, 2, 3, \dots$; con

lo cual se obtiene entonces el modelo matemático para un átomo tipo hidrogenoide con carga nuclear Z . Se tomará el átomo de hidrógeno ($Z = 1$), en tres dimensiones, como caso particular para realizar el análisis del método de diferencias finitas desde diferentes enfoques. Se ha escogido este sistema debido a que se conoce su solución exacta, lo cual permite controlar la precisión del método de solución empleado.

1.3 Método de diferencias finitas

Uno de los problemas más importantes dentro del área de las matemáticas conocida como problemas de contorno para ecuaciones en derivadas parciales, es el relacionado con la solución de la ecuación de Schrödinger. Este tipo de problemas en su gran mayoría se pueden resolver solamente utilizando métodos numéricos. El método universal de resolución aproximada de las ecuaciones diferenciales, que se aplica en una amplia clase de ecuaciones de la física matemática, es el de diferencias finitas. El método de diferencias finitas consiste en lo siguiente. La región de variación continua de los argumentos (por ejemplo x, t) se sustituye por un conjunto

finito (discreto) de puntos (nodos), llamado malla; en lugar de las funciones de argumento continuo, se consideran las de argumento discreto, definidas en los nodos de la malla y llamadas funciones de malla. Las derivadas que aparecen en la ecuación diferencial se sustituyen (se aproximan) mediante las formulas de interpolación que involucran combinaciones lineales de valores de la función de malla en varios nodos de la red. De esta manera, la ecuación diferencial se sustituye por un sistema de ecuaciones algebraicas (ecuación en diferencias). Las condiciones iniciales y de frontera también se expresan en los términos diferencias finitas a través de los valores de la función incógnita en los nodos de la malla.

1.3.1. Malla equidistante

Supongamos que la región de variación del argumento x es el segmento $0 \leq x \leq l$. Si dividimos este segmento, mediante los nodos $x_i = (i-1)h$, para $i = 1, 2, \dots, N; h > 0$, en $N-1$ partes iguales de longitud $h = \frac{l}{N-1}$ cada una, tendremos lo que se denomina una malla equidistante. El conjunto de nodos x_i se llama malla de diferencias y el valor h recibe el nombre de paso de la malla. La función $y_i = y(x_i)$, de argumento discreto x_i , $i = 1, 2, \dots, N$, se llama función de malla. A cualquier función continua $f(x)$ se le puede poner en correspondencia la función de malla f_i .

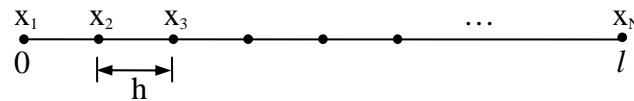


Fig. 3. Ilustración de los nodos de una malla equidistante

En una derivada de orden p , para que esta no sea igual a cero, la fórmula de interpolación debe como mínimo ser un polinomio de orden p y por eso el mínimo número de datos necesario para obtener una aproximación por diferencias es $p+1$. Por ejemplo, una aproximación por diferencias para la primera derivada de una función necesita al menos dos puntos, la segunda tres, etc.

Por ejemplo, la primera derivada en el nodo número i se calcula como [37]:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + O(h^2) \quad (1.8)$$

donde $O(h^2) \approx -\frac{1}{6}h^2 f'''_i$ es el error por truncamiento, el cual es aproximadamente proporcional al cuadrado del paso h de la malla y a la tercera derivada f''' .

La formula de interpolación para la segunda derivada [37]

$$f''_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (1.9)$$

la ecuación se llama aproximación por diferencias centrales de f'' y el error por truncamiento se representa

$$\text{como } O(h^2) = -\frac{1}{12}h^2 f_i^{(4)}.$$

De igual manera existen aproximaciones por diferencias para las derivadas de orden superior.

1.3.1.1 Aplicación al cálculo de los niveles energéticos del átomo de hidrógeno

Se aplicará el método de diferencias finitas con malla equidistante para encontrar el espectro de la energía del átomo de hidrogeno. Partiendo de la ecuación de Schrödinger adimensional para la parte radial de la función de onda de un sistema de un electrón bajo la acción de un potencial de campo central tenemos:

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{df}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} f + U(r)f = Ef \quad ; 0 < r < \infty \quad (1.10)$$

donde las distancias y las energías están dadas en unidades atómicas, es decir en radios de Bohr y Rydberg respectivamente. La función de onda $f(r)$ para la ecuación (1.10) debe cumplir las dos condiciones siguientes:

$$f(0) < \infty ; f(r) \rightarrow 0 \text{ para } r \rightarrow \infty$$

que en adelante se pueden tratar como dos condiciones de frontera en los puntos $r=0$ y $r = r_{\max}$. El potencial de campo central en nuestro caso esta dado por el potencial de Coulomb

$$U(r) = -\frac{2}{r} \quad (1.11)$$

el cual satisface las siguientes condiciones:

$$U(r) < 0 ; U(r) \rightarrow 0 \text{ para } r \rightarrow \infty$$

El espectro energético discreto del átomo corresponde a las energías negativas, $E < 0$.

El problema del átomo de hidrogeno se planteara desde dos esquemas diferentes para ver como la forma de la ecuación a resolver afecta los resultados.

Primer esquema.

Se solucionara el problema para los estados S (S-state), por lo que se tiene que $l = 0$, por eso la ecuación de Schrödinger adimensional para el átomo de hidrógeno en estos estados puede describirse en la siguiente forma:

$$f'' + \frac{2}{r} f' + (E - U)f = 0 ; 0 < r < \infty \quad (1.12)$$

Para hallar las condiciones de frontera, primero consideremos el caso límite cuando $r \rightarrow 0$. La ecuación (1.12)

con el potencial Coulombiano en este caso se reduce a $\frac{2}{r} f' + \frac{2}{r} f = 0$, de donde se obtiene:

$$\frac{f'(0)}{f(0)} = -1; \quad f'(0) = -f(0) \quad (1.13)$$

En el otro extremo cuando $r \rightarrow \infty$ la ecuación (1.12) toma la siguiente forma asintótica: $f'' + Ef = 0$, para la cual se tiene que la solución con un comportamiento en el infinito adecuado tendrá la forma $f \rightarrow \exp(-r\sqrt{-E})$, de donde tenemos: $\lim_{r \rightarrow \infty} \frac{f'(r)}{f(r)} \rightarrow -\sqrt{-E}$. Esta última condición para fines computacionales la sustituimos por la

siguiente:

$$\frac{f'(r_{\max})}{f(r_{\max})} \rightarrow -\sqrt{-E} \quad ; \quad (1.14)$$

donde r_{\max} se escoge lo suficientemente grande, dependiendo del número de niveles a calcular.

Para resolver la ecuación (1.12) dentro del el intervalo $r \in [0, r_{\max}]$ con las dos condiciones de frontera (1.13) y

(1.14) dividiremos este intervalo en $N-1$ subintervalos de ancho $h = \frac{r_{\max}}{N-1}$ cada uno, con lo cual se obtiene la

malla con sus respectivos nodos $r_i = h(i-1)$, $i = 1, 2, \dots, N$.

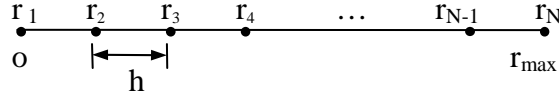


Fig. 4. Ilustración de los nodos de la malla para átomo de hidrógeno

Ahora utilizando las denotaciones para la función de onda, su primera y segunda derivada en los nodos de la malla

$$f(r_i) = f_i; \quad f'(r_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}; \quad f''(r_i) = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} \quad (1.15)$$

y para el potencial

$$U(r_i) = U_i \quad (1.16)$$

podemos transformar la ecuación diferencial (1.12) al siguiente sistema de ecuaciones en diferencias finitas:

$$\left(1 + \frac{h}{r_i}\right) f_{i+1} - 2 \left[1 - \frac{h^2}{2}(E - U_i)\right] f_i + \left(1 - \frac{h}{r_i}\right) f_{i-1} = 0; \quad i = 2, 3, \dots, N-1 \quad (1.17)$$

el cual puede ser escrito en forma mas compacta:

$$a_i f_{i+1} + b_i f_i + c_i f_{i-1} = 0; \quad a_i = 1 + \frac{h}{r_i}; \quad b_i = -2 \left[1 - \frac{h^2}{2}(E - U_i)\right]; \quad c_i = 1 - \frac{h}{r_i}; \quad i = 2, 3, \dots, N-1 \quad (1.18)$$

El sistema de ecuaciones (1.18) es incompleto, para N incógnitas solo hay $N-2$ ecuaciones, faltan otras dos ecuaciones. Estas dos ecuaciones se pueden obtener partiendo de las dos condiciones de frontera (1.13) y (1.14). La condición de frontera (1.13) puede escribirse en forma de una ecuación de diferencias finitas como $(f_2 - f_1)/h = -f_1$. Esta última ecuación tiene la misma forma que las ecuaciones (1.18) si se supone que $a_1 = 1$; $b_1 = -1 + h$; $c_1 = 0$. De la misma manera la condición de frontera (1.14) en diferencias finitas tiene la

forma $(f_N - f_{N-1})/h f_N = -\sqrt{-E}$ que es similar a las ecuaciones (1.18) si se supone que $a_N = 0$; $b_N = 1 + h\sqrt{-E}$; $c_N = -1$.

Las ecuaciones algebraicas (1.18) pueden ser escritas en una forma aún más compacta utilizando la denotación matricial:

$$\hat{D}\vec{f} = 0 \quad (1.19)$$

donde \vec{f} y \hat{D} son un vector columna y una matriz tridiagonal respectivamente, con orden N , cuyos elementos matriciales son:

$$\vec{f} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \dots \\ f_N \end{bmatrix}; \quad \hat{D} = \begin{bmatrix} b_1 & a_1 & 0 & 0 \dots & 0 \\ c_2 & b_2 & a_2 & 0 \dots & 0 \\ 0 & c_3 & b_3 & a_3 & \dots & 0 \\ & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 \dots & c_N & b_N \end{bmatrix}; \quad \begin{aligned} a_i &= 1 + \frac{h}{r_i}; \quad i = 2, 3, \dots, N-1; \quad a_1 = 1; \quad a_N = 0; \\ b_i &= -2 \left[1 - \frac{h^2}{2} (E - U_i) \right]; \quad b_1 = -1 + h; \quad b_N = 1 + h\sqrt{-E}; \\ c_i &= 1 - \frac{h}{r_i}; \quad i = 2, 3, \dots, N-1; \quad c_1 = 0; \quad c_N = -1 \end{aligned} \quad (1.20)$$

Para que el sistema de ecuaciones (1.19) tenga una solución no trivial es condición necesaria y suficiente que el determinante de la matriz tridiagonal \hat{D} de tamaño $N \times N$ definida en las formulas (1.20) sea igual a cero:

$$\det(\hat{D}) = \Delta_N(E) = 0 \quad (1.21)$$

Se puede demostrar que la ecuación algebraica (1.21) a través de algunas transformaciones lineales se reduce a un problema de valores propios de una matriz tridiagonal simétrica de elementos reales, lo cual implica que sus valores propios son reales.

Para encontrar las raíces de la ecuación algebraica (1.21) es necesario elaborar un algoritmo que en una forma muy rápida y eficiente calcule el determinante de la matriz (1.20) en función de la energía E . Con este fin se utilizaran los siguientes dos teoremas en nuestros cálculos:

Teorema 1. La secuencia de los determinantes Δ_i que se obtienen al eliminar en el determinante Δ_N todas las filas y columnas a partir de la $i+1$, satisface el siguiente sistema de relaciones de recurrencias:

$$\Delta_i(E) = b_i \Delta_{i-1}(E) - c_i a_{i-1} \Delta_{i-2}(E); \quad i = 3, 4, \dots, N; \quad \Delta_1(E) = b_1; \quad \Delta_2(E) = b_1 b_2 - c_2 a_1 \quad (1.22)$$

Teorema 2. El número de veces que cambia el signo en la secuencia $\Delta_1(E), \Delta_2(E), \dots, \Delta_N(E)$ es igual al número de las raíces de la ecuación (1.21) menores que E .

Estos dos teoremas pueden ser utilizados para elaborar un algoritmo que permite localizar todas las raíces de la ecuación (1.21). Con este fin se puede definir una función $N(E)$ igual al número de las raíces de la ecuación (1.21) menores que E . Utilizando los teoremas 1 y 2 se puede calcular los valores de esta función en los puntos E_i , $i = 1, 2, 3, \dots$ sobre una malla de las energías. Entonces las raíces de la ecuación (1.21) están ubicadas dentro de los intervalos, $E_k < E < E_{k+1}$ si se cumple la condición

$$N(E_{k+1}) - N(E_k) = 1 \quad (1.23)$$

Para hacer una búsqueda sistemática de todos las raíces de la ecuación (1.21) utilizando las relaciones (1.22) y (1.23) es esencial saber la franja de los valores de la energía donde hay que realizar la búsqueda. Si estamos trabajando hasta encontrar la secuencia completa de valores propios, una suposición natural para el siguiente valor más alto es alguna distancia superior a la del valor propio apenas encontrado. Con este fin se puede utilizar el siguiente teorema de Gerschgorin:

Teorema 3. Para una matriz tridiagonal el conjunto completo de valores propios estará acotado por la frontera inferior:

$$\min_i \left\{ D_{i,i} - \sum_{j \neq i} |D_{i,j}| \right\} \leq E_k \leq \max_i \left\{ D_{i,i} + \sum_{j \neq i} |D_{i,j}| \right\} \quad (1.24)$$

La frontera inferior de (1.24) es un lugar conveniente para comenzar una búsqueda del valor propio más bajo, y la diferencia entre las fronteras superior e inferior junto con el conocimiento del número total de raíces da una idea del espaciamiento promedio entre los valores propios.

Segundo esquema.

Una forma alterna de plantear el problema del átomo de hidrogeno en el marco de diferencias finitas es como sigue. Partiendo de la ecuación (1.10) se realiza el siguiente cambio de variable:

$$f = \frac{u}{r}; \quad f' = \frac{u'}{r} - \frac{u}{r^2}; \quad f'' = \frac{u''}{r} - \frac{2u'}{r^2} + \frac{2u}{r^3} \quad (1.25)$$

Transformase la ecuación (1.10) en la forma:

$$u'' + \left[\frac{2z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = -Eu \quad (1.26)$$

Con condiciones de frontera: $u(0) = 0$; $u(\infty) = 0$

Al transformar (1.26) al esquema de diferencias se obtiene:

$$u_{i+1} + \left[h^2 \left(\frac{2z}{r_i} - \frac{l(l+1)}{r_i^2} \right) - 2 \right] u_i + u_{i-1} = -\lambda u_i; \quad r_i = ih = 1, 2, \dots, N \quad ; E = -\frac{\lambda}{h^2} \quad (1.26)$$

donde los elementos de las tres diagonales que conforman la matriz tridiagonal de coeficientes para el lado derecho del sistema (1.26) serán:

$$a_i = 1; \quad b_i = \frac{[2zhi - l(l+1)]}{i^2} - 2; \quad c_i = 1; \quad \text{para } i = 1, 2, \dots, n \quad (1.27)$$

Este nuevo planteamiento del problema presenta a simple vista ventajas con respecto al anterior. En primer lugar la matriz tridiagonal que aparece es simétrica, además los elementos de las diagonales secundarias son todos unos, lo cual reducirá el numero de cálculos computacionales.

Al realizar el cálculo computacional para los primeros niveles del átomo de hidrógeno, utilizando (1.20) como primer esquema y (1.27) como segundo esquema, se obtuvo los resultados que se muestran a continuación:

Nivel N	Cálculo Numérico				Cálculo Analítico
	Primer Esquema		Segundo Esquema		E_{n_exact}
	E_{n1}	$E_{n1} - E_{n_exact}$	E_{n2}	$E_{n2} - E_{n_exact}$	
1	-0,990218	0,009782	-0,999775	0,000225	-1,000000
2	-0,249998	0,000002	-0,249998	0,000002	-0,250000
3	-0,111110	0,000001	-0,111110	0,000001	-0,111111
4	-0,624999	0,000001	-0,624999	0,000001	-0,625000
5	-0,399928	0,000072	-0,399992	0,000077	-0,400000
6	-0,270954	0,006823	-0,277077	0,000700	-0,277777

Tabla. 1 Resultados del método de diferencias finitas con malla equidistante para los niveles S del átomo de hidrógeno para dos esquemas diferentes, todos los valores están dados en Ry.

Para este cálculo se utilizó una malla con 10000 nodos, y se tomó como la frontera superior $r_{\max} = 100$. De la tabla 1 se puede observar que los resultados obtenidos numéricamente están en buena concordancia con los obtenidos en forma analítica. Se observa que los resultados numéricos obtenidos con el segundo esquema son ligeramente mejores que para el primero, para algunos niveles (primero y último), manteniéndose prácticamente iguales en los demás niveles. Otro hecho que se debe resaltar es que para el primer esquema fue necesaria una cantidad de tiempo de cálculo considerablemente mayor que para el segundo. Las dos ventajas anteriores del segundo esquema sobre el primero fueron suficientes para tomar la determinación de continuar trabajando en lo que sigue del capítulo con el segundo esquema.

A continuación se presentan los resultados obtenidos para el segundo esquema probando con diferentes pasos para la malla:

Nivel n	$E_{\text{método}}$			E_{exacto}
	$h = 0.1$	$h = 0.05$	$h = 0.01$	
1	-0,99751	-0,99937	-0,99977	-1,00000
2	-0,24984	-0,24996	-0,24999	-0,25000
3	-0,11108	-0,11110	-0,11111	-0,11111
4	-0,62490	-0,62497	-0,62499	-0,62500
5	-0,39995	-0,39998	-0,39999	-0,40000
6	-0,27735	-0,27736	-0,27707	-0,27777

Tabla. 2 Resultados del método de diferencias finitas con malla equidistante para diferentes pasos.

El parámetro $r_{\max} = 100$ se mantuvo fijo en los tres casos. Todos los valores están dados en Ry

De la tabla 2 se observa una mayor precisión en los resultados a medida que se reduce el paso de la malla como era de esperarse. Es de aclarar que en estos resultados no se llega a notar el efecto de errores por redondeo cuando se reduce el paso, debido a que en los cálculos se utilizó un formato de doble precisión (16 cifras significativas), y el orden de la matriz (10000), para el paso más pequeño, no es lo suficientemente grande para que el número de operaciones produzca un error superior al introducido implícitamente por el método.

De las tablas anteriores se puede observar que existe una buena concordancia entre los resultados obtenidos en forma aproximada mediante el método de diferencias finitas y los resultados de la solución analítica; sin embargo, durante la realización de los cálculos anteriores se encontraron algunas deficiencias al usar el método de diferencias finitas para solucionar la ecuación de Schrödinger. Dentro de las deficiencias encontradas tenemos: la notable dependencia que presenta la exactitud de los resultados al variarse la condición de frontera en el infinito (r_{\max}); al revisar los resultados obtenidos por el método se encuentran algunos valores que no son solución del problema real analizado; el método presenta un error implícito de orden dos, debido al truncamiento hecho sobre las expresiones en diferencias para la primera y la segunda derivada; también se puede notar una dependencia de los resultados con respecto a la forma que tome la ecuación de Schrödinger después de realizar el cambio de variable y además el hecho de que la malla sea equidistante puede reducir la exactitud de los resultados. Con el ánimo de superar algunas de estas deficiencias se plantean a continuación algunas variantes dentro del marco de diferencias finitas tales como: la utilización de una malla no equidistante y el algoritmo de Numerov.

1.3.2. Malla no equidistante

El error del método de diferencias finitas depende fuertemente del valor del paso h , cuanto menor es el paso mayor es el error del método. Pero por otro lado disminuyendo demasiado el paso se aumenta el orden de la matriz notablemente y de esta manera aumenta el número de operaciones para encontrar las raíces. El aumento del número de operaciones produce automáticamente el aumento de los errores por redondeo. De esta manera existe un límite para la precisión del método debido a la necesidad que surge de buscar un compromiso entre la disminución del error del método y del aumento del error por redondeo. Siempre existe un valor óptimo del paso para lograr la mejor precisión en el marco del esquema de discretización escogida. Aquí aparece una pregunta natural ¿se puede aumentar la precisión del método al escoger una malla no equidistante? La respuesta a esta pregunta se puede dar solo haciendo algunas simulaciones numéricas. Intuitivamente parece que las mallas no-equidistantes deben dar mejor precisión en dos casos, cuando las coordenadas son curvilíneas (por ejemplo polares, esféricas, elípticas, etc.) y cuando los coeficientes de la ecuación sufren cambios bruscos en el espacio [39].

Para elaborar un algoritmo de solución de la ecuación de Schrödinger, utilizando una malla no equidistante, denotamos la longitud del intervalo de x_{i-1} a x_i por h_{i-1} ; y para el intervalo siguiente, de x_i a x_{i+1} tendremos una longitud h_i .

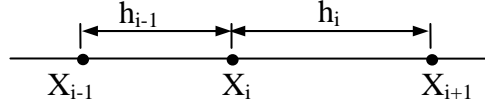


Fig. 5. Ilustración de los nodos de una malla no equidistante

Realizando el desarrollo en series de Taylor de las funciones $f_{i+1} = f(x_i + h_i)$ y $f_{i-1} = f(x_i - h_{i-1})$ alrededor del punto x_i hasta los términos de segundo orden, tenemos:

$$f_{i+1} = f_i + f_i' h_i + \frac{1}{2} f_i'' h_i^2 + O(h_i^3), \quad f_{i-1} = f_i - f_i' h_{i-1} + \frac{1}{2} f_i'' h_{i-1}^2 - O(h_{i-1}^3) \quad (1.28)$$

Estas dos igualdades pueden ser consideradas como un sistema de dos ecuaciones respecto de las dos incógnitas, f_i' y f_i'' , las primera y segunda derivadas de la función en el punto x_i . Despejando estas ecuaciones se encuentran las formulas para f_i' y f_i''

$$f_i' = \frac{h_{i-1}^2 f_{i+1} + (h_i^2 - h_{i-1}^2) f_i - h_i^2 f_{i-1}}{h_i h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} + O(h^2), \quad f_i'' = \frac{2[h_{i-1} f_{i+1} - (h_{i-1} + h_i) f_i + h_i f_{i-1}]}{h_i h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} + O(h^2) \quad (1.29)$$

A continuación se plantea el método de diferencias finitas con una malla no equidistante para el problema del átomo de hidrógeno, como una alternativa para mejorar los resultados obtenidos con la malla equidistante. En adelante al aplicar el método a la ecuación de Schrödinger para la parte radial del átomo de hidrógeno consideraremos que el paso de la malla al alejarse del origen crece en la forma de una progresión geométrica, es decir $h_i = h\alpha^i$. En este caso las formulas (1.29) se reducen a las siguientes:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} + (\alpha^2 - 1)f_i - \alpha^2 f_{i-1}}{h\alpha^i(1 + \alpha)} + O(h^2), \quad f_i'' = \frac{2[f_{i+1} - (1 + \alpha)f_i + \alpha f_{i-1}]}{h^2 \alpha^{2i-1}(1 + \alpha)} + O(h^2) \quad (1.30)$$

Sustituyendo la expresión para la segunda derivada obtenida en (1.30) en la ecuación de Schrödinger (1.26) se obtiene:

$$\frac{u_{i+1}}{\alpha^{2i}} + (1 + \alpha) \left[\frac{h^2}{2\alpha} \left(\frac{2z}{r_i} - \frac{l(l+1)}{r_i^2} \right) - \frac{1}{\alpha^{2i}} \right] u_i + \frac{\alpha u_{i-1}}{\alpha^{2i}} = \lambda u_i; \quad (1.31)$$

$$\text{donde } \lambda = -\frac{1}{2\alpha} h^2 (1 + \alpha) E$$

Además:

$$r_i = r_{i-1} + h_i = r_{i-1} + h\alpha^i \quad (1.32)$$

La anterior ecuación puede ser escrita en forma más compacta de la siguiente manera:

$$a_i u_{i+1} + b_i u_i + c_i u_{i-1} = \lambda u_i \quad (1.33a)$$

Donde

$$a_i = \alpha^{-2i}; b_i = (1 + \alpha) \left[\frac{h^2}{2\alpha} \left(\frac{2z}{r_i} - \frac{l(l+1)}{r_i^2} \right) - \frac{1}{\alpha^{2i}} \right]; c_i = \alpha^{1-2i} \quad (1.33b)$$

de las ecuaciones (1.33) se puede observar que tenemos un sistema tridiagonal, con una matriz tridiagonal no simétrica, a partir del cual se procede a encontrar los valores propios por medio del método de bisección como en el caso de la malla equidistante.

Para el caso de la malla equidistante se observo que el método daba mejores resultados para el segundo esquema planteado (1.26), esto debido a que en este esquema la ecuación diferencial tiene el Jacobiano igual a uno, para lo cual es óptima la malla equidistante. En el caso del primer esquema (1.10), el Jacobiano es igual a r , razón por la cual se estima que se tendrá una mejora en los resultados si se ensaya con una malla no equidistante.

1.3.3. Algoritmo de Numerov

El error del método anterior utilizado para discretizar la ecuación diferencial sobre una malla con el paso entre los nodos igual a h es de orden h^2 , igualmente si la malla no es equidistante. Existe otro algoritmo, llamado de Numerov con el cual el método presenta un error implícito (de discretización) mucho menor, de orden h^6 . Explicaremos la idea del método considerando un ejemplo de una ecuación lineal de segundo orden, que se encuentra en muchas aplicaciones en física:

$$f''(x) + k^2(x)f(x) = S(x) \quad (1.34)$$

donde las funciones $S(x)$, termino no homogéneo (“fuente”) y $k^2(x)$ son dadas.

Para derivar las formulas correspondientes del algoritmo de Numerov partimos de la siguiente identidad:

$$\frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = f_i'' + \frac{h^2}{12} f_i^{(IV)} - O(h^4) \quad (1.35)$$

Por otro lado derivando dos veces la ecuación (1.34) tenemos

$$f_i^{(IV)} = \left[S(x_i) - k^2(x_i)f(x_i) \right]'' = \frac{S_{i+1} - 2S_i + S_{i-1}}{h^2} - \frac{(k^2 f)_{i+1} - 2(k^2 f)_i + (k^2 f)_{i-1}}{h^2} + O(h^2) \quad (1.36)$$

Sustituyendo (1.36) en (1.35), teniendo en cuenta que $f_i'' = S_i - k_i^2 f_i$ y haciendo algunas transformaciones algebraicas se obtienen las siguientes relaciones de recurrencia:

$$a_{i-1}f_{i-1} + b_i f_i + a_{i+1}f_{i+1} = c_i; i = 1, 2, \dots, N \quad (1.37a)$$

$$a_{i\pm 1} = 1 \pm \frac{h^2}{12} k^2_{i\pm 1}; b_i = 2 \left(\frac{5}{12} k^2_i h^2 - 1 \right); c_i = \frac{h^2}{12} (S_{i+1} + 10S_i + S_{i-1}) + O(h^6) \quad (1.37b)$$

A continuación se aplicará el algoritmo de Numerov al problema de encontrar el espectro energético del átomo de hidrogeno para los estados S. Partiendo de la ecuación (1.26), se transforma a una ecuación en diferencias:

$$\left[1 + \frac{h^2}{12} k^2_{i+1}\right] u_{i+1} - 2 \left[1 - \frac{5}{12} h^2 k^2_i\right] u_i + \left[1 + \frac{h^2}{12} k^2_{i-1}\right] u_{i-1} = \lambda u_i \quad (1.38)$$

Donde:

$$a_{i\pm 1} = 1 \pm \frac{h^2}{12} k^2_{i\pm 1}; b_i = 2 \left(\frac{5}{12} h^2 k^2_i - 1 \right); \lambda = -Eh^2; k_i^2 = \frac{2z}{r_i}; r_i = ih, i = 1, 2, \dots, N \quad (1.39)$$

Las ecuaciones son similares a las deducidas anteriormente para el método de diferencias finitas con una malla equidistante con una solo diferencia, los coeficientes a_i , b_i , c_i están definidos de una manera diferente. Por eso se pude utilizar el mismo algoritmo para encontrar los niveles energéticos de átomo de hidrógeno. Los resultados que se obtuvieron son tabulados a continuación:

Nivel N	$E_{\text{método}}$						E_{exacto}
	$h = 0.1$		$h = 0.05$		$h = 0.01$		
	Equidistante	Numerov	Equidistante	Numerov	Equidistante	Numerov	
1	-0,99751	-0,99321	-0,99937	-0,99821	-0,99977	-0,99992	-1,00000
2	-0,24984	-0,24920	-0,24996	-0,24978	-0,24999	-0,24999	-0,25000
3	-0,11108	-0,11087	-0,11110	-0,11104	-0,11111	-0,11110	-0,11111
4	-0,62490	-0,62403	-0,62497	-0,62474	-0,62499	-0,62498	-0,62500
5	-0,39995	-0,39950	-0,39998	-0,39986	-0,39999	-0,39992	-0,40000
6	-0,27735	-0,27708	-0,27736	-0,27729	-0,27707	-0,27096	-0,27777

Tabla. 3 Resultados del algoritmo de Numerov para diferentes pasos. Todos los valores están dados en Ry

De los resultados mostrados en la tabla 3, se puede observar que con el algoritmo de Numerov no se consiguió mejorar los resultados que habían sido obtenidos para la malla equidistante. Esto no parece tener sentido debido a que el error implícito del algoritmo de Numerov es mucho menor (4 ordenes de magnitud) que para el esquema de diferencias finitas sencillo. Sin embargo, hay que hacer notar que la aparente ineficiencia del algoritmo de Numerov, en gran parte se debe posiblemente al manejo poco cuidadoso que se tuvo con las condiciones de frontera para el problema, ya que las ecuaciones (1.39) no están definidas correctamente para los puntos extremos de la malla.

2. METODOS APROXIMADOS EN LA TEORIA DE DOS ELECTRONES

2.1 Generalidades

En el marco de la física atómica el problema con dos electrones carece hasta ahora de solución analítica conocida. No obstante, el hecho de que estos iones y átomos (He, H, Li^+ , etc) sean sistemas lo suficientemente simples, nos permite usar varios métodos de aproximación para llevar a cabo cálculos con un alto grado de precisión.[1] De hecho, para el estado base de tales átomos la precisión de los cálculos teóricos es del mismo orden de magnitud que el de las mediciones espectroscópicas. Entonces tales sistemas, no solo dan confirmación de la validez general de la mecánica cuántica, sino que además proveen una excelente base para controlar los diferentes métodos de aproximación que comúnmente se utilizan. Con la aparición de la ecuación de Schrödinger en 1926 los físicos se dieron a la tarea de encontrar una solución analítica al problema del átomo de helio, cuestión que hasta nuestros días permanece aun abierta y sigue siendo objeto de estudio. En los primeros años de la década de los 30's aparece el método variacional o de Ritz, con el cual se obtienen los resultados más precisos que se conocen para el estado base del átomo de helio, utilizando las funciones de prueba propuestas inicialmente por Kellner y posteriormente por Hylleraas. En 1931 Heisenberg desarrollo también un método para tratar este problema. Otros métodos aproximados fueron desarrollados debido a la necesidad que se tenía de encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger para átomos multielectrónicos, dentro de los cuales cabe mencionar la teoría de perturbaciones, los métodos de Hartree y Fock. En los años 50's Chandrasekhar propuso una función de prueba particular con la cual se obtuvieron resultados que concordaron bastante bien con los datos experimentales.

El campo del análisis numérico relacionado con los diferentes métodos aproximados utilizados en la solución del problema de dos electrones para sistemas atómicos ha tenido en las últimas décadas un importante desarrollo, esto debido a la aparición de sistemas semiconductores de baja dimensionalidad, como puntos cuánticos, análogos a los sistemas atómicos que ya habían sido ampliamente estudiados en los comienzos de la mecánica cuántica. En estas estructuras nanométricas la aproximación de masa efectiva aún provee una buena descripción del movimiento de los electrones a través de la red. Sin embargo, no se puede asumir que los portadores se comporten como un sistema débilmente correlacionado [5]. Si la correlación electrónica no fuera importante, entonces el corrimiento que sufren hacia arriba los niveles de energía seria independiente del tamaño del sistema. El incremento en la energía del estado base y los cambios en el espaciamiento de los niveles que tiene lugar cuando el confinamiento se reduce, muestra cuan importante llega a ser la interacción electrón-electrón. La interacción Coulombiana efectiva se incrementa cuando la dimensionalidad es reducida. En sistemas poco confinados la interacción dominante es la energía cinética, debido a que la correlación electrónica hace que los electrones se separen lo suficiente para minimizar la interacción repulsiva Coulombiana y así evitar

el apareamiento de electrones. Se ha demostrado que las correlaciones partícula-partícula ocurren en la escala de magnitudes mesoscópicas en microestructuras cuánticas como puntos cuánticos. Las correlaciones son mayores cuando se tienen pocas partículas confinadas. Como consecuencia estas estructuras despliegan una rica variedad de propiedades electrónicas como: electrones desligados, estados correlacionados débilmente, las cuales hacen de las microestructuras cuánticas sistemas interesantes de estudiar.

Dentro de los sistemas análogos al átomo de helio que se pueden crear y que gozan de gran interés en lo que se refiere a la física del estado sólido tenemos, el caso de una donadora negativamente cargada D^- y el caso de un trión X^- , confinados en un punto cuántico.

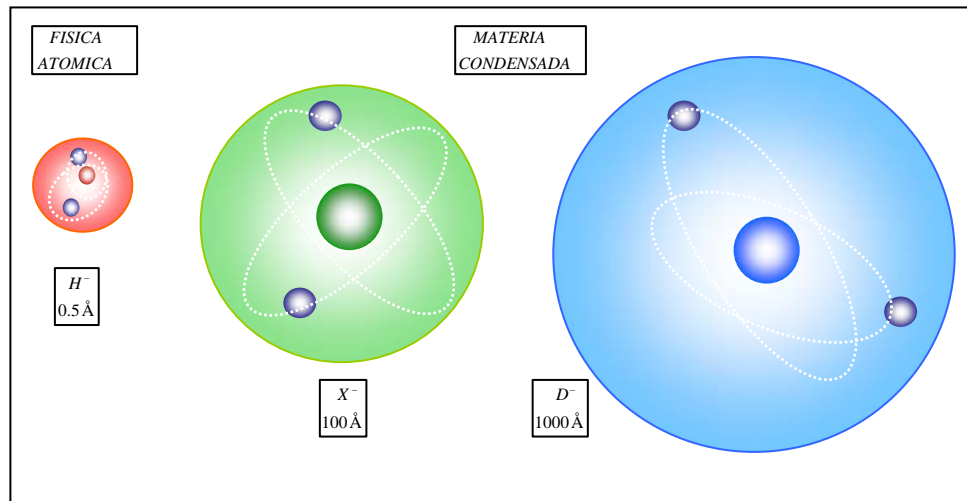


Fig. 6. Tipos de sistemas de dos electrones.

Una impureza donadora negativamente cargada, es un sistema formado por una donadora neutra poco profunda que ha capturado un electrón. Dichas impurezas se pueden obtener por tres procesos diferentes. El primer proceso corresponde a la recombinación de dos impurezas neutras dando origen a una impureza cargada negativamente y a una cargada positivamente, el segundo corresponde a la colisión entre una D^0 y un excitón, en la cual se desprende el electrón del excitón y lo atrapa la impureza neutra, originándose entonces, una impureza D^- y un hueco. Para el último proceso, tal vez el más importante, se tiene que los electrones originados por las donadoras ubicadas en la barrera de potencial se trasladan hacia el interior del punto cuántico donde son atrapados por la impureza neutra, dando origen a la impureza D^- .

El trión X^- es un sistema propio de la física del estado sólido y está constituido por un hueco, el cual se considera como el análogo del núcleo atómico y un par de electrones que viven alrededor de dicho núcleo. Este sistema presenta grandes diferencias con respecto al donador D^- y respecto a los sistemas atómicos. La principal diferencia es que el núcleo no se puede considerar como fijo; dicho hueco a pesar de que se mueve menos rápido que los electrones es lo suficientemente dinámico como para despreciar su movimiento. Esto hace que el problema se torne mucho más complicado que para el caso de la donadora D^- , y por lo tanto se debe

recurrir adicionalmente a métodos como la aproximación adiabática para resolverlo. Otra diferencia importante es el cambio en la forma del potencial de confinamiento de tipo Coulombiano por potenciales de otros tipos que ya se han mencionado.

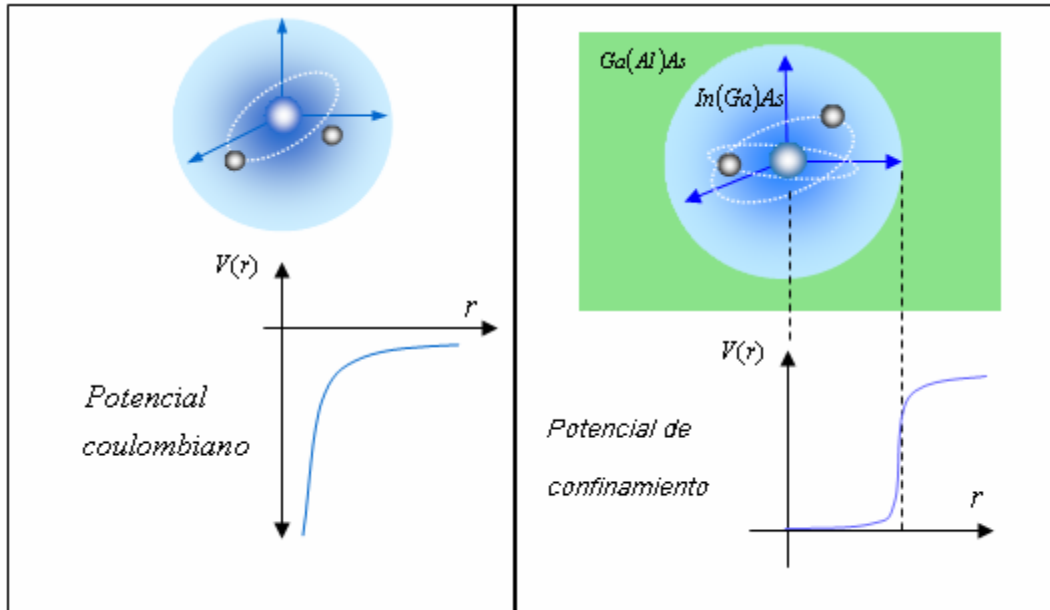


Fig. 7 Esquema del problema de dos electrones en un campo central. Problema clásico (izquierda), problema actual (derecha).

Esta establecido que el confinamiento cuántico en heteroestructuras semiconductoras aumenta la energía de enlace para sistemas de pocas partículas tales como donadoras neutras y negativamente cargadas (D^0 y D^- respectivamente), excitones (X), triones (X^+ , X^-) y biexcitones (XX), siendo posible así su observación a temperatura ambiente. El espectro de estos sistemas está determinado por el intercambio entre las fuerzas de enlace debido al confinamiento, la atracción y la repulsión entre las partículas. Un paso clave para llegar a controlar dispositivos físicos de pocos electrones y huecos es la elaboración de un método simple y confiable para calcular sus estructuras electrónicas.

Gran parte de la atención ha sido puesta en el análisis de los estados de D^0 , D^- , X , y X^- en QD's. El espectro de estos sistemas ha sido estudiado mediante el uso de diferentes métodos [6-19], tales como el variacional, diagonalización, elementos finitos, y otros esquemas numéricos. Han sido considerados diferentes modelos de confinamiento, exponencial, Gaussiano, parabólico, y barrera con altura finita. Aunque estas técnicas dan resultados consistentes con los datos experimentales, ellas involucran un tedioso trabajo computacional. También, la gran mayoría de los modelos analizados son bidimensionales y ello permite despreciar los efectos relacionados con el espesor del punto cuántico. Recientemente para calcular las energías del estado base de D^0 , D^- , y X confinados en heteroestructuras semiconductoras, ha sido propuesto un procedimiento variacional simple relacionado con el esquema de la dimensión fractal.

2.2 Método variacional

La mayoría de los problemas de interés en mecánica cuántica no tienen solución exacta, por lo tanto se debe recurrir a técnicas numéricas que den resultados aproximados; una de las técnicas más ampliamente utilizada es el método variacional o método de Ritz. Consideremos una ecuación de la forma $H\psi = E\psi$ donde el Hamiltoniano H es un operador diferencial. Sea E_0 la energía del estado base del Hamiltoniano H y ψ_t una función de prueba (trial function), se tiene que siempre se cumple la siguiente desigualdad

$$E_t = \frac{\langle \psi_t | H | \psi_t \rangle}{\langle \psi_t | \psi_t \rangle} \geq E_0 \quad (2.1)$$

donde E_t es la energía aproximada del estado base. Si la función de prueba ψ_t es idéntica a la solución exacta para el estado base ψ_0 , entonces E_t coincide con la energía del estado base E_0 . Además, si ψ_t difiere de ψ_0 por una función infinitesimalmente pequeña de primer orden, entonces E_t difiere de la E_0 por una cantidad pequeña de segundo orden. Entonces para cualquier función ψ_t diferente a la función propia exacta ψ dará un valor para E_t mayor que E_0 , la discrepancia se hará más pequeña cuando la diferencia entre ψ_t y ψ_0 sea menor.

El método variacional entonces se inicia escogiéndose una forma analítica adecuada para ψ_t , que involucre algunos parámetros arbitrarios, conocidos como parámetros variacionales. Una forma plausible para la función de prueba es determinada por simples consideraciones físicas, en la cual varias constantes numéricas tales como coeficientes de expansiones en series de potencias, son permitidas arbitrariamente. Estos parámetros son determinados por la condición de que la integral variacional de Schrödinger, es decir la energía total, debe ser mínima. El problema variacional de Schrödinger es entonces reducido a un problema ordinario de minimización. La expresión E_t es entonces evaluada como una función de estos parámetros y se debe encontrar el valor mínimo con respecto a todos los parámetros. Este valor mínimo de E_t da entonces un valor superior al valor de E_0 . Si es usado un mayor número de parámetros en la función de prueba, después de realizar la minimización se deberá encontrar un valor para E_t que se aproxime más al valor exacto. Una selección adecuada de la forma de la función de prueba hará que el procedimiento converja rápidamente. El procedimiento, desafortunadamente es aplicable a niveles bajos porque la función de onda de un estado excitado debe ser siempre ortogonal a las funciones de todos los niveles más bajos. Esto impone un gran número de condiciones adicionales sobre las funciones propias de los estados excitados las cuales hacen el procedimiento pesado y eventualmente inútil.

2.2.1 Funciones de prueba tipo Chandrasekhar y Hylleraas

En los cálculos del espectro electrónico para átomos con dos electrones las funciones de prueba tipo Hylleraas y tipo Chandrasekhar generan mejores resultados para el método variacional. Con el fin de aplicar el cálculo variacional, Hylleraas escogió como función de prueba:

$$\psi(\eta s, \eta t, \eta u) = e^{-\left(\frac{\eta s}{2a_0}\right)} F(\eta s, \eta t, \eta u) \quad (2.2)$$

donde $F(\eta s, \eta t, \eta u)$ es un polinomio arbitrario en las variables s, u y t excepto que esta última variable sólo contiene potencias pares. Esta restricción permite incorporar el intercambio de los dos electrones. Siguiendo a Hylleraas se supone que

$$F(s, t, u) = \sum_{n,l,m=0} C_{n,l,m} \left(\frac{s}{a_0}\right)^n \left(\frac{t}{a_0}\right)^l \left(\frac{u}{a_0}\right)^m \quad (2.3)$$

$$F(s, t, u) = 1 + C_1 \frac{u}{a_0} + C_2 \left(\frac{t}{a_0}\right)^2 + C_3 \frac{s}{a_0} + C_4 \left(\frac{s}{a_0}\right)^2 + C_5 \left(\frac{u}{a_0}\right)^2 + C_6 \frac{su}{a_0^2} + C_7 \frac{t^2 u}{a_0^3} \dots \quad (2.4)$$

Los diferentes términos se han agrupado según su importancia. Los parámetros η, C_1, C_2, \dots se eligen de acuerdo con el principio variacional. El parámetro η se incluye para que se satisfaga el teorema de virial para átomos.

En los años 50's Chandrasekhar propuso una función de prueba para el análisis del estado base del ión H^- , debido a la importancia que tiene este problema en astrofísica. Como se ha encontrado, el ión negativo del hidrógeno tiene una gran importancia para el estudio de la opacidad de la atmósfera del sol y otras estrellas similares; además, iones H^- han sido encontrados en la atmósfera de enanas blancas donde se encuentran sujetos a intensos campos magnéticos ($\sim 10^5$ T).

La función de prueba propuesta por Chandrasekhar para el estado base del ión H^- presenta la forma siguiente:

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \left(e^{-\alpha r_1} e^{-\beta r_2} + e^{-\alpha r_2} e^{-\beta r_1} \right) \left(1 + c |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \right) \quad (2.5)$$

en la cual se ve incluida la correlación electrónica

2.2.2 Procedimiento de Hylleraas para dos electrones en 2-D

El tratamiento del átomo de helio requiere de seis coordenadas $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Hylleraas observó que el estado base del átomo de helio se puede determinar más fácilmente eliminando tres coordenadas angulares y describiendo el problema en términos de las coordenadas (r_1, r_2, θ_{12}) , donde θ_{12} es el ángulo formado entre los vectores \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 . La razón de esto reside en que los dos electrones y el núcleo atómico definen un plano que los contiene y la orientación espacial de este plano no es importante en el caso del estado base (el momento angular total electrónico es cero). En esta sección se desarrollará el procedimiento propuesto por Hylleraas para el ión H^- (caso planar), donde a los dos electrones se les ha restringido su movimiento solo a dos dimensiones.

Fig. 8. Sistema de coordenadas para el problema de dos electrones en 2-D.

Partiendo de que la distancia PJ_2 entre los dos electrones satisface el teorema del coseno, $PJ_2 = pJ_2 + p_i - 2p]P_2 \cos\langle p; \langle p = \langle P_2 - \langle p]$ (2.6)

se puede concluir que las funciones de onda que describen estados con momentum angular igual a cero (estados S), se pueden describir en las formas alternativas $I.f = I.f(p_j, P_2, B_j2)$ o $I.f = I.f(p_j, P_2, P_j2)$. La experiencia ha demostrado que resulta más ventajoso utilizar las coordenadas de Hylleraas:

$$s = Pl + P_2' t = p] - P_2, u = p_{12} \tag{2.7}$$

donde $O \sim S < \infty, -u \sim t \sim u, O \sim u \sim S$

Para el sistema H- tenemos el siguiente Hamiltoniano adimensional

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{P_2} - \frac{1}{PJ_2} \tag{2.8}$$

Se utilizara la siguiente función de prueba tipo Hylleraas con tres parámetros variacionales (a, fJ, r)

$$I.f(s,t,u) = e^{-m(l + \delta t + J'u)} \tag{2.9}$$

para el cálculo de la energía se debe minimizar la siguiente expresión con respecto a los tres parámetros variacionales

$$E(a, \delta, r) = \frac{\int I.f \nabla^2 I.f \, d\tau}{\int I.f^2 \, d\tau} \tag{2.10}$$

donde los valores promedios se expresan a través de las integrales cuatro-dimensionales

$$\langle V \rangle = \int V I.f^2 \, d\tau / \int I.f^2 \, d\tau = \int V I.f^2 \, d\tau / \int I.f^2 \, d\tau \tag{2.11}$$

La energía potencial V de los dos electrones en (2.8) se puede expresar en términos de las coordenadas de Hylleraas como sigue:

$$V = -\frac{1}{2} - \frac{1}{P_2} - \frac{1}{PJ_2} = -\frac{1}{2} - \frac{1}{(s^2 - t^2)r} \tag{2.12}$$

Se debe ahora transformar la parte relacionada con la energía cinética. Partiendo de las coordenadas cartesianas: ∇^2

$\nabla^2 = \nabla_x^2 + \nabla_y^2$ y en coordenadas (p_j, P_2', P_{12}) se tiene

$$\frac{3j1j1}{3p_i} \frac{3j1j1}{3p_i} X_i \frac{3j1j1}{3p_i} X_{i-2} \frac{3j1j1}{3p_i} Y_i \frac{3j1j1}{3p_i} \frac{Y_i - Y_2}{3p_i} \quad (2.13)$$

por 10 tanto

$$(v_{j1j1})_2 = \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3p_i} \quad (2.14)$$

Ahora tomando $p_i^2 - P_1P_2 = p_i^2 - P_iP_2 \cos qJ$ y $P_1P_2 \cos qJ = \sim(P_i^2 + P_i - P_i^2)$ tenemos:

$$P_1 - P_1^2 P_2 = \frac{1}{2} (P_i^2 + P_i - P_i^2) \quad (2.15)$$

Sustituyendo (2.13) en (2.12) tenemos entonces

$$(v_{p_i j1j1})_2 = \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} \quad (2.16)$$

De manera similar se tiene que

$$(v_{P_2 j1j1})_2 = \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3P_1} \quad (2.17)$$

En consecuencia

$$[(v_{p_i j1j1})_2 + (v_{P_2 j1j1})_2] = \frac{3j1j1}{(3p_i)^2} + \frac{3j1j1}{(3P_2)^2} + \frac{3j1j1}{(3p_i)^2} + \frac{3j1j1}{(3P_2)^2} + \frac{3j1j1}{(3p_i)^2} + \frac{3j1j1}{(3P_2)^2} + \frac{3j1j1}{(3p_i)^2} + \frac{3j1j1}{(3P_2)^2} + \frac{3j1j1}{(3p_i)^2} + \frac{3j1j1}{(3P_2)^2} \quad (2.18)$$

Usando las definiciones de las variables de Hylleraas se tiene que

$$\frac{3j1j1}{3p_i - 3s} + \frac{3j1j1}{3t' - 3P_2 - 3s} + \frac{3j1j1}{3t' - 3p_i^2 - 3u} \quad (2.18)$$

Con estas expresiones se obtiene finalmente

$$[(v_{p_i j1j1})_2 + (v_{P_2 j1j1})_2] = \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3P_2} + \frac{3j1j1}{3p_i} + \frac{3j1j1}{3P_2} \quad (2.19)$$

10 cual permite escribir el Laplaciano en coordenadas de Hylleraas:

$$X = 2 \left[\frac{3V/Y}{(ad)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} + \frac{3V/Y}{(3.t)} \right] \quad (2.20)$$

Ahora debemos expresar el elemento diferencial en coordenadas de Hylleraas

$$dP_1 dP_2 = p_i drp_i dp_i P_2 drp_2 dP_2 \quad (2.21)$$

Teniendo en cuenta el teorema del coseno (2.2), se obtiene $P_i P_2 \cos qJ = (P_i^2 + P_i - P_i^2)/2$

de lo cual se obtiene por diferenciación respecto a rp : $p_i P_2 \sin qJ = p_i^2 dP_2$

Con la relación anterior y una identidad trigonométrica se tiene que el elemento diferencial de volumen (2.21) toma la forma

$$\int_t^s \frac{C_1 u du}{\sqrt{(s^2 - u^2)(u^2 - t^2)}} = \frac{\pi}{2} C_1 \quad (2.30)$$

$\int_t^s \frac{B_1 u^2 du}{\sqrt{(s^2 - u^2)(u^2 - t^2)}}$; esta integral puede ser expresada en términos de la integral elíptica de segunda clase:

$$\int_t^s \frac{B_1 u^2 du}{\sqrt{(s^2 - u^2)(u^2 - t^2)}} = B_1 s E\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{s^2 - t^2}{s^2}}\right) \quad (2.31)$$

$$\int_t^s \frac{A_1 u^3 du}{\sqrt{(s^2 - u^2)(u^2 - t^2)}} = \frac{\pi A_1}{2} \left(\frac{s^2 + t^2}{2}\right) \quad (2.32)$$

Tenemos entonces que la integral I_1 puede ser expresada como sigue:

$$I_1 = 4\pi \int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{A_1}{2} (s^2 + t^2) + C_1 \right) + B_1 s E\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{s^2 - t^2}{s^2}}\right) + \frac{D_1}{s} F\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{s^2 - t^2}{s^2}}\right) \right] dt \quad (2.33)$$

Ahora procediendo de forma análoga para el denominador de (2.10) se tiene la siguiente integral:

$$I_0 = \langle \psi | \psi \rangle = \int \psi^2 d\mathbf{p}^4 = 2\pi \int_0^\infty ds \int_0^s du \int_0^u \frac{u(s^2 - t^2) \psi^2 dt}{\sqrt{(s^2 - u^2)(u^2 - t^2)}} \quad (2.34)$$

Para la función de prueba elevada al cuadrado se tiene

$$\psi^2 = e^{-2\alpha s} (A_0 u^2 + B_0 u + C_0) \quad (2.35)$$

donde $A_0 = \gamma^2$; $B_0 = 2\gamma(1 + \beta t^2)$; $C_0 = (1 + \beta t^2)^2$.

Después de sustituir (2.35) en (2.34), e integrar respecto a la variable u se obtiene finalmente la siguiente expresión para el denominador de (2.10)

$$I_0 = 2\pi \int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s (s^2 - t^2) \left[\frac{\pi}{2} \left(\frac{A_0}{2} (s^2 + t^2) + C_0 \right) + B_0 s E\left(\frac{\pi}{2}, \sqrt{\frac{s^2 - t^2}{s^2}}\right) \right] dt \quad (2.36)$$

Con las expresiones (2.33) y (2.36) se obtiene una expresión completa para (2.10), la cual está dada por el cociente de dos integrales dobles respecto a las variables s y t . El procedimiento de Hylleraas para el ión H^- en el caso planar se dejará hasta este punto, debido a que es suficiente con lo que se tiene para aplicarlo al problema de una D^- y un X^- , donde se tiene un potencial de confinamiento que presenta una dependencia espacial de las variables s y t .

2.3 Método de dimensión fractal

El efecto del confinamiento impuesto por pozos cuánticos sobre la energía de enlace de impurezas D^0 y D^- en diferentes heteroestructuras semiconductoras ha sido analizado en un número considerable de investigaciones teóricas. Muchos de estos trabajos calculan la energía de enlace del estado base de una D^- en QWs y QDs,

mediante el método variacional usando una función de prueba tipo Chandrasekhar con varios parámetros variacionales no lineales. El procedimiento variacional con esta función de prueba requiere un gran trabajo computacional relacionado con el repetitivo cálculo de integrales multidimensionales. Por otro lado, en los pasados años la mejor concordancia entre la teoría y los experimentos para átomos de dos electrones ha sido obtenida usando una función de prueba tipo Hylleraas en la cual el número de parámetros lineales puede ser incrementado sin restricción alguna [1]. Los mejores resultados variacionales para la energía del estado base de una D^- en semiconductores de 3 y 2 dimensiones han sido obtenidos previamente por el uso de una función de prueba tipo Hylleraas con 35 parámetros variacionales lineales [40]. Desafortunadamente, las ventajas de esta función de prueba desaparecen para la D^- en heteroestructuras semiconductoras con un potencial de confinamiento anisotrópico debido al incremento del orden y el número de integrales multidimensionales que se tienen que computar en cada paso del procedimiento variacional. Sin embargo, se pueden tomar las ventajas de la función tipo Hylleraas usando una aproximación matemática, la cual permite considerar un medio real anisotrópico como si fuera isotrópico con una dimensión reducida y no entera. Esta primera aproximación fue aplicada para analizar problemas de estado sólido por He [41]. He usó el Hamiltoniano de un sistema hidrogenoide en un espacio efectivo de dimensión fraccionaria, propuesto por Stillinger [42]. Lefebvre junto con sus coinvestigadores aplicaron este método para analizar los estados de energía de un excitón y el espectro de absorción en QWs y QWWs. Ellos consideraron la dimensión fraccional como un parámetro fenomenológico relacionado con la geometría de la heteroestructura.

En la última década el modelo del espacio de dimensión fraccionaria ha sido usado exitosamente para describir propiedades de donadoras y excitones poco profundos en heteroestructuras semiconductoras. Sin embargo, hasta hace un par de años este método simple no había sido aplicado para estudiar las propiedades de las donadoras cargadas negativamente. Debido a los efectos de correlación este último problema es más complicado que el de una donadora neutra o un excitón, para los cuales cualquier aproximación auto-consistente es suficiente y además la dimensión no entera puede ser considerada en promedio. El problema de la D^- requiere una definición de dimensión fraccionaria más rigurosa, la cual debería tomar en cuenta su variación local.

Mandelbrot [43], quien fue el primero en estudiar la dimensión fraccionaria de objetos geométricos con estructuras autosimilares, les dio el nombre exacto de fractales e introdujo el concepto de la dimensión fractal. El nombre viene del latín *fractua*, que significa irregular, pero a Mandelbrot también le gustaban las connotaciones de fraccional y fragmentario que hallaba en la palabra. Mandelbrot aduce que la geometría euclidiana es fría e incapaz de describir muchos de los comportamientos y formas de la naturaleza. El ha demostrado que la irregularidad es excitante y que no es mero ruido distorsionando formas euclidianas. Este “ruido” es en realidad la enérgica rúbrica de las fuerzas creativas de la naturaleza. La dimensión de un objeto en la teoría de la dimensión fractal de Mandelbrot es definida con un parámetro de escalamiento, el cual relaciona la masa de una caja de medición con su tamaño para un sistema de cajas cuyas formas reproducen la geometría del objeto y cuyas dimensiones se aproximan gradualmente a cero. La fórmula propuesta por Mandelbrot para la dimensión fraccional da el mismo valor para todas las partes del fractal exacto (objeto autosimilar). Por el contrario, la

densidad de carga dentro de una heteroestructura no puede ser considerada como un objeto auto similar y además, su dimensión exacta puede ser bien definida solo localmente pero no en todo el espacio. Desde este punto de vista, el modelo de un espacio de dimensión fraccional que había sido usado en un comienzo, debe ser considerado como una aproximación donde la dimensión del espacio efectivo esta definida como un promedio.

Mikhailov [12] Y colaboradores, presentaron un procedimiento variacional general, donde la ecuación de onda para estados S de DO y U 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-ión. Ellos encontraron que el Jacobiano para la ecuación de onda renormalizada esta dado 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 el elemento Jacobiano de volumen del objeto, que determina la dimensión fractal, coincide con el Jacobiano de la ecuación de onda renormalizada. Esta es la razón por la cual se llamó al este procedimiento variacional método de dimensión fractal. En este procedimiento la dimensión fraccional depende no solo de la geometría de la heteroestructura sino también de la distancia electrón-ión.

El método de dimensión fractal provee un procedimiento simple y compacto para calcular las energías de enlace para el estado base de donadoras DO y D' en diferentes heteroestructuras con un potencial de confinamiento arbitrario y para cualquier posición de la donadora.

2.3.1 Método de dimensión fractal para el átomo de helio en 3-D

La correlación electrónica es el fenómeno por medio del cual los electrones tienden a alejarse el uno del otro con el fin de disminuir la energía del sistema (la repulsión de Coulomb entre electrones se hace menor y esto hace disminuir la energía total).

Para el estado base del átomo de helio se puede considerar la siguiente función de prueba sin correlación entre los electrones y con un parámetro variacional a :

$$\psi_0 = f_0(ar) f_0(az) \quad (2.37)$$

Donde $f_0(a, r_i)$ es la función de onda electrónica normalizada para un átomo tipo hidrogenoide:

$$f_0(a, r) = \frac{z^3}{\sqrt{\pi}} \exp(-azr) \quad (2.38)$$

aquí z es la carga nuclear del átomo y a es un parámetro variacional, con lo cual tenemos para un átomo con dos electrones sin considerar la interacción entre ellos la función de prueba siguiente:

$$\psi_0 = \frac{az}{7r} \exp(-az(r_1 + r_2)) \quad (2.39)$$

Ahora adicionando una función envolvente que incluya la correlación electrónica en la función de prueba para el estado base tenemos:

$$\psi_0 = \frac{az}{JT} \exp(-az(r_1 + r_2)) \mathcal{M}(r_{12}) = F_0(l_j, r_2) M(r_{12}) \quad (2.40)$$

donde $\mathcal{M}(r_{12})$ es la función envolvente que toma en cuenta el efecto de la correlación electrónica para el par de electrones, la cual depende únicamente de la distancia de separación entre ellos (r_{12}).

El problema consiste ahora en encontrar la función de correlación que satisfaga el principio variacional de Schrodinger, con lo que se consigue una minimización de la energía para el sistema (estado base). Minimizándose el funcional:

$$F[\mathcal{M}] = \langle F_0 | H - E | F_0 \mathcal{M} \rangle \quad (2.41)$$

donde H Y E representan el Hamiltoniano y la energía del sistema, respectivamente y $F_0/\mathcal{M} = \psi_0$ es la función de prueba.

Nótese que si $F[\mathcal{M}]$ -7 mín, entonces:

$$\frac{\delta F[\mathcal{M}]}{\delta \mathcal{M}} = 0 \quad (2.42)$$

$$F[\mathcal{M}] = \int F_0' \mathcal{M}' (H-E) F_0 \mathcal{M} dr - 7 \text{mín}, \text{ equivalente a la ecuación de Schrodinger } H\psi_0 = E\psi_0$$

Este es el principio variacional de Schrodinger y su ventaja, respecto al método variacional de Ritz, radica en que se puede encontrar directamente la función que mejor se aproxima a la descripción del sistema físico en cuestión. sin tener que suponer la forma de la función de prueba con parámetros variacionales, lo cual resulta mucho más preciso. Se puede plantear el problema de valores propios para el átomo de helio como un problema variacional de la forma siguiente:

Tomando el Hamiltoniano adimensional para un átomo de dos electrones

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{Z}{r_{11}} - \frac{Z}{r_{22}} + \frac{1}{r_{12}} \quad (2.43)$$

donde r_j es la distancia del núcleo al electrón i con $i= 1,2$ Y la separación entre los electrones esta dada por

$$r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$$

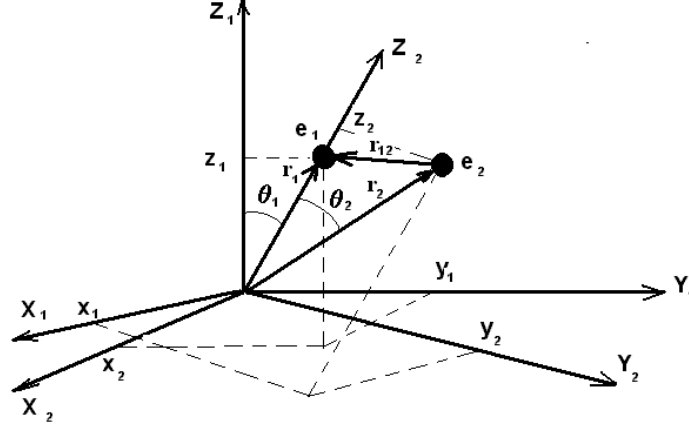


Fig. 9. Sistema de coordenadas para el problema de dos electrones en 3-D.

Sustituyendo el Hamiltoniano en el funcional (2.41) se tiene que el funcional se puede separar en cuatro partes

$$F[\phi] = I_1 + I_2 + I_3 - I_0 E \quad (2.44)$$

De donde tenemos las cuatro integrales múltiples siguientes:

$$I_0 = \langle F_0 \phi | F_0 \phi \rangle$$

$$I_1 = \left\langle F_0 \phi \left| -\Delta_1 - \frac{2Z}{r_1} \right| F_0 \phi \right\rangle = -\alpha^2 Z^2 I_0 + 2Z(\alpha - 1) \left\langle F_0 \phi_0 \frac{1}{r_1} \right\rangle + \langle F_0^2 (\nabla_1 \phi)^2 \rangle$$

$$I_2 = \left\langle F_0 \phi \left| -\Delta_2 - \frac{2Z}{r_2} \right| F_0 \phi \right\rangle = -\alpha^2 Z^2 I_0 + 2Z(\alpha - 1) \left\langle F_0 \phi_0 \frac{1}{r_2} \right\rangle + \langle F_0^2 (\nabla_2 \phi)^2 \rangle$$

$$I_3 = \left\langle F_0 \phi \left| \frac{2}{r_{12}} \right| F_0 \phi \right\rangle$$

Volviendo al funcional (2.41) y después de integrar bajo todos los ángulos y algunas manipulaciones este funcional para la función de prueba (2.40) puede ser escrito

$$F[\phi] = \int_0^\infty \left\{ J_0(r_{12}) \left[\left(\frac{2}{r_{12}} - E - 2\alpha^2 Z^2 \right) \phi^2 + 2(\phi')^2 \right] + 2Z(\alpha - 1) J_1(r_{12}) \phi^2 \right\} dr_{12} \quad (2.45)$$

Del principio variacional de Schrödinger se tiene que:

$$F[\phi] = \int L(\phi, \nabla \phi, r_{12}) dr_{12} \quad (2.46)$$

El problema de minimizar el funcional anterior equivale a resolver la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dr_{12}} \left(\frac{\partial L}{\partial \phi'} \right) - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0 \quad (2.47)$$

donde L es la lagrangiana del sistema y esta dada por

$$L = J_0(r_{12}) \left[\left(\frac{2}{r_{12}} - E - 2\alpha^2 Z^2 \right) \phi^2 + 2(\phi')^2 \right] + 2Z(\alpha - 1) J_1(r_{12}) \phi^2 \quad (2.48)$$

Aplicando (2.47) sobre (2.48) se obtiene una ecuación tipo Schrödinger, la cual tiene por solución la función de correlación:

$$-\frac{2}{J_0} \frac{d}{dr_{12}} \left[J_0 \frac{d\phi}{dr_{12}} \right] + V_{eff} \phi = \varepsilon \phi \quad (2.49)$$

donde los Jacobianos $J_0(r_{12})$ y $J_1(r_{12})$ presentan la forma siguiente:

$$J_0(r_{12}) = \langle F_0^2 \rangle = 8\pi^2 \int_0^{\infty} r_1 dr_1 \int_{|r_1-r_{12}|}^{r_1+r_{12}} \left(\frac{\alpha^3 Z^3}{\pi} \right)^2 \exp(-2\alpha Z(r_1+r_2)) r_2 dr_2$$

$$J_0(r_{12}) = \frac{\alpha^3 z^3}{6} (4\alpha^2 z^2 r_{12}^4 + 6\alpha z r_{12}^3 + 3r_{12}^2) \exp(-2\alpha z r_{12}) \quad (2.50)$$

$$J_1(r_{12}) = \left\langle F_0^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \right\rangle = 8\pi^2 \int_0^{\infty} r_1 dr_1 \int_{|r_1-r_{12}|}^{r_1+r_{12}} \left(\frac{\alpha^3 Z^3}{\pi} \right)^2 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \exp(-2\alpha Z(r_1+r_2)) r_2 dr_2$$

$$J_1(r_{12}) = 2\alpha^4 z^4 (2\alpha z r_{12}^3 + r_{12}^2) \exp(-2\alpha z r_{12}) \quad (2.51)$$

El potencial efectivo estará dado por

$$V_{eff}(r_{12}) = \frac{2}{r_{12}} + 2z(\alpha-1) \frac{J_1(r_{12})}{J_0(r_{12})} \quad (2.52)$$

y la energía total del sistema será

$$E = \varepsilon - 2\alpha^2 z^2 \quad (2.53)$$

La ecuación (2.49) se puede interpretar como la ecuación de un átomo de hidrógeno en un espacio efectivo y homogéneo, con una parte radial del elemento de volumen $J_0(r_{12})$ el cual hemos llamado Jacobiano. Esta ecuación puede ser resuelta por cualquier método numérico conocido, a pesar de que la función de onda no es exacta, la solución de la ecuación (2.49) es la mejor aproximación, entre todas las funciones de onda posibles. En este caso la ecuación (2.49) se resolverá usando el método de barrido trigonométrico.

2.3.2 Extensión del método de dimensión fractal para el átomo de helio en 3-D

Siguiendo el modelo de función de onda considerada por Hylleraas, incluimos otro parámetro variacional β en la función de prueba (2.39) considerada en nuestro modelo como se muestra a continuación:

$$\psi_0(r_1, r_2, r_{12}) = f_0(\alpha r_1) f_0(\alpha r_2) (1 + \beta t^2) \phi(r_{12}) \quad (2.54)$$

En la fórmula anterior podemos introducir la tercera coordenada de Hylleraas ($t = r_1 - r_2$) haciendo la siguiente consideración: $\cosh(\beta t) \cong 1 + \beta t^2$ esto debido a que $\beta < \alpha$. La anterior consideración hace que el cálculo de las integrales sea más sencillo aprovechando el hecho de que el coseno hiperbólico se puede expresar por medio de funciones exponenciales.

Como $f_0(\alpha r_i) = \sqrt{\frac{(\alpha z)^3}{\pi}} \exp(-\alpha z r_i)$ tenemos ahora que nuestra nueva función de prueba será:

$$\psi_0(r_1, r_2, r_{12}) = \frac{\alpha^3 Z^3}{\pi} e^{-\alpha z(r_1+r_2)} \cosh[\beta(r_1 - r_2)] \phi(r_{12}) = F_0(r_1, r_2) \phi(r_{12}) \quad (2.55)$$

Escribiendo (2.55) en coordenadas de Hylleraas tenemos:

$$\psi_0(s, t, u) = \frac{\alpha^3 Z^3}{\pi} e^{-\alpha Z s} (e^{\beta t} + e^{-\beta t}) \phi(u) = F_0(s, t) \phi(u) \quad (2.56)$$

En adelante extenderemos nuestro MDF considerando la función de prueba tipo (2.56) para un átomo con dos electrones. Partiendo del principio variacional deduciremos una ecuación diferencial para la función de correlación, la cual para cada valor dado de los parámetros variacionales α y β describe el estado con la energía mínima $E(\alpha, \beta)$ y después analizando la dependencia de esta energía con los parámetros variacionales se calculará la energía del estado base.

Reemplazando el Hamiltoniano del sistema (2.43), junto con la función de prueba (2.55) en el funcional (2.41) se obtienen las cuatro integrales múltiples siguientes:

$$I_0 = \langle F_0 \phi | F_0 \phi \rangle$$

$$I_1 = -(\alpha^2 Z^2 + \beta^2) I_0 + 2Z(\alpha - 1) \left\langle F_0^2 \phi^2 \frac{1}{r_1} \right\rangle + \beta(1 - 2\alpha) \left\langle \phi^2 F_0 e^{-\alpha Z(r_1+r_2)} \sinh[\beta(r_1 - r_2)] \right\rangle + \left\langle F_0^2 (\nabla_1 \phi)^2 \right\rangle$$

$$I_2 = -(\alpha^2 Z^2 - \beta^2) I_0 + 2Z(\alpha - 1) \left\langle F_0^2 \phi^2 \frac{1}{r_2} \right\rangle - \beta(1 - 2\alpha) \left\langle \phi^2 F_0 e^{-\alpha Z(r_1+r_2)} \sinh[\beta(r_1 - r_2)] \right\rangle + \left\langle F_0^2 (\nabla_2 \phi)^2 \right\rangle$$

$$I_3 = \left\langle F_0 \phi \left| \frac{2}{r_{12}} \right| F_0 \phi \right\rangle$$

Volviendo al funcional (2.41) y después de integrar bajo todos los ángulos y algunas manipulaciones, este funcional para la función de prueba (2.55) puede ser escrito así:

$$F[\phi] = \int_0^\infty \left\{ J_0(r_{12}) \left[\left(\frac{2}{r_{12}} - E - 2\alpha^2 Z^2 \right) \phi^2 + 2(\phi')^2 \right] + 2Z(\alpha - 1) J_1(r_{12}) \phi^2 \right\} dr_{12} \quad (2.57)$$

Del principio variacional de Schrödinger (2.41), y realizando el mismo procedimiento de la sección anterior se tiene que el problema de minimizar el funcional anterior equivale a resolver la siguiente ecuación tipo Schrödinger, la cual da por solución la función de correlación:

$$-\frac{2}{J_0} \frac{d}{dr_{12}} \left[J_0 \frac{d\phi}{dr_{12}} \right] + V_{eff} \phi = \varepsilon \phi \quad (2.58)$$

donde los Jacobianos $J_0(r_{12})$ y $J_1(r_{12})$ presentan la forma siguiente:

$$J_0(r_{12}) = \langle F_0^2 \rangle = 8\pi^2 \int_0^\infty r_1 dr_1 \int_{|r_1-r_{12}|}^{r_1+r_{12}} \left(\frac{\alpha^3 Z^3}{\pi} \right)^2 \exp(-2\alpha Z(r_1 + r_2)) r_2 dr_2$$

$$J_0(r_{12}) = \frac{\alpha^3 Z^3}{4} \left[\frac{(2\alpha Z \beta^2 r_{12}^2 + \beta^2 r_{12}^2 - \alpha^2 Z^2 r_{12}) \sinh(2\beta r_{12}) + \frac{\alpha^2 Z^2 r_{12}^2}{\beta^2} \cosh(2\beta r_{12}) + \frac{1}{3} (4\alpha^2 Z^2 r_{12}^4 + 6\alpha Z r_{12}^3 + 3r_{12}^2)}{2\beta^3} \right] e^{-2\alpha Z r_{12}} \quad (2.59)$$

$$J_1(j_1 z) = F_0 \int_0^1 \frac{1}{r} \frac{1}{(1-r^2)^2} dr = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1-r^2} + \frac{1}{1+r^2} \right] \Big|_0^1 = 1$$

$$J_1(j_1 z) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1-r^2} + \frac{1}{1+r^2} \right] \exp(-2azr) \Big|_0^1 = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1-r^2} + \frac{1}{1+r^2} \right] \exp(-2az) \tag{2.60}$$

potencial efectivo estará dado por

$$V(r) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1-r^2} + \frac{1}{1+r^2} \right] \exp(-2az) \tag{2.61}$$

y la energía total del sistema será

$$E = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{1-r^2} + \frac{1}{1+r^2} \right] \exp(-2az) \tag{2.62}$$

Al igual que en la sección anterior la ecuación (2.58) se resolverá usando el método de barrido trigonométrico.

2.4 Aplicación del procedimiento de Hylleraas en los problemas de trión y D- en disco cuántico

En la presente sección se aplicará el método variacional simple relacionado con el esquema de dimensión fraccionaria para el cálculo de las energías del estado base de algunos sistemas de pocas partículas tales como DO , D^- , X , y X^- confinados en discos cuánticos de $In_yAl_{1-y}As$ / $Al_xGa_{1-x}As$ con potencial de confinamiento del tipo pozo cuadrado y espesor finito, además se hará uso de la aproximación adiabática.

Modelo teórico.

Para analizar el espectro electrónico en discos cuánticos de $In_{0.5}Ga_{0.4}As$ / $Ga_{0.6}Al_{0.3}As$ con altura d y radio R se considerará para el cálculo numérico un modelo con bandas de conducción y de valencia $V_e = 258meV$ y $V_h = 172meV$ (durante esta sección los subíndices e y h corresponden al electrón y al hueco respectivamente). Por conveniencia matemática se usarán los mismos parámetros físicos tanto en el pozo como en la barrera, correspondientes a un sistema de $In_{0.5}Al_{0.4}As$: constante dieléctrica $\epsilon = 12,71$, las masas efectivas son $m_e^* = 0.076m_0$ y $m_h^* = 0.45m_0$. Se trabajará con el radio de Bohr efectivo $a_0^* = \frac{1}{2} \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{m_e^* e^2} = 10.36nm$ y el Rydberg efectivo $Ry^* = \frac{m_e^* e^4}{2E_0 \hbar^2} = 5.47meV$ como unidades de longitud y energía, siendo $f_l = \frac{m_e^* m_h^*}{m_e^* + m_h^*} = 0.065m_0$ la masa efectiva reducida del electrón-hueco.

Típicamente, en discos cuánticos de $InGaAs$ / $GaAlAs$ se tiene que $d / R \ll 1$. Esta condición permite el uso de la aproximación adiabática para separar los movimientos de los portadores en dirección z y en el plano. Como se ha mostrado en el trabajo [44] el problema en 3-D para partículas que interactúan, en este caso puede ser aproximado correctamente por un problema en 2-D en el cual la repulsión (atracción) Coulombiana entre partículas escrita en 3-D en coordenadas esféricas como $e^2 / E_0 r$ debe ser reemplazado por un potencial 2-D

escrito en coordenadas cilíndricas como $e^2 / \varepsilon \sqrt{0.04d^2 + \rho^2}$. Además la altura de la barrera puede ser renormalizada como $\tilde{V}_e = V_e - k_e^2(d, V_e)$ para el electrón y $\tilde{V}_h = V_h - k_h^2(d, V_h)$ para el hueco, donde $k_e^2(d, V_e)$ y $k_h^2(d, V_h)$ son los niveles más bajos de energía en el pozo cuántico de ancho d con potencial rectangular y con las alturas de las barreras V_e y V_h , respectivamente. Es claro que, entre menor es la altura del disco, mayores son los valores de k_i^2 , ($i = e, h$), más bajas son las alturas renormalizadas de las barreras para el electrón y para el hueco, más fuerte es el efecto de la variación del espesor en las propiedades del disco cuántico. Por lo tanto este modelo hablando estrictamente no es bidimensional y tiene parcialmente en cuenta el efecto del espesor. Después se describirá como pueden encontrarse los niveles más bajos de energía del electrón, hueco, donadoras neutra y negativamente cargadas, excitón y trión en un disco cuántico dentro del marco de este modelo.

Movimiento de partículas libres en disco cuántico

Las funciones de onda del estado base para el electrón y el hueco en el disco cuántico $\phi_i(\rho_i)$, $i = e, h$ son soluciones de la ecuación de onda unidimensional:

$$H_{0i}(\rho_i)\phi_i(\rho_i) = E_i\phi_i(\rho_i); \quad H_{0i}(\rho_i) = -\frac{\eta_i}{\rho_i} \frac{d}{d\rho_i} \rho_i \frac{d}{d\rho_i} + \tilde{V}_i(\rho_i); \quad i = e, h; \quad \eta_i = \frac{\mu}{m_i^*}; \quad \tilde{V}_i(\rho_i) = \tilde{V}_i \mathcal{A}(R - \rho_i) \quad (2.63)$$

Como el potencial de estas ecuaciones de onda unidimensionales es constante a trozos, sus soluciones exactas $\phi_e(\rho_e)$ y $\phi_h(\rho_h)$ pueden ser encontradas en forma analítica en términos de funciones cilíndricas y las energías del estado base para el electrón libre, E_e y el hueco libre, E_h pueden calcularse resolviendo la ecuación trascendental correspondiente.

Donadora D^0 descentrada en disco cuántico

Siendo ρ_h el vector posición del ión y ρ_e el vector posición del electrón, el Hamiltoniano adimensional y la ecuación de onda para la donadora D^0 puede escribirse como

$$H_{D^0}(\rho_e, \rho_h) = H_{0e}(\rho_e) - 2\sqrt{0.04d^2 + |\rho_e - \rho_h|^2}; \quad H_{D^0}(\rho_e, \rho_h)\psi_{D^0}(\rho_e, \rho_h) = E_{D^0}(\rho_h)\psi_{D^0}(\rho_e, \rho_h) \quad (2.64)$$

si se escoge la función de onda en la forma;

$$\psi_{D^0}(\rho_e, \rho_h) = \phi_e(\rho_e)\Phi(|\rho_e - \rho_h|) \quad (2.65)$$

la siguiente ecuación diferencial para la función $\Phi(\rho)$ puede obtenerse usando el método de dimensión fractal:

$$-\frac{\eta_e}{J_0(\rho, \rho_h)} \frac{d}{d\rho} J_0(\rho, \rho_h) \frac{d\Phi(\rho)}{d\rho} - \frac{2}{\sqrt{0.04d^2 + \rho^2}} \Phi(\rho) = [E_{D^0}(\rho_h) - E_e] \Phi(\rho) \quad (2.66)$$

donde ρ_h es la distancia de la posición del ión desde el centro del disco y el Jacobiano, $J_0(\rho, \rho_h)$ esta definido como:

$$J_0(\rho, \rho_h) = r \int_0^{2\pi} \phi_e^2 \left(\sqrt{\rho_h^2 + r^2 + 2r\rho_h \cos \varphi} \right) d\varphi \quad (2.67)$$

Además para encontrar la forma como depende la energía de la donadora de la posición del ión, $E_{D^0}(\rho_h)$, la cual será usada después para calcular la energía del excitón, se resuelve la ecuación (2.66) numéricamente usando el método de barrido trigonométrico.

Excitón en disco cuántico

Se asume que tanto para el excitón como para el trión fuertemente confinados en un disco cuántico la aproximación adiabática puede usarse como punto de partida para un análisis cualitativo de estos sistemas complejos, debido al hecho de que la masa efectiva del hueco en $\text{In}_{0.55}\text{Al}_{0.45}\text{As}$ es esencialmente mayor que la masa efectiva del electrón y esta diferencia es más relevante en condiciones donde el confinamiento es fuerte donde el movimiento del hueco llega a ser lento. En esta aproximación el Hamiltoniano del excitón neutro X puede expresarse en términos del Hamiltoniano de la donadora D^0 y escribirse como:

$$H_X = -\frac{\eta_h}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \rho_h \frac{d}{d\rho_h} + \tilde{V}_h(\rho_h) + H_{D^0}(\rho_e, \rho_h) \quad (2.68)$$

Si siguiendo el procedimiento estándar para la aproximación adiabática, se busca una eigenfunción del Hamiltoniano (2.68) en la forma:

$$\psi_X(\rho_e, \rho_h) = \psi_{D^0}(\rho_e, \rho_h) \phi_X(\rho_h) \quad (2.69)$$

donde $\phi_X(\rho_h)$ es una solución de la ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{\eta_h}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \rho_h \frac{d\phi_X(\rho_h)}{d\rho_h} + [\tilde{V}_h(\rho_h) + E_{D^0}(\rho_h)] \phi_X(\rho_h) = E_X \phi_X(\rho_h) \quad (2.70)$$

Para resolver el problema de valores propios (2.70) y encontrar el valor de la energía del excitón E_X se puede hacer uso nuevamente del método de barrido trigonométrico.

Donadora D^- descentrada en disco cuántico

Siendo ρ_h el vector posición del ión y ρ_{e1}, ρ_{e2} los vectores posición de los electrones, el Hamiltoniano y la ecuación de onda para el estado base de la donadora D^- puede ser escrita como:

$$H_{D^-}(\rho_{e1}, \rho_{e2}, \rho_h) = H_{0e}(\rho_{e1}) + H_{0e}(\rho_{e2}) - U_c(|\rho_{e1} - \rho_h|) - U_c(|\rho_{e2} - \rho_h|) - U_c(|\rho_{e1} - \rho_{e2}|) \\ U_c(\rho) = 2/\sqrt{0.04d^2 + \rho^2}; \quad H_{D^-}(\rho_{e1}, \rho_{e2}, \rho_h) \psi_{D^-}(\rho_{e1}, \rho_{e2}, \rho_h) = E_{D^-}(\rho_h) \psi_{D^-}(\rho_{e1}, \rho_{e2}, \rho_h) \quad (2.71)$$

Si se escoge la función de prueba como

$$\psi_{D^-}(\rho_{e1}, \rho_{e2}, \rho_h) = \phi_e(\rho_{e1}) \phi_e(\rho_{e2}) \Phi(|\rho_{e1} - \rho_h|, |\rho_{e2} - \rho_h|, |\rho_{e1} - \rho_{e2}|) \quad (2.72)$$

y se usa para la función envolvente $\Phi(\rho_1, \rho_2, \rho_{12})$ la forma de la representación polinomial de Hylleraas, se puede calcular la función $E_{D^-}(\rho_h)$ siguiendo el procedimiento descrito en el libro [1].

Trión en disco cuántico

Para calcular la energía del estado base del trión X se usó el procedimiento similar al descrito antes para el excitón dentro del marco de la aproximación adiabática, la cual consta de dos pasos. En el primer paso se

resuelve la ecuación de onda para el movimiento rápido de los dos electrones con el congelamiento del hueco, lo cual coincide con una D^- descentrada. Considerando posiciones arbitrarias del hueco se encuentra en este paso la dependencia de la energía de la D^- de la distancia al centro del disco, lo cual en el segundo paso se usará como curva de potencial para el movimiento unidimensional lento del hueco en la dirección radial. El Hamiltoniano para el excitón negativamente cargado X^- en términos del Hamiltoniano de la D^- (2.71) se puede escribir en la forma siguiente:

$$H_{X^-}(\boldsymbol{\rho}_{e1}, \boldsymbol{\rho}_{e2}, \boldsymbol{\rho}_h) = -\frac{\eta_h}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \rho_h \frac{d}{d\rho_h} + \tilde{V}_h(\rho_h) + H_{D^-}(\boldsymbol{\rho}_{e1}, \boldsymbol{\rho}_{e2}, \boldsymbol{\rho}_h) \quad (2.73)$$

Siguiendo el procedimiento estándar para la aproximación adiabática se busca la función del Hamiltoniano como:

$$\psi_{X^-}(\boldsymbol{\rho}_e, \boldsymbol{\rho}_h) = \psi_{D^-}(\boldsymbol{\rho}_{e1}, \boldsymbol{\rho}_{e2}, \boldsymbol{\rho}_h) \phi_{X^-}(\rho_h) \quad (2.74)$$

donde $\phi_{X^-}(\rho_h)$ es la solución de la ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{\eta_h}{\rho_h} \frac{d}{d\rho_h} \rho_h \frac{d\phi_{X^-}(\rho_h)}{d\rho_h} + [\tilde{V}_h(\rho_h) + E_{D^-}(\rho_h)] \phi_{X^-}(\rho_h) = E_{X^-} \phi_{X^-}(\rho_h) \quad (2.75)$$

Unos subniveles diferentes del estado base del X^- correspondientes a energías diferentes del movimiento del hueco en la dirección radial pueden ser analizados resolviendo la ecuación de onda unidimensional (2.75). En estos cálculos se usara de nuevo el método de barrido trigonométrico.

Resultados y discusión

Los resultados de los cálculos para las donadoras neutra y cargada negativamente, así como para el excitón y el trión como función del radio R del disco cuántico de $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$, con dos alturas diferentes, d , 1 nm y 4 nm son presentados en las figuras 10 y 11. Para entender el comportamiento de las curvas presentadas en estas figuras se debe tener en cuenta que el fuerte confinamiento en la dirección z ocasiona un decrecimiento de la altura de la barrera renormalizada para el movimiento lateral desde 47.1Ry* para el electrón y 31.4Ry* para el hueco hasta 26.3 Ry* y 7.3 Ry*, respectivamente en el caso del disco de altura 4 nm y hasta 4.0 Ry* y 0.34 Ry*, respectivamente cuando la altura del disco es 1 nm. Es claro que en ambos casos el efecto del desbordamiento de la función de onda en la región de la barrera se debe al confinamiento en la dirección lateral y además solamente los modelos con barrera de altura finita deben considerarse en este caso.

En la figura 10 se presenta las dependencias de las energías del electrón desacoplado, $E(e^-)$ (línea interrumpida punto), la donadora neutra centrada, $E(D^0)$ (línea interrumpida) y el excitón neutro $E(X)$ (línea sólida) como función del radio del disco cuántico para dos alturas diferentes del disco. También en esta figura se muestra la energía de correlación de los estados acoplados calculados como $E_c(D^0) = E(e^-) - E(D^0)$ para la donadora neutra y como $E_c(X) = E(e^-) - E(X)$ para el excitón neutro la cual puede ser asociada con las energías de enlace de los sistemas correspondientes cuando el radio del disco cuántico tiende a infinito.

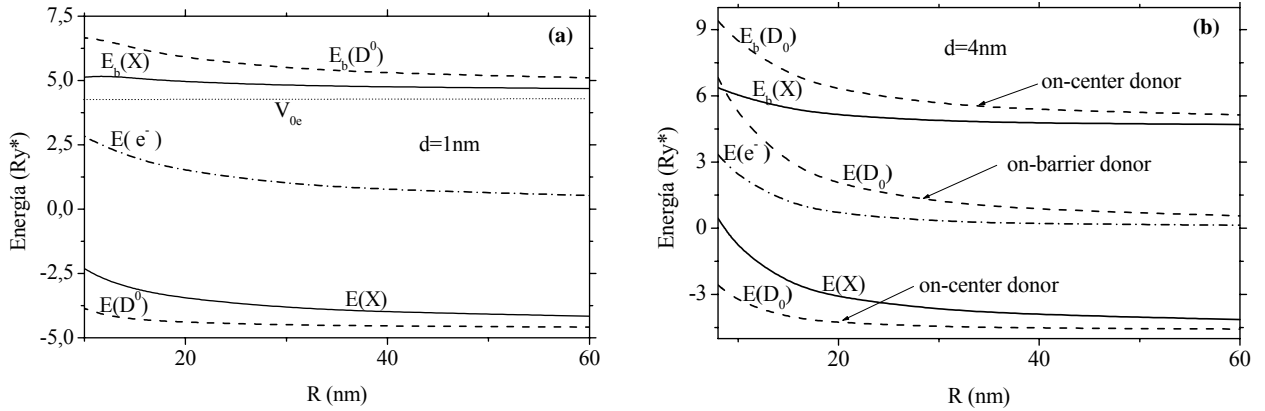


Fig.10 Energías laterales del electrón: 1) En estado desacoplado, e^- (línea interrumpida-punto), 2) Ligado a la donadora D^0 (línea interrumpida) y 3) Ligado al hueco, X (línea sólida) como función del radio del disco cuántico, para dos alturas del disco diferentes: (a) $d=1\text{nm}$ y (b) $d=4\text{nm}$.

La energía de correlación del excitón presentada en la figura 10 tiene un comportamiento asintótico correcto para radios grandes del disco el cual tiende a $4Ry^*$, este es el bien conocido valor de la energía de enlace del excitón libre en 2-D. Debe notarse que la energía de la donadora depende fuertemente de la distancia de la posición de la donadora al eje de simetría del disco cuántico, variando desde el valor correspondiente a la donadora centrada (la más baja de las líneas interrumpidas en la figura) hasta el valor correspondiente al electrón desacoplado (líneas interrumpidas-punteadas) esta distancia de incrementa desde cero hasta infinito. Los niveles electrónicos provistos por las donadoras neutras situadas en diferentes regiones dentro y fuera del disco cuántico forman la banda llenando todos los estados entre las líneas interrumpida e interrumpida-punteada. Como un ejemplo se presenta en la figura 10.b la energía de la donadora neutra en la barrera como función del radio del disco cuántico. Como se ve de la figura 10 el nivel más bajo de energía para el excitón siempre se localiza dentro de la banda llenada por los niveles de energía de la donadora neutra.

Un comportamiento general en todas las curvas de la figura 10 es similar, mientras el radio del disco tiende a cero las energías se incrementan debido a que decrece la separación entre los electrones. Sin embargo en el caso del disco con espesor de 1 nm (figura 1a) se observa que las energías de correlación para la D^0 y para el excitón comienzan a descender cuando el radio del disco se hace menor a 10 nm. Esto se debe al hecho de que la altura de la barrera renormalizada en este caso es muy pequeña y la función de onda se desborda hacia la región de la barrera. Como consecuencia, el carácter bidimensional de las funciones de onda para la donadora y el excitón es restituido y sus energías de correlación comienzan a decrecer tendiendo de nuevo al límite bidimensional, $4Ry^*$. En el caso del disco con espesor de 4 nm la altura de la barrera es esencialmente mayor y el efecto similar es observado para radios del disco muy pequeños ($\approx 3\text{nm}$).

En las figuras 11 se muestran las dependencias de las energías de la donadora centrada cargada negativamente $E(D^-)$ (línea interrumpida), el trión $E(X^-)$ (línea sólida), la donadora neutra centrada con electrón desacoplado, $E(D^0) + E(e^-)$ (línea interrumpida) y el excitón neutro con electrón desacoplado $E(X) + E(e^-)$ (línea sólida)

como función del radio del disco cuántico. También se muestra en estas graficas las energías de correlación de los estados acoplados calculadas como $E_c(D^-) = E(e^-) + E(D^0) - E(D^-)$ para la donadora centrada cargada negativamente y como $E_c(X^-) = E(e^-) + E(X) - E(X^-)$ para el trión las cuales pueden ser asociadas con las energías de enlace de los sistemas correspondientes cuando el radio del disco cuántico tiende a infinito.

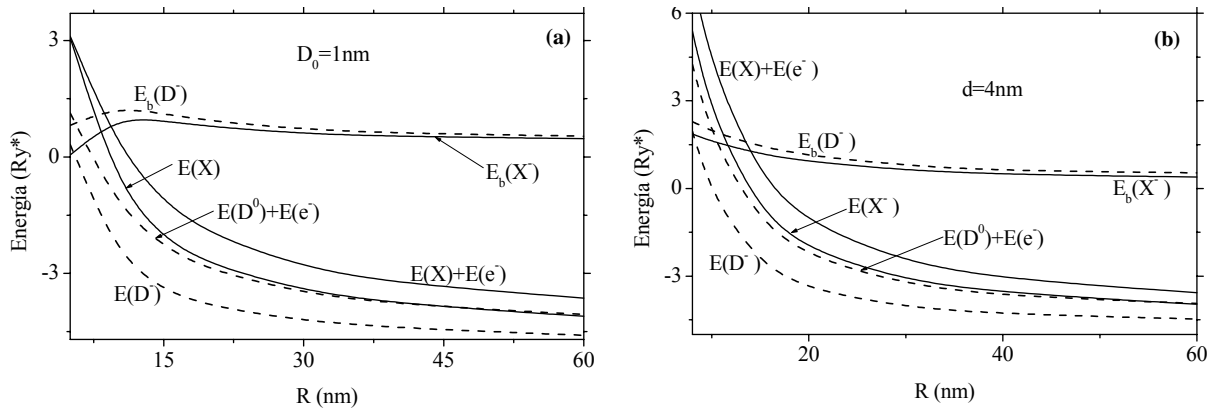


Fig.11 Las energías laterales de la donadora cargada negativamente, D^- y el trión como funciones del radio del disco cuántico son comparadas con las energías respectivas de la donadora neutra D^0 y el excitón, X con electrón desligado, para alturas del disco de 1nm (a) y 4nm (b).

La energía de correlación para el X^- presentada en la figura 11 tiene un comportamiento asintótico correcto para radios grandes del disco la cual tiende a $0.48Ry^*$, el bien conocido valor de la energía de enlace del átomo de hidrógeno en 2-D [40]. Similarmente para el caso de la donadora neutra, la energía de la donadora cargada negativamente también depende fuertemente de la distancia de la posición de la donadora al eje de simetría del disco cuántico, variando desde el valor correspondiente a la donadora centrada (la línea interrumpida más baja en las figuras) hasta el valor correspondiente a la suma de las energías de la donadora neutra y el electrón desacoplado (líneas sólidas) cuando esta distancia se incrementa desde cero hasta infinito. Los niveles electrónicos provistos por donadoras cargadas negativamente situadas en diferentes regiones dentro y fuera del disco cuántico forman la banda llenada por todos los estados entre la línea interrumpida más baja y la línea sólida más baja. Como puede verse en la figura 11 el nivel de energía más bajo siempre está localizado dentro de la banda ocupada por los niveles de energía de la donadora cargada negativamente. El comportamiento de las curvas de las energías de correlación de la donadora cargada negativamente y el trión en la figura 11 es similar al de la donadora neutra y el excitón en esta misma figura.

2.5 Aplicación del procedimiento de Hylleraas en los problemas de trión y D- en anillo cuántico

Se presenta el cálculo variacional de las energías del estado base de un trión, X- y de una donadora negativamente cargada, D- en anillos cuánticos de $In_xAl_{1-x}As/Al_xGa_{1-x}As$. La energía para el estado base del trión es calculada dentro del esquema de la aproximación adiabática, lo cual nos permite desacoplar el movimiento rápido de los electrones alrededor del hueco del movimiento lento del hueco en la dirección radial. La ecuación de onda para el movimiento rápido de los dos electrones con el hueco congelado, en esta aproximación coincide con la de ecuación para una donadora centrada.

Para analizar el espectro electrónico en anillos cuánticos de $In_xAl_{1-x}As/Al_xGa_{1-x}As$ con altura d_0 , con radio exterior e interior R_j y R_e respectivamente, se consideró un modelo con los mismos parámetros físicos utilizados para el problema del disco de la sección anterior. Este modelo estrictamente hablando no es bidimensional y toma en cuenta parcialmente el efecto del espesor. Para calcular la energía del estado base del trión X- se usó el procedimiento conocido como aproximación adiabática, el cual consta de dos pasos. En el primer paso se asume que el movimiento del hueco es mucho más lento que el de cualquiera de los electrones; se resuelve entonces la ecuación de onda solamente para el movimiento rápido de los dos electrones con el hueco congelado. La correspondiente ecuación de onda en este caso coincide con la de una donadora D- centrada. Considerando posiciones arbitrarias del hueco se encuentra en este paso la dependencia de la energía de la D con respecto a la distancia del centro del anillo, la cual en el segundo paso se usará como curva de potencial para el movimiento unidimensional lento del hueco en la dirección radial. El Hamiltoniano del excitón cargado negativamente X-, el cual se analiza en este paso puede ser escrito en términos del Hamiltoniano de la D como:

$$H_{X-}(P_e, P_2, P_h) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dP_e^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dP_2^2} + V_h(P_h) + H_{D-}(P_e, P_2, P_h) \quad (2.76)$$

Siguiendo el procedimiento estándar de la aproximación adiabática se propone la función propia del Hamiltoniano (2.76) como:

$$\psi_{X-}(P_e, P_2, P_h) = \psi_{D-}(P_e, P_2, P_h) \chi_{X-}(P_h) \quad (2.77)$$

donde $\chi_{X-}(P_h)$ es la solución de la ecuación de onda unidimensional:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_h} \frac{d^2 \chi_{X-}(P_h)}{dP_h^2} + [V_h(P_h) + E_{D-}(P_h)] \chi_{X-}(P_h) = E_{X-} \chi_{X-}(P_h) \quad (2.78)$$

Algunos subniveles diferentes del estado base del X- correspondientes a energías diferentes del movimiento del hueco en la dirección radial pueden ser analizados resolviendo la ecuación de onda unidimensional (2.75). En estos cálculos se usará de nuevo el método de banido trigonométrico.

Resultados y discusión

Los resultados de los cálculos para la donadora cargada negativamente, así como para el trión como función del radio exterior, R_e del anillo cuántico de $\text{In}_{0.55}\text{Ga}_{0.45}\text{As}/\text{Ga}_{0.65}\text{Al}_{0.35}\text{As}$, con dos alturas diferentes, d_o , 1 nm y 4 nm son presentados en las figuras 12 y 13. Para entender el comportamiento de las curvas presentadas en estas figuras se debe tener en cuenta que el fuerte confinamiento en la dirección z ocasiona un decrecimiento de la altura de la barrera renormalizada para el movimiento lateral desde 47.1Ry^* para el electrón y 31.4Ry^* para el hueco hasta 26.3 Ry^* y 7.3 Ry^* , respectivamente en el caso del anillo de altura 4 nm y hasta 4.0 Ry^* y 0.34 Ry^* , respectivamente cuando la altura del anillo es 1 nm. Es claro que en ambos casos el efecto del desbordamiento de la función de onda en la región de la barrera se debe al confinamiento en la dirección lateral y además solamente los modelos con barrera de altura finita deben considerarse en este caso.

En las figuras 12 se muestran las dependencias de las energías de la donadora centrada cargada negativamente $E(D^-)$ (línea interrumpida), el trión $E(X^-)$ (línea sólida), la donadora neutra centrada con electrón desacoplado, $E(D^0) + E(e^-)$ (línea interrumpida) y el excitón neutro con electrón desacoplado $E(X) + E(e^-)$ (línea sólida) como función del radio exterior del anillo cuántico

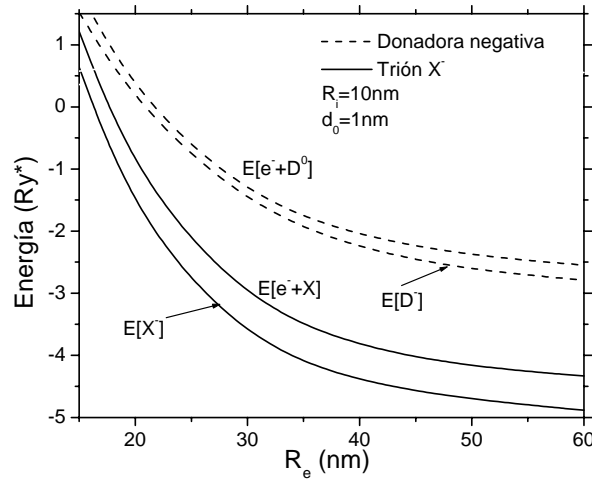


Fig.12 Las energías laterales de la donadora cargada negativamente, D^- y el trión como funciones del radio exterior del anillo cuántico son comparadas con las energías respectivas de las donadora neutra D^0 y el excitón, X con electrón desligado.

Se ve que tanto la energía de la donadora cargada negativamente y la del trión decrecen suavemente conforme se incrementa el radio exterior, siendo siempre más bajas que las energías de los correspondientes sistemas desligados. También se muestra en estas graficas las energías de correlación de los estados acoplados calculadas como $E_c(D^-) = E(e^-) + E(D^0) - E(D^-)$ para la donadora centrada cargada negativamente y como $E_c(X^-) = E(e^-) + E(X) - E(X^-)$ para el trión. Las energías de correlación definidas de tal forma pueden ser asociadas con las energías de enlace de los sistemas correspondientes cuando el radio exterior del anillo cuántico tiende a infinito y el radio interior tiende a cero. Los resultados de los cálculos para la energía de correlación en anillos cuánticos con radio interior de 10nm y espesores de 1nm y 4nm son presentados en la figura 13. Se ve de

la figura 13 que la energía de correlación para el X^- presenta un comportamiento asintótico correcto para radios exteriores grandes del anillo, la cual tiende a $0.48Ry^*$, el bien conocido valor de la energía de enlace del átomo de hidrógeno en 2-D [40].

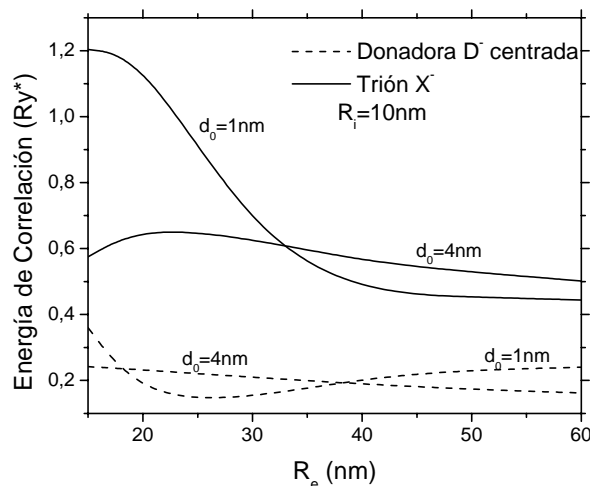


Fig.13 Las energías de correlación de la donadora cargada negativamente, D^- y el trión como funciones del radio exterior del anillo.

También, se ve que la energía de correlación de la donadora D^- centrada siempre es más baja que la del trión para cualquier valor del radio externo. Lo anterior se debe al hecho de que la donadora tenga la carga positiva localizada dentro de la región central repulsiva del anillo, región que solo es accesible para los electrones cuando el confinamiento es muy fuerte. El comportamiento diferente de las curvas correspondientes a anillos con espesores de 1nm y 4nm es debido a las acciones recíprocas de los efectos de tunelamiento en la región central, confinamiento e interacciones electrostáticas entre las partículas.

CONCLUSIONES

El método de diferencias finitas a pesar de tener la ventaja de ser un método sencillo de aplicar en la solución de la ecuación de Schrödinger, puede llegar a resultar ineficiente si no se tiene ciertos cuidados. Es importante tener en cuenta dichos cuidados si se quiere tener cierto grado de confianza en los resultados que se obtengan. Dentro de los cuidados más importantes a considerar se tienen: notable dependencia que presenta la exactitud de los resultados respecto a las condición de frontera en el infinito (r_{\max}); aparición de algunos valores que no son solución del problema real analizado; error implícito de orden dos en el método, dependencia de los resultados con respecto a la forma que tome la ecuación de Schrödinger después de realizar algún cambio de variable.

En la elección del tipo de malla óptimo a usar para el método de diferencias finitas se debe tener en cuenta el Jacobiano que presente la ecuación de Schrödinger. Por ejemplo para el caso de una ecuación que presente Jacobiano igual a uno, la malla óptima será la equidistante, mientras para un problema con Jacobiano diferente de uno se deberá emplear una malla no equidistante, si se quiere mejorar los resultados.

El algoritmo de Numerov a pesar de tener un error implícito mucho menor que el esquema sencillo de diferencias finitas, presenta una gran sensibilidad a las condiciones de frontera. Motivo por el cual se debe tener especial cuidado cuando se definan los elementos matriciales para los nodos extremos, puntos donde entran a jugar las condiciones de frontera.

El método de dimensión fractal presenta una mayor eficiencia con respecto al método variacional tradicional, tanto por la forma de buscar una función de prueba óptima, como por la reducción de los cálculos para potenciales de confinamiento anisotropicos.

En este trabajo se presenta un método simple unificado para calcular las energías de las donadora neutra y cargada negativamente, así como para un excitón y un trión confinados en un disco o en un anillo cuántico autoensamblado, lo cual permite analizar el efecto del espesor del disco sobre las propiedades electrónicas de sistemas de pocas partículas. Se muestra que solamente los modelos bidimensionales con barrera de altura finita están justificados en el análisis del espectro de sistemas confinados en discos cuánticos autoensamblados.

Este trabajo dio lugar a dos ponencias, una nacional en la VI Escuela Nacional de Física de la Materia Condensada, Medellín, 2004; y una internacional en el XVII Simposio Latino Americano De Física Del Estado Sólido (SLAFES) 2004, La Habana, Cuba.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of one- and two-Electron Atoms* (Springer- Verlag, Berlin, 1957)
- [2] D. Campos, *Fundamentos de Física Atómica y Molecular* (Editorial universidad nacional, 1997)
- [3] S. Chandrasekhar, *J. Astrophys.* **100**, 176 (1944)
- [4] D. R. Herschbach, J. A. Very and O. Goscinski, *Dimensional Scaling in Chemical Physics*, (Kluwer Academic Publishers)
- [5] P. A. Maksym and T. Chakraborty, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 108 (1990)
- [6] J. L. Zhu, D. L. Lin y Y. Kawazoe, *Phys. Rev. B.* **54**, 16786 (1996)
- [7] N. P. Sandler and C. R. Proetto, *Phys. Rev. B.* **46**, 7707 (1992)
- [8] J. L. Marin and S. A. Cruz, *J. Phys. B: Mol. Opt. Phys.* **25**, 4365 (1992)
- [9] M. El-Said, *J. Phys. (France)* **5**, 1027 (1995)
- [10] T. Pang and S. G. Louie, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 1635 (1990)
- [11] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Rev. B.* **67**, 115317 (2003)
- [12] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Stat. Sol. (b)* **234**, 590 (2002)
- [13] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía and J. Sierra, *Phys. Stat. Sol. (c)* **0**, **747** (2003)
- [14] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur and L. F. García, *Phys. Stat. Sol. (b)* **224**, 757 (2001)
- [15] W. Xie, *Phys. B.* **315** (2002) 117-122
- [16] W. Y. Ruan, K. S. Chan and E. Y. B. Pun, *J. Phys: Condens. Matter.* **13**, (2001) 1329-1335
- [17] C. Busser and C. R. Proetto, *J. Phys: Condens. Matter.* **8**, (1996) L131-L138
- [18] J. L. Zhu, J. Z. Yu, Zhi-Qiank Li and Y. Kawazoe, *J. Phys: Condens. Matter.* **8**, 7857(1996)
- [19] I. D. Mikhailov and F. J. Betancur, *Phys. Stat. Sol. (b)* **213**, 325 (1999)
- [20] R. L. Greene, K. K. Bajaj and E. D. Phelps, *Phys Rev. B* **29**, 4 (1983)
- [21] G. Bastard, E.E. Méndez, L.L. Chang, and L. Esaki. *Phys Rev. B* **26**, 4 (1982)
- [22] S. Le Goff and B. Stébé, *Phys. Rev. B* **47**, 1383 (1993)
- [23] F. M. Peeters, K. L. Janssens and V. A. Schweigert, *Phys. Rev. B.* **63**, 205311 (2001)
- [24] G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981)
- [25] G. Bastard, L. E. Mendez, L. L. Chang y L. Esaki, *Phys. Rev. B* **26**, 1974 (1982)
- [26] W. T. Masselink, Y. C. Chang y H. Morkoç, *Phys. Rev. B* **28**, 7373 (1983)
- [27] L. E. Oliveira y L. M. Falicov, *Phys. Rev: B* **34**, 8676 (1986)
- [28] R. L. Greene y K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* **37**, 4604 (1988)
- [29] M. Ciurla, J. Adamoski, B. Szafran, S. Bednarek. *Phys. Rev. E* **15** 261 (2002)
- [30] J. L. Zhu, Xi Chen, *Phys. Rev. B* **50**, 4497 (1994)
- [31] D. R Herrick and F. H. Stillinger. *Phys. Rev. A* **11**, 42 (1975)
- [32] F. H. Stillinger, *J Math. Phys. Rev. B* **18**, 1224 (1977)
- [33] P. Lefebvre, P. Christol and H. Mathieu, *Phys. Rev. B* **48**, 17308 (1993); **46**, 4092 (1992)

- [34] E. Reyes-Gomes, L. E. Oliveira and M. de Dios-Leyva, *J. Appl. Phys.* **85**, 4045 (1999)
- [35] F. Domínguez-Adame, *Electrones en Heteroestructuras Semiconductoras*, pag. 35
- [36] S. E. Koonin, *Computational Physics*, (AddisonWesley Publishing Company, Inc., 1986)
- [37] S. Nakamura, *Métodos Numéricos Aplicados con Software*, (Prentice-Hall Hispanoamericana S.A, 1992)
- [38] D. E. Phelps and K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* **26**, 912 (1982)
- [39] X-F. He, *Phys. Rev. B* **42**, 11751 (1990)
- [40] F. H. Stillinger, *J. Math. Phys.* **18**, 1224 (1977)
- [41] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, (W. H. Freeman & Co, San Francisco 1988)
- [42] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira, *J. Appl. Phys. D*, **31** 3391 (1998)

BIBLIOGRAFIA

ABRAMOWITZ, Milton and STEGUN, Irene A. Handbook of mathematical functions with formulas graphs and tables. U. S. Department of Commerce National Bureau of Standard Applied Mathematics series 55, Junio de 1964. 331-433, 555-566.

BETHE H, A. and SALPETER, E. E, Quantum Mechanics of one- and two-Electron Atoms. Springer- Verlag, Berlin, 1957. 118-170

BUSSER, C and PROETTO, C. R. J. Phys: Condens. Matter. 8, (1996) L131-L138

CAMPOS, Diógenes, Fundamentos de Física Atómica y Molecular. Editorial universidad nacional, 1997. 235-267.

KOONIN, S. E. Computational Physics. AddisonWesley Publishing Company, Inc., 1986.

MAKSYM, A and CHAKRABORTY, T. Phys. Rev. Lett. 65. (1990). 108

MARIN, J.L and CRUZ, S. A. J. Phys. B: Mol. Opt. Phys. 25, (1992). 4365

MIKHAILOV, I. D; BETANCUR, F. J; ESCORCIA, R. A. and SIERRA, J. Phys. Rev. B. 67, (2003). 115317

MIKHAILOV, I. D; BETANCUR, F. J; ESCORCIA, R. A. and SIERRA, J. Phys. Stat. Sol. (b) 234, (2002). 590

MIKHAILOV, I. D; BETANCUR, F. J; ESCORCIA, R. A. and SIERRA, J. Phys. Stat. Sol. (c) 0, (2003). 747

MIKHAILOV, I. D; BETANCUR, F. J and GARCIA, L. F., Phys. Stat. Sol. (b) 224, (2001). 757

MIKHAILOV, I. D and BETANCUR, F. J. Phys. Stat. Sol. (b) 213, (1999). 325

NAKAMURA, S. Métodos Numéricos Aplicados con Software. Prentice-Hall Hispanoamericana S.A, 1992. 274-288, 351-360.

PANG, T and Louie, S. G. Phys. Rev. Lett. 65, (1990). 1635

PEETERS, F. M; JANSSENS, K.L and SCHWEIGERT, V.A. Phys. Rev. B. 63, (2001). 205311

PHELPS, D. E and BAJAJ, K. K. Phys. Rev. B 26, (1982). 912

RUAN, W. Y; CHAN, K. S and PUN, E. Y. J. Phys: Condens. Matter. 13, (2001) 1329-1335

SANDLER, N. P. and Proetto, C. R. Phys. Rev. B. 46, (1992). 7707

XIE, W. Phys. B. 315 (2002) 117-122

ZHU, J. L; LIN, D. L and KAWAZOE, J. Phys. Rev. B. 54, (1996). 16786

ZHU, J. L; YU, J.Z; ZHI-QIANK LI and KAWAZOE, Y. J. Phys: Condens. Matter. 8, (1996). 7857