

CÁLCULOS DE LOS NIVELES ASOCIADOS A UNA DONADORA
CERCANA A UNA INTERFASE Si/SiO_2

ELBER RODRÍGUEZ MORENO

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA

2009

**CÁLCULOS DE LOS NIVELES ASOCIADOS A UNA DONADORA
CERCANA A UNA INTERFASE Si/SiO_2**

Trabajo de Grado como requisito para optar el título de Físico:

ELBER RODRÍGUEZ MORENO

Director:

Dr. CARLOS LEONARDO BELTRÁN RÍOS



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

2009

*Dedico este trabajo a mis padres
quienes me han apoyado sin condiciones
durante toda mi vida.*

A mis hermanos y toda mi familia.

A mis amigos y compañeros de estudio.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi familia por todo el apoyo dado, a mi director de proyecto y a todos los profesores de la carrera de Física, a los integrantes de los grupos de CIMBIOS, GOTS Y FICOMACO por la gran ayuda que me brindaron, a mis amigos y compañeros de la carrera y en general a todas las personas quienes en gran o menor medida contribuyeron a dar forma a este trabajo .

ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN	1
2. GENERALIDADES	6
2.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	8
3. MODELO TEÓRICO	10
3.1. Hamiltoniano para la impureza en unidades efectivas	10
3.2. Ecuación de Schrödinger para el sistema	13
4. MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO PARA EL SISTEMA	18
4.1. Planteamiento	18
4.2. Aplicación de Barrido trigonométrico	20
5. ESPECTRO ENERGÉTICO	22

5.1. Potencial efectivo para el sistema:	23
5.2. Niveles Energéticos.	30
5.3. Efecto de la distancia d sobre la energía del sistema.	30
5.4. Efecto del campo eléctrico F sobre la energía del sistema.	33
 CONCLUSIONES	 35
 APÉNDICE	 36
 REFERENCIAS	 43

ÍNDICE DE FIGURAS

1.1. <i>Energía E_ρ en función de la distancia d</i>	2
2.1. <i>Estructura cristalina del Silicio</i>	6
2.2. <i>Estructura de bandas del Silicio</i>	7
2.3. <i>Donadora D^0 embebida en un material de Si en presencia de un campo eléctrico</i>	8
2.4. <i>Esquema del potencial efectivo de la impureza cerca de la interface al aplicar el campo eléctrico</i>	9
5.1. <i>Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de d y $F = 5kV/cm$.</i>	23
5.2. <i>Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de d y $F = 13,5kV/cm$.</i>	24
5.3. <i>Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de d y $F = 20kV/cm$.</i>	25
5.4. <i>Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de F y $d = 15nm$.</i>	26
5.5. <i>Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de F y $d = 20nm$.</i>	27

5.6. Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de F y $d = 30\text{nm}$.	27
5.7. Potencial efectivo en función de ρ y d .	28
5.8. Potencial efectivo en función de ρ y F .	29
5.9. Energía de la D^0 para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ en función de la distancia d .	31
5.10. Energía de la D^0 para los estados $1p$, $2p$ y $3p$ en función de la distancia d .	32
5.11. Energía de la D^0 para los estados $1d$, y $2d$ en función de la distancia d .	32
5.12. Energía de la D^0 para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ en función del campo eléctrico F .	33
5.13. Energía de la D^0 para los estados $1p$, $2p$ y $3p$ en función del campo eléctrico F .	34
5.14. Energía de la D^0 para los estados $1d$, $2d$ y $3d$ en función del campo eléctrico F .	34

ÍNDICE DE TABLAS

5.1. <i>Nomenclatura para los niveles electrónicos</i>	30
--	----

NOTACIÓN

En este trabajo para efectos de programación se utilizó la adimensionalidad de las unidades efectivas. Y para conversión de unidades se eligió como unidad de longitud: Nanómetros (nm), como unidad de energía: Miliielectronvoltios (meV) y el campo eléctrico se expresa en kilovoltios por centímetro (kV/cm).

A continuación se dará una lista con la notación empleada y mencionada en el desarrollo del trabajo para los parámetros utilizados:

AME	:	<i>Aproximación de masa efectiva</i>
D^0	:	<i>Impureza donadora neutra</i>
m	:	<i>Masa del electrón libre</i>
F	:	<i>Campo eléctrico</i>
ε	:	<i>Constante dieléctrica del material</i>
a_0^*	:	<i>Radio de Bohr efectivo</i>
Ry^*	:	<i>Rydberg efectivo</i>
Δ	:	<i>Laplaciano</i>

TÍTULO : CÁLCULOS ASOCIADOS A UNA DONADORA CERCANA A UNA INTERFASE DE Si/SiO_2 *.

AUTOR : Rodríguez Moreno Elber **.

PALABRAS CLAVES : Donadora, Espectro energético, Energía de enlace, Barrido Trigonométrico.

RESUMEN : En el siguiente trabajo se analizo los niveles de energía asociados a una donadora cerca de una interfase de Si/SiO_2 . El análisis se ejecuto en el esquema de aproximación de la masa efectiva y los cálculos se realizaron mediante procedimientos numéricos y computacionales para resolver el problema de Schrödinger, mediante el principio variacional de Schrödinger.

En particular se estudio el comportamiento del nivel base en la presencia de un campo eléctrico constante en la dirección perpendicular a la interfase.

Este sistema debido a que la interfase se puede modelar mediante un potencial con confinamiento infinito y al aplicar un campo eléctrico se genera un sistema de doble pozo con el potencial de la impureza donadora.

Se encontró una dependencia del potencial efectivo con el campo eléctrico aplicado y la distancia entre la interfase de Si/SiO_2 y la impureza donadora, haciendo que el pozo de potencial sea menos profundo cuando se aleja la impureza de la interfase y el campo eléctrico aumenta. También se encontró una dependencia de la energía de enlace y el campo eléctrico aplicado, como de la distancia entre la impureza donadora y la interfase, haciendo que estos niveles de energía suban a medida que los valores de campo y distancia aumentan.

*Proyecto de Grado

**Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Director)

TITLE : calculations associated with a donor nearest to an interface of Si/SiO_2 *.

AUTHORS : Rodríguez Moreno Elber ; **.

KEY WORDS : Donor, Energy spectrum, Binding energy, Trigonometric sweep.

DESCRIPTION : In this work, we analyze the energy levels associated with a donor near a Si/SiO₂ interface. The analysis was run in the scheme of the effective mass approximation and the calculations were performed using numerical and computational procedures to solve the problem of Schrödinger, using the Schrödinger variational principle.

In particular, study the behavior of the base level in the presence of a constant electric field in the direction perpendicular to the interface.

This system because the interface can be modeled by an infinite confinement potential and applying an electric field generated a double well potential with the donor impurity.

We found a dependence of effective potential with the applied electric field and the distance between the Si/SiO_2 interface and impurity donor, making the potential well is shallower. We also found a dependence of the binding energy and the applied electric field, as well as the distance between the donor impurity and interface, making these energy levels rise.

*Senior thesis project.

**Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Director)

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas el Si dopado ha sido utilizado en innumerables aplicaciones dando adelantos científicos y tecnológicos importantes. El estudio de las estructuras de baja dimensionalidad con fines de mejorar la calidad de los dispositivos electrónicos y optoelectrónicos en estos materiales ha crecido en los últimos años, se han estudiado sistemas como puntos e hilos de tamaño nanométrico [1]–[9]. Últimamente ha sido de gran interés las estructuras de hilos y puntos en la computación cuántica, debido a sus propiedades de escalabilidad y el gran tiempo de coherencia que posee el spin asociados a impurezas con las que se dopa el material, lo que lo convierte en un candidato excelente para Qubits (bits cuánticos). Un Qubit es la unidad mínima de la información cuántica, esta información puede representarse mediante el estado de un sistema cuántico binario como el spin electrónico [10]–[12].

Los semiconductores usados en la fabricación de nano-hilos pueden ser de diferentes grupos periódicos, especialmente grupos *III* y *V* [15, 16] sin embargo en la actualidad se han venido estudiando nano-hilos hechos de semiconductores del grupo *IV*, en concreto el Silicio [17, 18, 19], debido a la gran utilidad que ha tenido éste elemento en la microelectrónica y a su abundancia en la naturaleza, también se ha estudiado su

comportamiento con campos magnéticos[15, 20] donde se han observado los efectos del campo magnético sobre valores como el factor de Lande g y la fuerza del oscilador. Se han planteado diferentes aplicaciones, desde modelos para poder ser utilizados como interconexiones entre diferentes componentes, o también funcionar directamente como zona activa de un dispositivo [21, 22, 23], hasta su posible uso en aplicaciones para la computación cuántica [24].

Calderón et al. [7] muestran, mediante un estudio teórico, como se puede manipular la carga de impurezas donadoras en Si , con un campo eléctrico aplicado, para ser usados en computación cuántica, utilizan en este trabajo una función de prueba con un solo parámetro variacional. En un posterior trabajo [3] este mismo autor estudia la posibilidad del uso de un D^{2-} para el control de carga en Si dopado, en este trabajo teórico ellos observan que el primer estado excitado es un mejor candidato para su uso en computación cuántica, además analizaron la presencia de una impureza de Fósforo (P) cercana a la interfase Si/SiO_2 para el uso en computación cuántica. Los estudios realizados por Calderón et al. les ha llevado proponer una arquitectura real de un computador cuántico [1] en la cual se manipula la carga de una impureza D^0 que se halla cerca a la interfase en una estructura de Si/SiO_2 , uno de los resultado obtenidos por ellos en este trabajo se observa en la grafica 1.1.

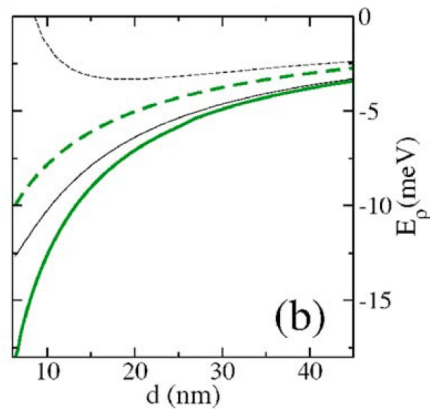


figura 1.1: Energía E_p en función de la distancia d .

En la figura 1.1 se observa la energía E_ρ en función de la distancia d entre la donadora y la interfase de Si/SiO_2 , para el estado base (línea continua) y primer estado excitado (línea trazos); las líneas a color corresponden al potencial de la impureza cerca a la interfase y las líneas oscuras corresponden a una aproximación parabólica del mismo. También han surgido otras propuestas de otros autores en las cuales se plantea la manipulación del spin nuclear de isótopos de Si y Ge como base para la computación cuántica [12].

En el grupo de investigación de física computacional de materia condensada (FICOMACO), de la Escuela de Física en la Universidad Industrial de Santander, se ha trabajado los sistemas de baja dimensionalidad en materiales semiconductores de $GaAs$, $InAs$. Recientemente se ha estudiado puntos cuánticos de diferentes geometrías dopados con impurezas D^0 [25] y super-redes de nano-hilos [26]. En estos trabajos se ha utilizado el método de la aproximación adiabática y se ha utilizado el principio variacional de Schrödinger. Con este trabajo queremos ampliar la gama de materiales de estudio al Si debido a los recientes propuestas teóricas y resultados experimentales en el uso de este material clásico. Esto también plantea nuevos elementos a tener en cuenta en los cálculos debido a las características propias del mismo que difieren de los anteriores materiales trabajados.

GENERALIDADES

El Silicio es un semiconductor; su resistividad a la corriente eléctrica a temperatura ambiente varía entre la de los metales y la de los aislantes. La conductividad del Silicio se puede controlar añadiendo pequeñas cantidades de impurezas llamadas dopantes. La capacidad de controlar las propiedades eléctricas del Silicio y su abundancia en la naturaleza han posibilitado el desarrollo y aplicación de los transistores y circuitos integrados que se utilizan en la industria electrónica.

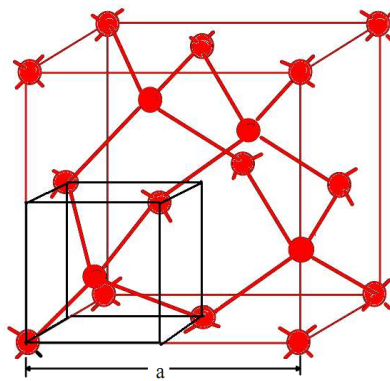


figura 2.1: *Estructura cristalina del Silicio*

Como podemos observar en el dibujo 2.1, el átomo de Silicio presenta enlaces covalentes, esto quiere decir que cada átomo está unido a otros cuatro átomos y compartiendo sus

electrones de valencia. Es así, porque de otra manera el Silicio no tendría el equilibrio en la capa de valencia, necesita 8 electrones para su estabilidad. El enlace covalente lo forman todos los elementos del grupo *IV* de la tabla periódica, al cual pertenece el Silicio. Al aplicarle energía externa, ya sea de calor o de luz, se rompen los enlaces quedando un electrón libre por cada enlace roto, pero a su vez, se tiene un hueco vacío, el que ocupaba el electrón. De esta forma se obtiene corriente eléctrica, por el movimiento de los electrones hacía los potenciales positivos y del movimiento de los huecos hacía los potenciales negativos. Esto sucede así siempre que se utiliza al Silicio como un semiconductor intrínseco. Cuando queremos usar el Silicio como semiconductor extrínseco, se colocan impurezas en el enlace covalente, lo cual hace que sea más fácil ganar o perder un electrón.

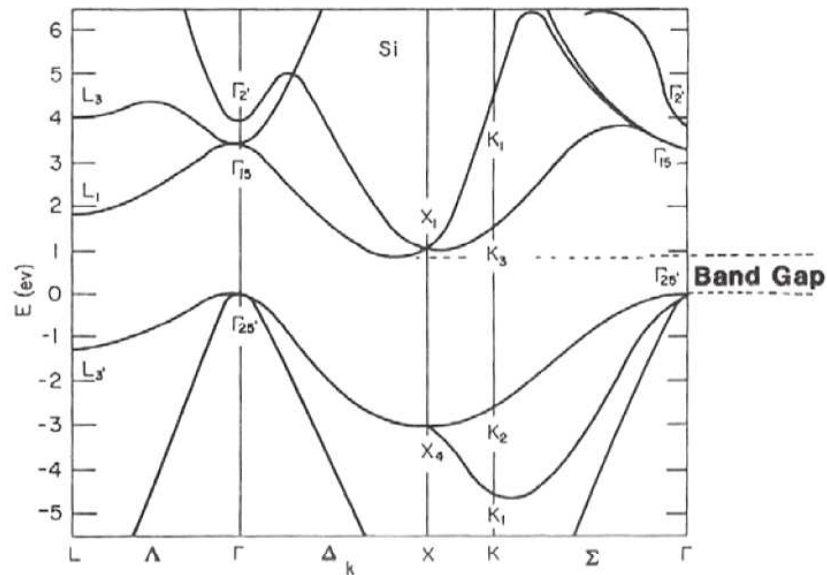


figura 2.2: Estructura de bandas del Silicio

En su estructura de bandas el Silicio es un material de brecha indirecta. El Silicio tiene la misma estructura cristalina que el diamante y cualitativamente la estructura de bandas

es similar. Sin embargo la banda de energía prohibida, E_g , de aproximadamente $1eV$, es muy inferior al diamante y de ahí sus importantes propiedades semiconductoras. En la estructura de bandas del silicio se observa que el tope de la Banda de Valencia corresponde al punto Γ , mientras que la base de la Banda de Conducción esta desplazada en el espacio k . La consecuencia es que las transiciones ópticas para energías en este *band gap* no pueden ocurrir por conservación de momento a menos que se cree o desaparezca un fonón (están acopladas a la vibración de la red).

2.1 PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En este trabajo se considera una impureza donadora neutra que se ubica a una distancia d de una interface de Si/SiO_2 , la cuál ha sido crecida en la dirección cristalina (0,0,1) [3, 4, 7]. Consideramos un campo eléctrico aplicado en la dirección perpendicular a la interface, como se observa en la siguiente figura.

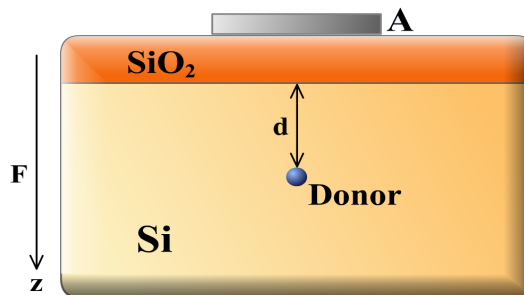


figura 2.3: Donadora D^0 embebida en un material de Si en presencia de un campo eléctrico

Al aplicar el campo eléctrico a la donadora que se encuentra cerca de la interfase Si/SiO_2 el potencial al que están sometidos los portadores en dirección z presenta la forma que se muestra en la figura a continuación:

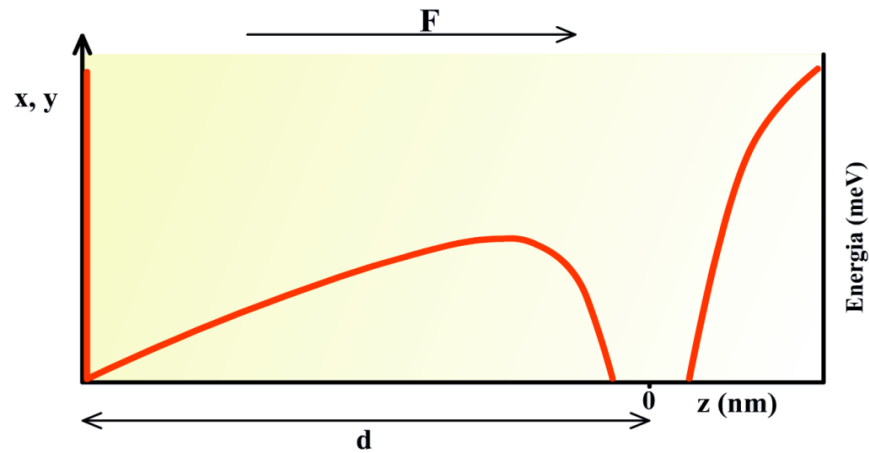


figura 2.4: Esquema del potencial efectivo de la impureza cerca de la interface al aplicar el campo eléctrico

En la gráfica anterior se ha dibujado un esquema del potencial de confinamiento del electrón asociado a la D^0 a lo largo de la dirección z . El origen del sistema de coordenadas se ha ubicado sobre la impureza D^0 . Se observa de acuerdo con la gráfica que a lo largo de la dirección z se forma un doble pozo cuántico para el electrón, asociado al campo eléctrico y a la interacción de coulomb

En este trabajo se considerara el Hamiltoniano dado por la 3.1, se utilizara el método variacional de Schrödinger y, el método de barrido trigonométrico para estudiar el comportamiento de los niveles de energía con la distancia de la impureza a la interface y con el campo eléctrico aplicado.

MODELO TEÓRICO

3.1 Hamiltoniano para la impureza en unidades efectivas

El planteamiento teórico para una impureza cercana a una interfase de Si/SiO_2 se ha hecho bajo la aproximación de masa efectiva, aproximación utilizada por primera vez en el trabajo de Bastard para el estudio de una donadora en un pozo cuántico [13].

El Hamiltoniano para una impureza donadora en presencia de un campo Eléctrico F para el sistema, tal como se ilustra en la figura 2.3, esta dado por

$$H = T + eFz + -\frac{e^2}{\epsilon_{Si}r} + \frac{e^2Q}{\epsilon_{Si}\sqrt{\rho^2 + (z + 2d)^2}} - \frac{e^2Q}{4\epsilon_{Si}(z + d)}. \quad (3.1)$$

En donde,

$$\begin{aligned} \rho^2 &= x^2 + y^2 \\ Q &= \frac{\varepsilon_{SiO_2} - \varepsilon_{Si}}{\varepsilon_{SiO_2} + \varepsilon_{Si}} \\ T &= - \sum_{\eta=x,y,z} \frac{\hbar}{2m_\eta} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \end{aligned}$$

ε_{Si} y ε_{SiO_2} son las constantes dieléctricas estáticas del Si y SiO_2 respectivamente.

El primer termino de H es la energía cinética, el segundo término es el potencial lineal producido por el campo F , el tercer término es el potencial de Coulomb de la donadora y los dos últimos términos son las cargas imágenes de la donadora y el electrón respectivamente.

Aplicando el cambio de variable $\eta_i = a_0^* \tilde{\eta}_i$, donde $i = x, y, z$ y a_0^* es el radio de Bohr efectivo; el Hamiltoniano 3.1 toma la forma:

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_x (a_0^*)^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\hbar^2}{2m_y (a_0^*)^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} - \frac{\hbar^2}{2m_z (a_0^*)^2} \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + ea_0^* F \tilde{z} \\ &\quad - \frac{e^2}{\varepsilon_{Si} a_0^* \tilde{r}} + \frac{e^2 Q}{\varepsilon_{Si} a_0^* \sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} + 2\tilde{d})^2}} - \frac{e^2}{4\varepsilon_{Si} a_0^* (\tilde{z} + \tilde{d})} \end{aligned} \quad (3.2)$$

Utilizando las definiciones de unidades de longitud y de energía

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon_{Si}}{m_\perp e^2} \quad (3.3)$$

y

$$Ry^* = \frac{m_\perp e^4}{2\hbar^2 \varepsilon_{Si}^2} \quad (3.4)$$

Considerando que se tiene que $m_x = m_y = m_\perp$ y $m_z = m_\parallel$, el hamiltoniano 3.2 queda escrito de la forma

$$\tilde{H} = -Ry^* \left[\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} + \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} + \gamma \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} \right] + ea_0^* F \tilde{z} + Ry^* \left[-\frac{2}{\tilde{r}} + \frac{2Q}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} + 2\tilde{d})^2}} - \frac{Q}{2(\tilde{z} + \tilde{d})} \right] \quad (3.5)$$

En donde,

$$\gamma = \frac{m_\perp}{m_\parallel}$$

Dividiendo la expresión 3.5 por el Rydberg efectivo (Ry^*), el Hamiltoniano queda adimensional,

$$\tilde{H} = -\frac{\partial^2}{\partial \tilde{x}^2} - \frac{\partial^2}{\partial \tilde{y}^2} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial \tilde{z}^2} + kF\tilde{z} - \frac{2}{\tilde{r}} + \frac{2Q}{\sqrt{\tilde{\rho}^2 + (\tilde{z} + 2\tilde{d})^2}} - \frac{Q}{2(\tilde{z} + \tilde{d})} \quad (3.6)$$

donde,

$$k = \frac{ea_0^*}{Ry^*}$$

reescribiendo el hamiltoniano 3.6 se tiene

$$H = -\Delta_{\rho,\varphi} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz - \frac{2}{r} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z + 2d)^2}} - \frac{Q}{2(z + d)} \quad (3.7)$$

La expresión anterior es el hamiltoniano en unidades adimensionales de energía y longitud.

3.2 Ecuación de Schrödinger para el sistema

La ecuación de Schrödinger para el sistema formulado en este trabajo en coordenadas cilíndricas:

$$H\Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z) \quad (3.8)$$

Donde E es la energía total del sistema, H es el hamiltoniano y $\Psi(\rho, \varphi, z)$ es la función de onda, en coordenadas la ecuación de Schrödinger queda de la forma:

$$\left\{ -\Delta_{\rho, \varphi} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz - \frac{Q}{2(z+d)} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z+2d)^2}} \right\} \Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z) \quad (3.9)$$

la función de onda se puede expresar como el producto de tres funciones

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = g(z)h(z)\Omega(\rho, \varphi), \quad (3.10)$$

entonces la ecuación 3.9 se reescribe como

$$\left\{ -\Delta_{\rho, \varphi} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz - \frac{Q}{2(z+d)} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z+2d)^2}} \right\} g(z)h(z)\Omega(\rho, \varphi) = Eg(z)h(z)\Omega(\rho, \varphi) \quad (3.11)$$

Donde $h(z)$ y $g(z)$ son las soluciones a las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\left\{ -\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz \right\} g(z) = E_g g(z), \quad (3.12)$$

$$\left\{ -\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{Q}{2(z+d)} \right\} h(z) = E_h h(z). \quad (3.13)$$

Las soluciones a las ecuaciones 3.12 y 3.13 se muestran en el apéndice 5.4.

Para resolver la 3.11 aplicamos el principio variacional de Schrödinger así:

$$\begin{aligned} \Theta[\phi] &= \text{mín} \langle \Psi | H - E | \Psi \rangle \\ \Theta[\phi] &= \int_{-d}^{\infty} \Psi^* (H - E) \Psi dv \rightarrow \text{minimo}, \end{aligned} \quad (3.14)$$

reemplazando el hamiltoniano 3.7 y la función de onda 3.10 en la ecuación anterior, además el valor de $Q < 0$ entonces $Q = -|Q|$, tenemos

$$\begin{aligned} &\int f^*(z) \Omega^*(\rho, \varphi) \left[-\Delta_{\rho, \varphi} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz + \frac{|Q|}{2(z+d)} \right. \\ &\left. - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z+2d)^2}} \right] f(z) \Omega(\rho, \varphi) dv = 0 \end{aligned} \quad (3.15)$$

donde

$$f(z) = g(z)h(z), \quad (3.16)$$

después de varios procedimientos matemáticos la integral queda de la forma

$$\int \left[-f^2(z)\Omega(\rho, \varphi)\Delta_{\rho, \varphi}\Omega(\rho, \varphi) - 2\gamma \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{g(z)}{2} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{h(z)}{2} \right) \Omega^2(\rho, \varphi) \right. \\ \left. + v(\rho, z)f^2(z)\Omega^2(\rho, \varphi) - E_b f^2(z)\Omega^2(\rho, \varphi) \right] dv = 0 \quad (3.17)$$

donde E_b es la energía de enlace, dada por:

$$E_b = E - E_g - E_h. \quad (3.18)$$

Siendo

$$E_b = E - q_0\gamma \left(\frac{kF}{\gamma} \right)^{3/2} - kF(-d) + \frac{|Q|^2}{16\gamma(n+1)^2} \quad (3.19)$$

y

$$v(\rho, z) = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z + 2d)^2}}. \quad (3.20)$$

Los valores de E_g y E_h se calcularon en el apéndice 5.4.

Considerando que

$$\int_{-d}^{\infty} |f(z)|^2 dz = 1 \quad (3.21)$$

y evaluando la integral 3.17 en z tenemos

$$\int \left[-\Omega(\rho, \varphi)\Delta_{\rho, \varphi}\Omega(\rho, \varphi) - \left(E_b + 2\gamma h - V_{eff}(\rho) \right) \Omega^2(\rho, \varphi) \right] \rho d\rho d\varphi = 0, \quad (3.22)$$

donde h es

$$h = \int_{-d}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{g^2(z)}{2} \right) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{h^2(z)}{2} \right) dz \quad (3.23)$$

y V_{eff} es el potencial efectivo, el cual tiene la forma:

$$V_{eff}(\rho) = \int_{-d}^{\infty} f^2(z) \left[-\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z + 2d)^2}} \right] dz. \quad (3.24)$$

Haciendo uso del teorema de Green

$$-\int u \nabla v d\sigma = \int_{\tau} u \Delta v d\tau + \int_{\tau} \nabla u \cdot \nabla v d\tau, \quad (3.25)$$

la integral 3.22 toma la forma

$$\int \left[\left(\nabla \Omega(\rho, \varphi) \right)^2 - \left(E_b + 2\gamma h - V_{eff}(\rho) \right) \Omega^2(\rho, \varphi) \right] \rho d\rho d\varphi = 0, \quad (3.26)$$

la definición de la densidad Lagrangiana es

$$L = \left(\nabla \Omega(\rho, \varphi) \right)^2 - \left[E'_b - V_{eff}(\rho) \right] \Omega^2(\rho, \varphi) \quad (3.27)$$

por lo cual se llega a

$$\nabla \cdot \frac{\partial L}{\partial (\nabla_{\rho, \varphi} \Omega)} - \frac{\partial L}{\partial \Omega} = 0, \quad (3.28)$$

donde E'_b esta dada por

$$E'_b = E_b + 2\gamma h. \quad (3.29)$$

La ecuación diferencial toma la forma

$$\Delta_{\rho,\varphi}\Omega(\rho, \varphi) + \left[E'_b - V_{eff}(\rho) \right] \Omega(\rho, \varphi) = 0 \quad (3.30)$$

El sistema tiene simetría azimutal, por lo cual $\Omega(\rho, \varphi)$ se puede expresar como el producto de dos funciones, una que representa la parte azimutal y la otra la parte radial

$$\Omega(\rho, \varphi) = e^{im\varphi} R(\rho). \quad (3.31)$$

Donde m es el numero cuántico azimutal. Si reemplazamos 3.31 en la ecuación 3.30 y realizando las derivadas correspondientes se obtiene

$$\frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} R(\rho) - \left[V_{eff}(\rho) - E'_b \right] R(\rho) = 0. \quad (3.32)$$

La ecuación anterior es la ecuación de schrödinger para la parte radial de la impureza donadora, la cual se le aplica el método de barrido trigonométrico para encontrar los valores propios de la energía.

MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO PARA EL SISTEMA

Para resolver la ecuación de Schrödinger 3.32 obtenida en el capítulo anterior para una impureza cercana a una interface de Si/SiO_2 , bajo la acción de un campo eléctrico, se hace necesario el uso de métodos numéricos. El método que se utilizó para hallar la solución, se denomina método de “*Barrido Trigonométrico*” [14].

4.1 Planteamiento

La ecuación de Schrödinger 3.32 junto con las condiciones de contorno representa el problema de Sturm Liouville, dado por las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2 R(\rho)}{\partial \rho^2} + h(\rho) \frac{\partial R(\rho)}{\partial \rho} + q(\rho) R(\rho) = 0; \quad R(0) < \infty; \quad R(\infty) = 0 \\
& h(\rho) = \frac{1}{\rho}; \\
& q(\rho) = E'_b - \frac{m^2}{\rho^2} - V_{eff}(\rho)
\end{aligned} \tag{4.1}$$

En donde V_{eff} es el potencial efectivo 3.24.

Escribiendo $R(\rho) = \rho^\alpha U(\rho)$ y reemplazando en la ecuación 3.32, se tiene

$$\frac{\partial^2 U(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{(2\alpha + 1)}{\rho} \frac{\partial U(\rho)}{\partial \rho} + \frac{(\alpha^2 - m^2)}{\rho^2} U(\rho) - \left[V_{eff}(\rho) - E'_b \right] U(\rho) = 0, \tag{4.2}$$

escogiendo $m = \alpha$ para eliminar el termino proporcional a ρ^{-2} , la ecuación diferencial queda de la forma:

$$\frac{\partial^2 U(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{(2m + 1)}{\rho} \frac{\partial U(\rho)}{\partial \rho} - \left[V_{eff}(\rho) - E'_b \right] U(\rho) = 0 \tag{4.3}$$

Escribiendo

$$w(\rho) = \frac{2m + 1}{\rho}; \tag{4.4}$$

$$v(\rho) = E'_b - V_{eff}(\rho)$$

se llega a

$$\frac{\partial^2 U(\rho)}{\partial \rho^2} + w(\rho) \frac{\partial U(\rho)}{\partial \rho} + v(\rho) U(\rho) = 0; \quad R(0) < \infty; \quad R(\infty) = 0 \tag{4.5}$$

4.2 Aplicación de Barrido trigonométrico

El método de barrido trigonométrico consiste en que la ecuación diferencial de segundo orden es reducida a una ecuación de primer orden a través de cambio de coordenadas dado por (coordenadas polares de Poincaré):

$$\left. \begin{aligned} U(\rho) &= A(\rho) \cos(\theta(\rho)) \\ U'(\rho) &= A(\rho) \sin(\theta(\rho)) \\ \tan(\theta(\rho)) &= \frac{U'(\rho)}{U(\rho)} \end{aligned} \right\} \quad (4.6)$$

De estas se obtiene las expresiones para la ecuación diferencial para $\theta(\rho)$ y la ecuación $A(\rho)$

$$\theta'(\rho) = - [\sin^2(\theta(\rho)) + \mathbf{v}(\rho) \cos^2(\theta(\rho)) + \mathbf{w}(\rho) \sin(\theta(\rho)) \cos(\theta(\rho))] \quad (4.7)$$

$$A(\rho) = A \exp \left[\int [(1 - \mathbf{v}(\rho)) \sin(\theta(\rho)) \cos(\theta(\rho)) - \mathbf{w}(\rho) \sin^2(\theta(\rho))] d\rho \right]; \quad A(0) = 1. \quad (4.8)$$

Donde $\mathbf{v}(\rho)$ y $\mathbf{w}(\rho)$ son de la forma 4.4.

Analizando las condiciones de contorno para la función de onda, cuando ρ tiende a cero y cuando tiende a infinito, se hallan las condiciones para la ecuación 4.7. Así:

- Cuando $\rho \rightarrow 0$ se presenta singularidad en la función $\mathbf{w}(\rho)$; lo cual exige $U'(\rho)$ sea nula para $\rho = 0$, entonces de 4.6 se tiene que cuando $\rho = 0$, $\theta(0) = 0$.
- Cuando $\rho \rightarrow \infty$ la función $\mathbf{U}(\rho)$ tiene que anularse y solo se cumple cuando $\theta(\infty) \rightarrow -\pi/2 - n_\rho \pi$ con $n_\rho = 0, 1, 2, 3, \dots$ que es el número cuántico de nivel energético [14].

La ecuación 4.7 y sus condiciones de contorno precisan un problema de Cauchy para una ecuación diferencial de primer orden, el cual se va a resolver numéricamente para cada parámetro de energía \mathbf{E}_b utilizando herramientas computacionales. El programa para este problema de Cauchy fue elaborado en lenguaje **MATLAB**.

En un calculo numérico no existe un punto en el infinito, entonces para efectos de programación, el límite para cuando $\rho \rightarrow \infty$, se reemplaza por un valor por un valor R_{max} suficientemente grande comparado con la distancia de la impureza a la interface Si/SiO_2 .

Finalmente el problema planteado en la ecuación 4.5 queda expresado de la siguiente manera:

$$\theta'(\rho) = - [\sin^2(\theta(\rho)) + \mathbf{v}(\rho) \cos^2(\theta(\rho)) + \mathbf{w}(\rho) \sin(\theta(\rho)) \cos(\theta(\rho))]$$

$$\theta(R_{max}) = -\pi/2 - n_\rho\pi; \quad n_\rho = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.9)$$

$$\theta(0) = 0;$$

Este es el soporte matemático utilizado en los programas computacionales, realizados para hallar los niveles energéticos de la impureza y para encontrar su energía de enlace en función de los parámetros considerados, tales como la distancia de la impureza a la interface y el campo eléctrico aplicado.

ESPECTRO ENERGÉTICO

De la solución de la ecuación de Schrödinger, se puede obtener el espectro energético del sistema.

En este trabajo se presentan posibles distribuciones de energía para el estado base del sistema considerado, obteniéndose numéricamente mediante el método de barrido trigonométrico, utilizando herramientas computacionales elaboradas en lenguaje MATLAB.

Los valores para la masa efectiva y la constante dieléctrica en *Si* y *SiO₂* se toman de el trabajo hecho por M. J. Calderón, Belita Koiller, S. Das Sarma [3]. El radio de Bohr efectivo (a_0^*) y Rydberg efectivo (Ry^*) se utilizan como unidades de longitud y de energía respectivamente para expresar el hamiltoniano del sistema en unidades adimensionales. Los valores de estos son $a_0^* = 3,157 \text{ nm}$ y $Ry^* = 19,98 \text{ meV}$.

Además

- $\mathbf{m}_x = \mathbf{m}_y = \mathbf{m}_\perp = 0,191\mathbf{m}$: Masa Efectiva para el electrón en *Si* donde \mathbf{m} es la masa para el electrón libre.

- $m_z = m_{\parallel} = 0,916m$: Masa Efectiva para el electrón en dirección z donde m es la masa para el electrón libre.
- $\varepsilon_{Si} = 11,4$: Constante dieléctrica estática del Si
- $\varepsilon_{SiO_2} = 3,8$: Constante dieléctrica estática del SiO_2

5.1 Potencial efectivo para el sistema:

La ecuación 3.24 del potencial efectivo del sistema descrito fue calculada mediante métodos numéricos.

En primer lugar se calculo el potencial efectivo en función de ρ para diferentes distancias de la impureza a la interfase entre $15nm$ y $30nm$, para tres valores fijos de campo eléctrico de $5kV/cm$, $13,5kV/cm$ y $20kV/cm$. Para un campo eléctrico de valor $F = 5kV/cm$, el resultado se ve en la figura 5.1.

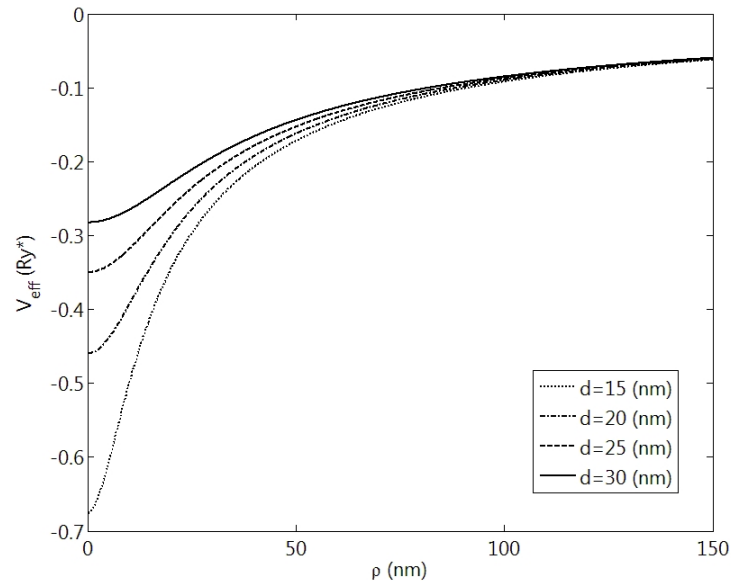


figura 5.1: Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de d y $F = 5kV/cm$.

Se puede ver en la figura anterior que a medida que la distancia d entre la impureza y la interfase de Si/SiO_2 aumenta, el valor de el potencial efectivo, para valores pequeños de ρ la profundidad del pozo disminuye, esto es debido a que a medida que la impureza se aleja de la interfase la influencia sobre la misma disminuye, para distancias grandes de ρ el efecto de la interfase es mucho menor lo cual da como resultado que las curvas converjan.

Igualmente se observa el mismo comportamiento para campos eléctricos de $F = 13,5kV/cm$ y $F = 20kV/cm$, como se puede ver en las figuras 5.2 y 5.3.

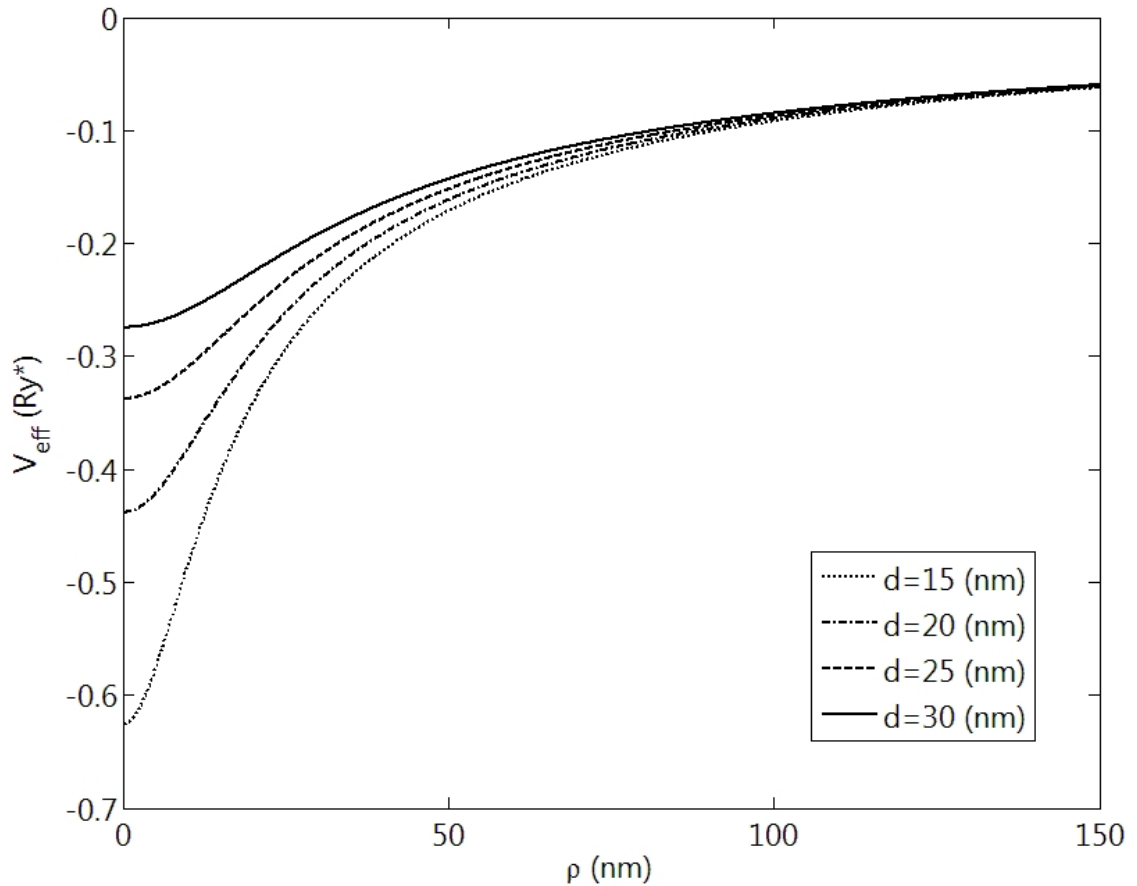


figura 5.2: Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de d y $F = 13,5kV/cm$.

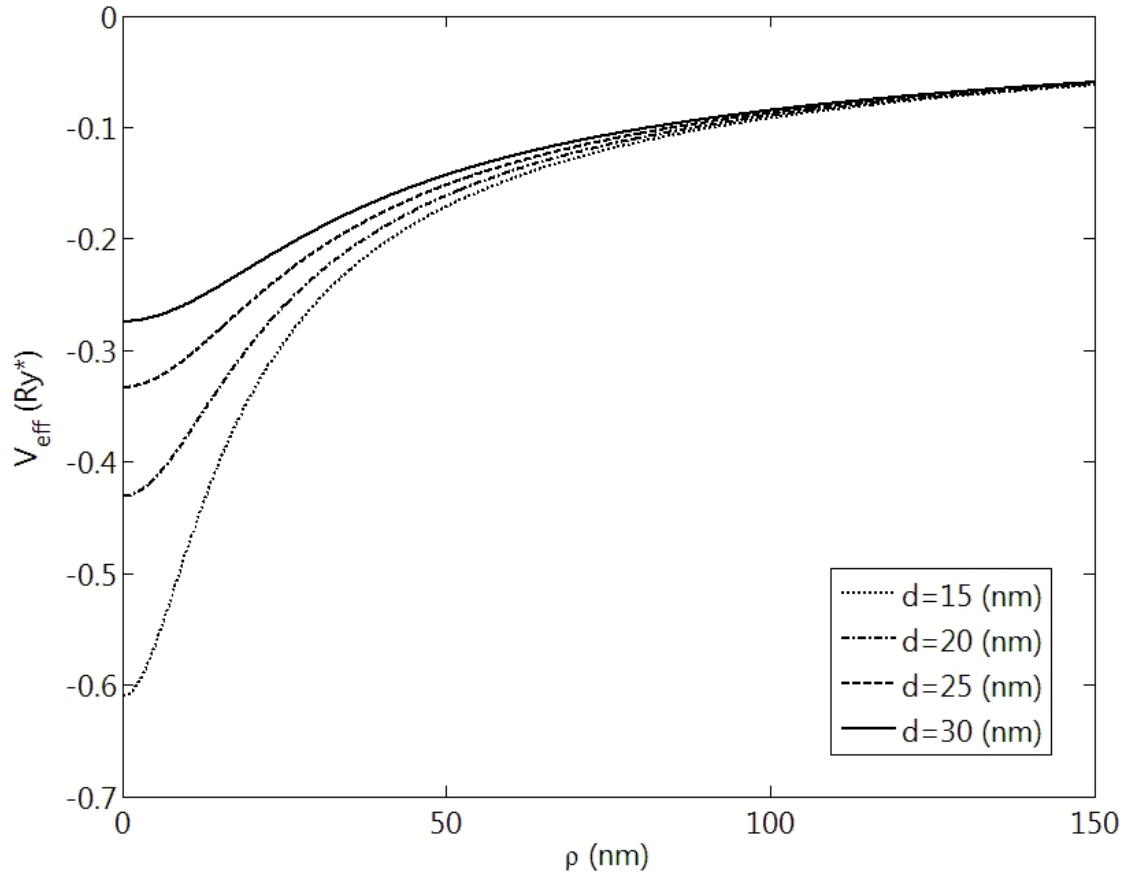


figura 5.3: *Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de d y $F = 20\text{kV/cm}$.*

Comparando las figuras 5.1, 5.2 y 5.3, se observa que el efecto del campo eléctrico es disminuir la profundidad del pozo para una posición fija de la impureza.

Lo anterior se puede apreciar con mayor claridad en la figura 5.4. En dicha figura se graficó el potencial efectivo en función de ρ , para una distancia $d = 15\text{nm}$, con diferentes campo eléctrico aplicado.

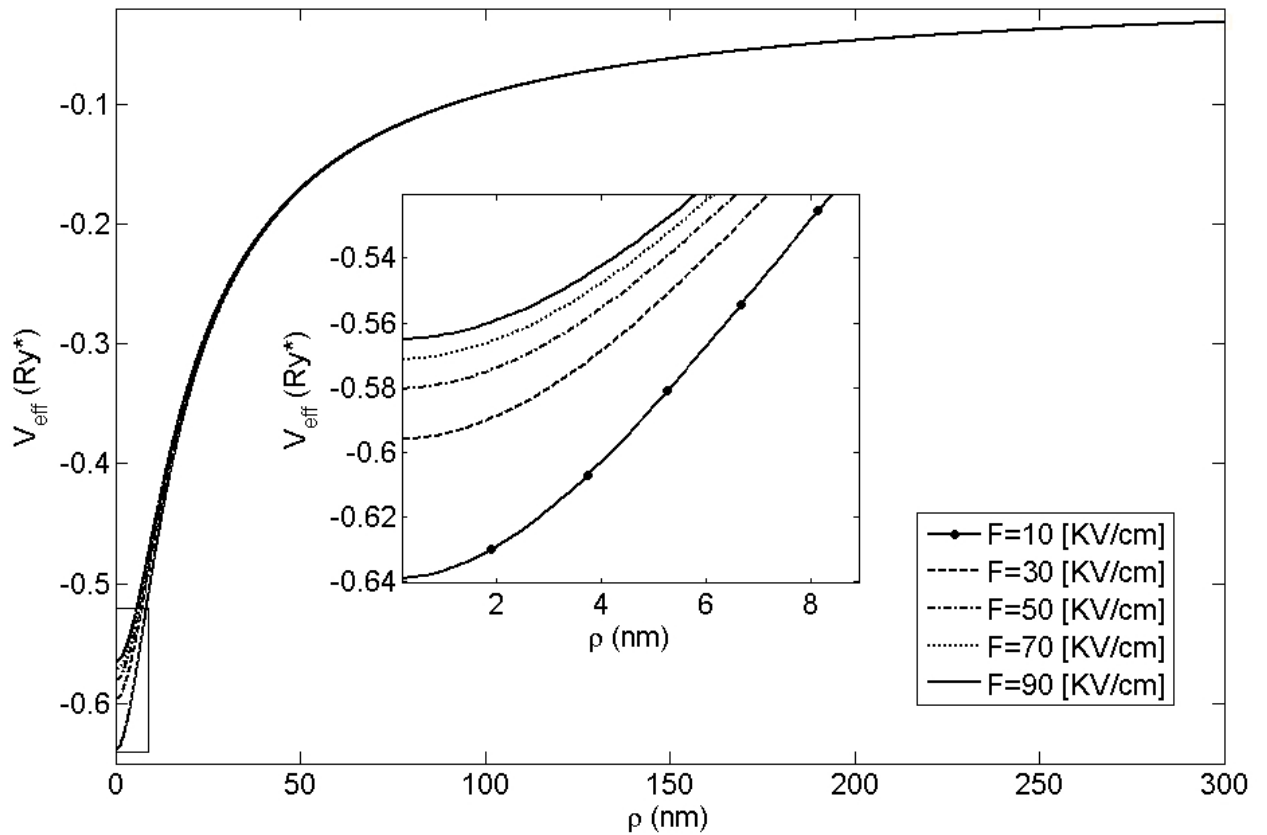


figura 5.4: Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de F y $d = 15\text{nm}$.

Se puede observar que el efecto del campo eléctrico sobre el potencial es bastante significativo para pequeñas distancias de ρ , además a medida que el campo eléctrico aumenta el pozo de potencial se hace menos profundo. El efecto es similar para las distancias $d = 20\text{nm}$ y $d = 30\text{nm}$ como se ve en las figuras 5.5 y 5.6 respectivamente.

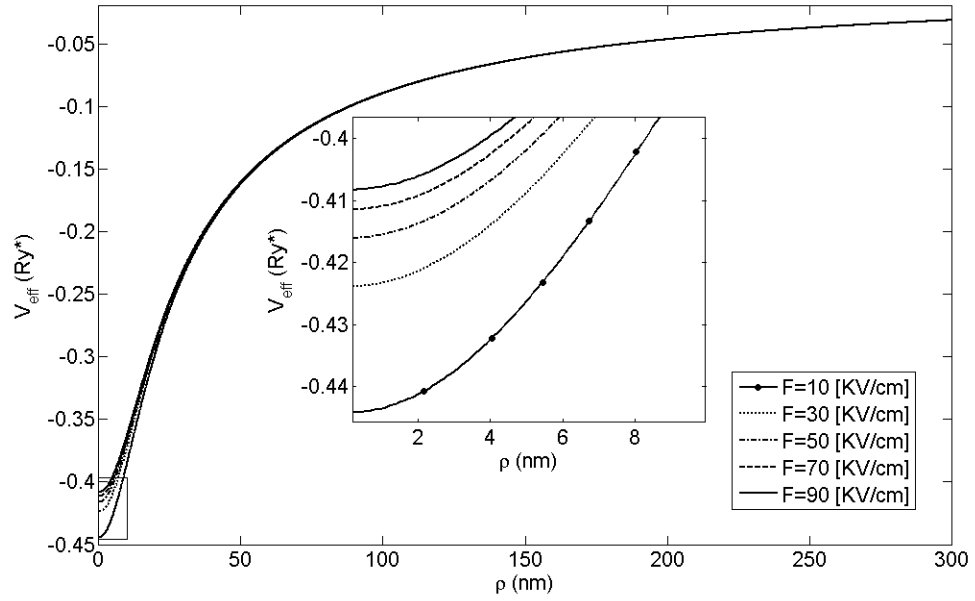


figura 5.5: Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de F y $d = 20\text{nm}$.

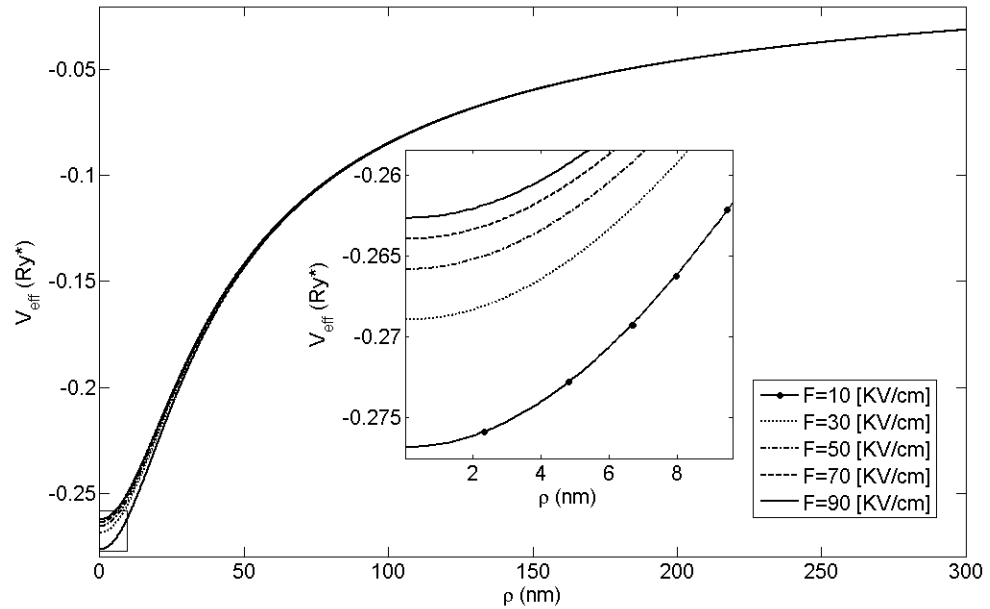


figura 5.6: Potencial efectivo en función de ρ para diferentes valores de F y $d = 30\text{nm}$.

Al comparar las figuras 5.4, 5.5 y 5.6 se puede apreciar que a medida que la distancia d aumenta, el potencial también lo hace, haciendo que el pozo sea menos profundo. Esto sucede ya que al alejar la impureza de la interfase el efecto debido al potencial de coulomb disminuye. Adicionalmente el efecto del campo eléctrico sobre el potencial se ve disminuido para valores grandes de ρ , esto ocurre ya que el potencial de coulomb disminuye considerablemente para distancias grandes de ρ .

La figura 5.7 muestra la dependencia del potencial efectivo en función de la distancia d que hay entre la impureza y la interfase de Si/SiO_2 y la distancia ρ .

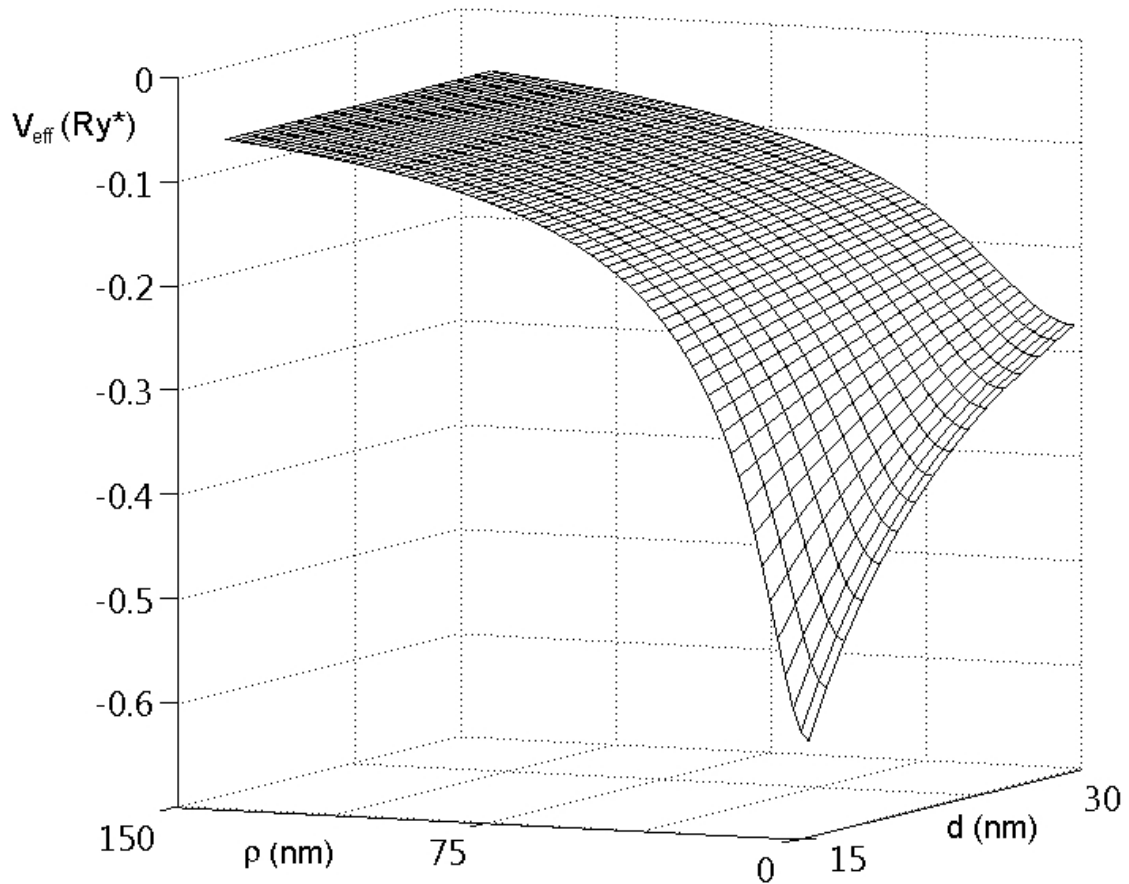


figura 5.7: Potencial efectivo en función de ρ y d .

En la figura 5.8 se muestra la dependencia del potencial efectivo en función de el campo eléctrico F aplicado al sistema y la distancia ρ .

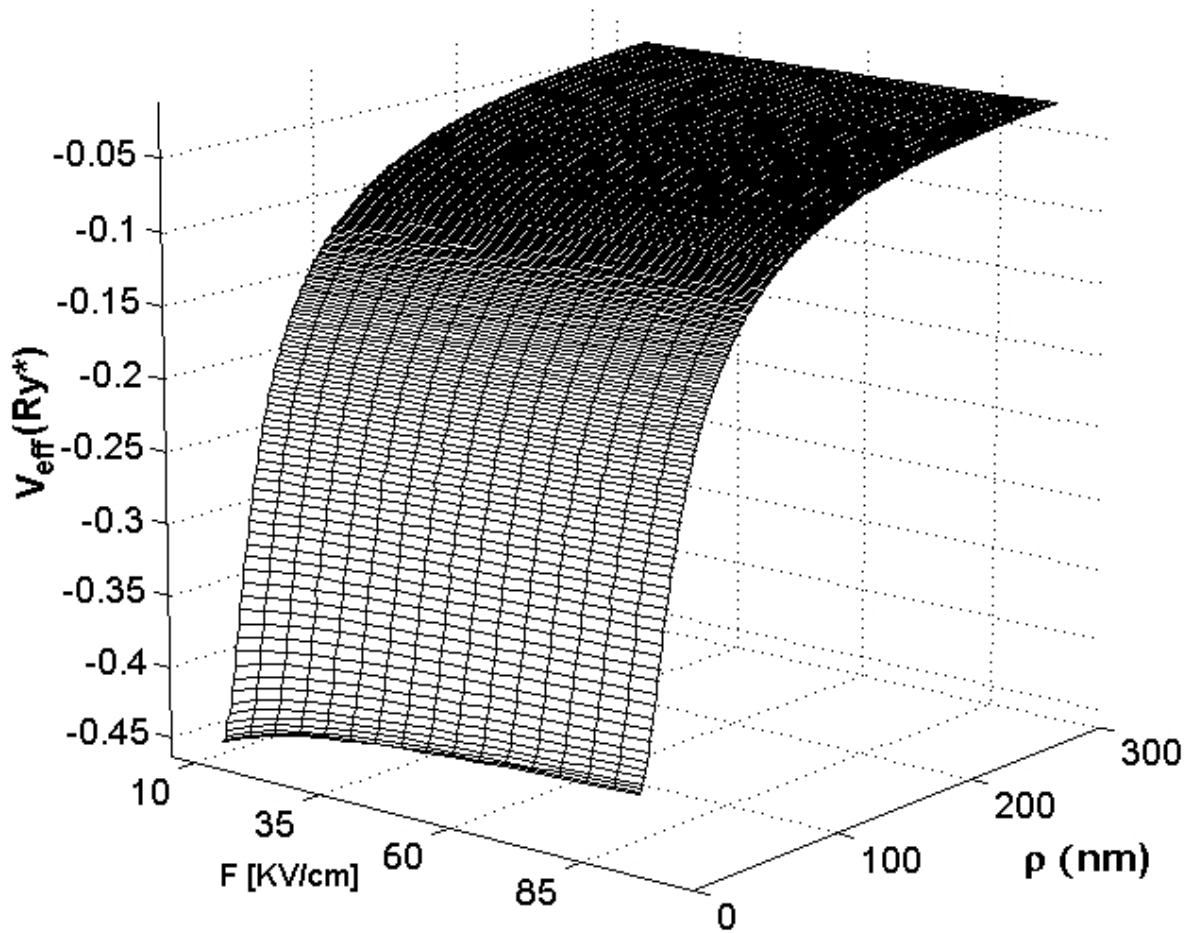


figura 5.8: *Potencial efectivo en función de ρ y F .*

En las dos figuras anteriores 5.7 y 5.8, se muestra una concepción mas completa de la dependencia de los parámetros d y f , respectivamente.

5.2 Niveles Energéticos.

Los niveles energéticos se clasifican de acuerdo a los números cuánticos: radial n_ρ y azimutal m , esta clasificación viene descrita en la tabla 5.1

	$m = 0$	$m = \pm 1$	$m = \pm 2$	$m = \pm 3$
$n_\rho = 0$	1s	1p	1d	1f
$n_\rho = 1$	2s	2p	2d	2f
$n_\rho = 2$	3s	3p	3d	3f
$n_\rho = 3$	4s	4p	4d	4f

Tabla 5.1: *Nomenclatura para los niveles electrónicos*

5.3 Efecto de la distancia d sobre la energía del sistema.

Al solucionar la ecuación 4.9, mediante el método de barrido trigonométrico, para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ variando los valores de la distancia (d) de la impureza a la interfase el programa arrojó los resultados que se muestran en la figura 5.9.

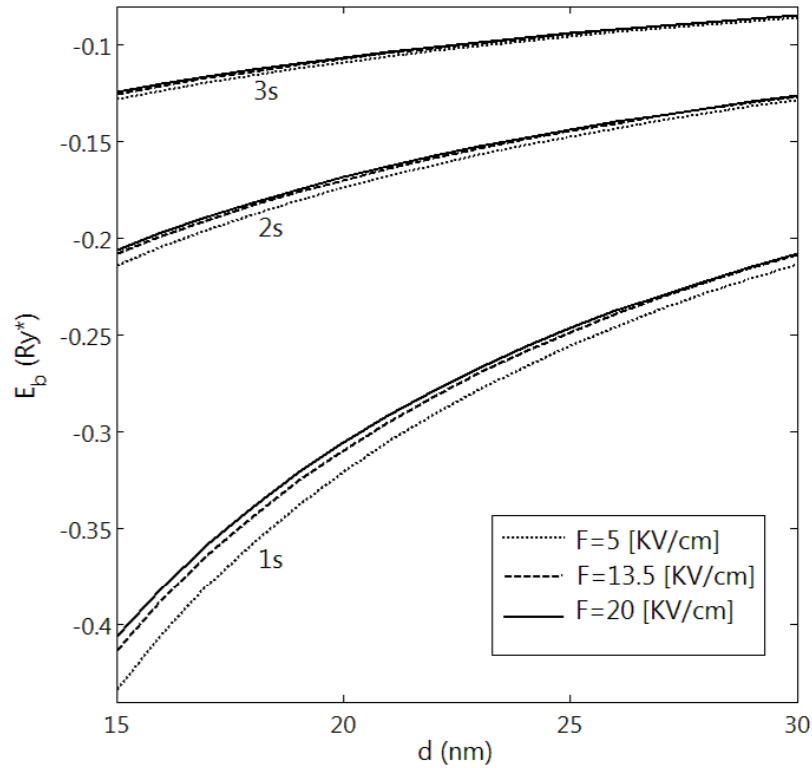


figura 5.9: Energía de la D^0 para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ en función de la distancia d .

En la figura 5.9 se gráfico E_b para tres valores diferentes del campo eléctrico. Se puede observar que el comportamiento de la energía a medida que la distancia entre la impureza y la interfase aumenta también aumenta, esto es debido a que el electrón siente en menor medida el efecto de la interfase. También se observa que el aporte del campo eléctrico es apreciable para posiciones de la impureza cercanas a la interfase, pero dicho efecto disminuye a medida que la impureza se aleja de la misma, tendiendo a un mismo valor de energía, esto debido a que el campo eléctrico no afecta el potencial efectivo sobre el portador para distancias grandes de la impureza a la interfase. Esto se puede apreciar para los estados $1s$, $2s$ y $3s$. Igualmente se calcularon las energías para los estados tipo p y tipo d , cuyos resultados se observan en las figuras 5.10 y 5.11, respectivamente.

El comportamiento de la energía en función de la distancia de la impureza a la interfase para los estados tipo p y d mostrado en la figura 5.10 y 5.11, respectivamente, tienen un comportamiento similar a los estados tipo s mostrado en la figura 5.9. Sin embargo los estados tipo p y d son energéticamente mayores que los tipo s

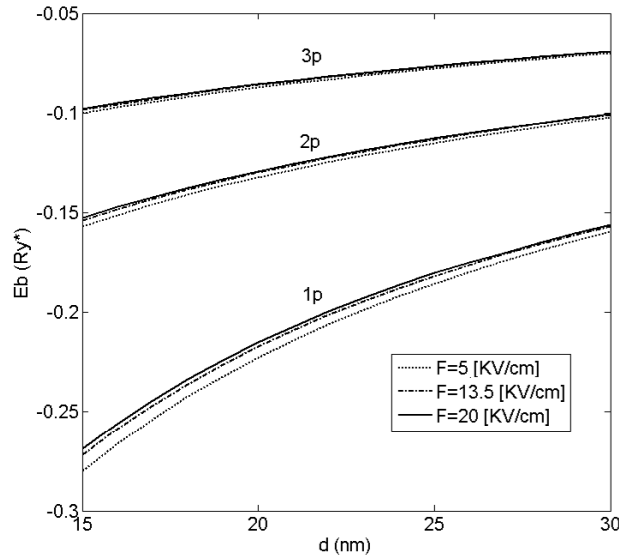


figura 5.10: Energía de la D^0 para los estados $1p$, $2p$ y $3p$ en función de la distancia d .

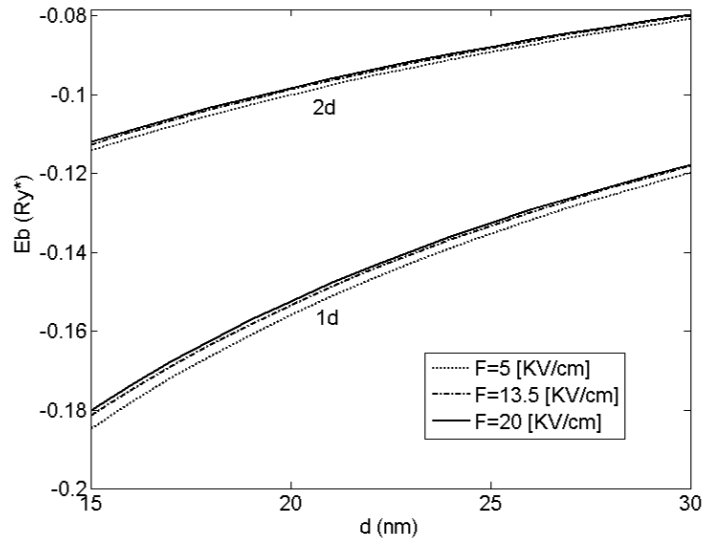


figura 5.11: Energía de la D^0 para los estados $1d$, y $2d$ en función de la distancia d .

5.4 Efecto del campo eléctrico F sobre la energía del sistema.

Para la segunda parte en el programa se dejó fija la distancia d entre la impureza y la interfase y se varió el campo eléctrico F . Los resultados obtenidos se pueden apreciar en la figura 5.12.

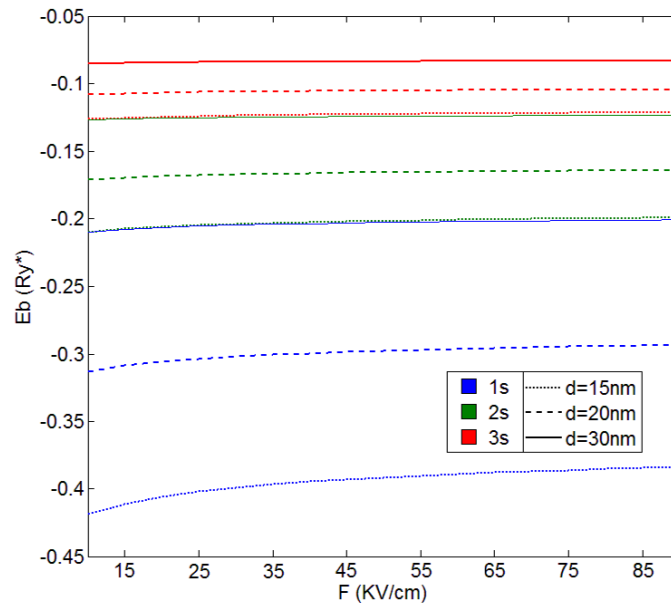


figura 5.12: Energía de la D^0 para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ en función del campo eléctrico F .

En la figura anterior se ve la evolución de la energía en función del campo eléctrico aplicado al sistema para los estados $1s$, $2s$ y $3s$ para tres distancias fijas de la impureza a la interfase. Se ve claramente que a medida que el valor del campo eléctrico aumenta, el valor de la energía aumenta, este comportamiento se ve para los tres estados estudiados, además confirma lo visto en la figura 5.9, donde a medida que se aleja la impureza de la interface la energía aumenta, debido a que el electrón se localiza más cerca de la impureza, efecto que se ve aumentado ligeramente por la influencia del campo eléctrico

También se calculo las energías p y d , cuyos resultados se pueden observar en las figuras 5.13 y 5.14, respectivamente.

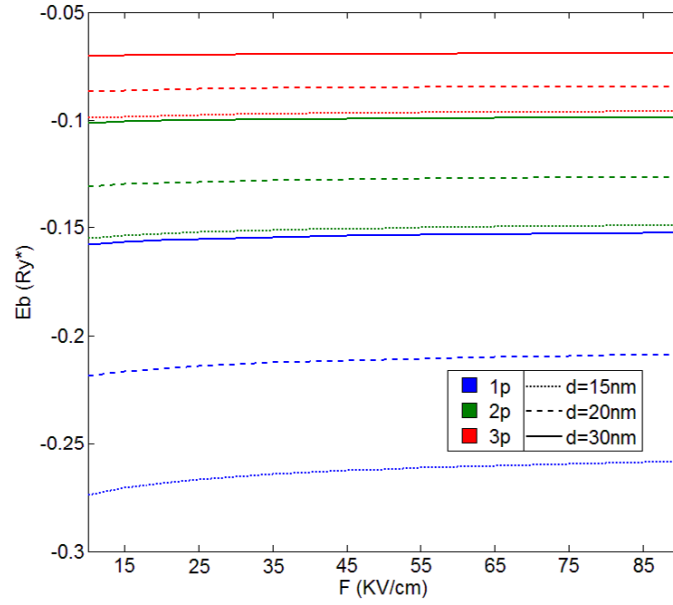


figura 5.13: Energía de la D^0 para los estados $1p$, $2p$ y $3p$ en función del campo eléctrico F .

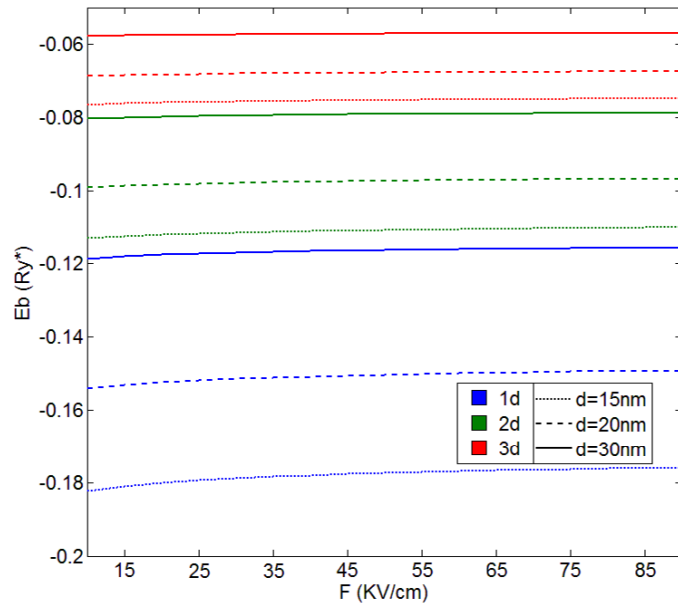


figura 5.14: Energía de la D^0 para los estados $1d$, $2d$ y $3d$ en función del campo eléctrico F .

CONCLUSIONES

- Se presento un método sencillo para calcular la energía en ρ de una impureza donadora embebida en un material de *Si* cercana a una interfase de *Si/SiO₂*, en presencia de un campo eléctrico perpendicular a esta interfase.
Se presentaron algunos estados del espectro y se observo el efecto del campo eléctrico aplicado, también la dependencia de estos con la distancia entre la donadora y la interfase.
- Se encontró una relación de dependencia entre la profundidad del pozo de potencial efectivo y la distancia de separación entre la donadora y la interfase *Si/SiO₂*.
- El efecto que produce el campo eléctrico aplicado al sistema sobre la impureza donadora es de una disminución del confinamiento, reduciendo la energía en ρ .
- Al variar las distancia de la donadora a la interfase, se ve que la energía de enlace depende de este valor y esta disminuye a medida que la impureza se aleja de la interfase.

APÉNDICE

ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER PARA LA DIRECCIÓN Z

En este apéndice se plantea la solución para $g(z)$ y $h(z)$ para el sistema planteado. Se parte del Hamiltoniano para un electrón en presencia de un campo eléctrico aplicado en dirección perpendicular a la interfase Si/SiO_2 :

$$H = T + eFz + -\frac{e^2}{\epsilon_{Si}r} + \frac{e^2Q}{\epsilon_{Si}\sqrt{\rho^2 + (z + 2d)^2}} - \frac{e^2Q}{4\epsilon_{Si}(z + d)}, \quad (1)$$

donde,

$$\rho^2 = x^2 + y^2$$

$$Q = \frac{\epsilon_{SiO_2} - \epsilon_{Si}}{\epsilon_{SiO_2} + \epsilon_{Si}}$$

$$T = - \sum_{\eta=x,y,z} \frac{\hbar}{2m_\eta} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2}$$

El hamiltoniano 1, puede reescribirse en forma adimensional en coordenadas cilíndricas, mediante la utilización de los parámetros efectivos 3.3, 3.4 y masa, con lo cual se obtiene:

$$H = -\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz - \frac{2}{r} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z + 2d)^2}} - \frac{Q}{2(z + d)} \quad (2)$$

donde,

$$\gamma = \frac{m_{\perp}}{m_{\parallel}}$$

para el sistema propuesto, se escoge una función de onda para el electrón, de la forma

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = g(z)h(z)\Omega(\rho, \varphi), \quad (3)$$

ahora se plantea la ecuación de schrödinger

$$H\Psi(\rho, \varphi, z) = E\Psi(\rho, \varphi, z). \quad (4)$$

Reemplazando el hamiltoniano 2 y la función de onda 3, en 4, se obtiene la expresión

$$\begin{aligned} & \left\{ -\Delta_{\rho, \varphi} - \gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz - \frac{Q}{2(z + d)} - \frac{2}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{2Q}{\sqrt{\rho^2 + (z + 2d)^2}} \right\} g(z)h(z)\Omega(\rho, \varphi) \\ & = Eg(z)h(z)\Omega(\rho, \varphi), \end{aligned} \quad (5)$$

entonces para encontrar las funciones $g(z)$ y $h(z)$, partimos de las expresiones

$$\left\{ -\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + kFz - E_g \right\} g(z) = 0 \quad (6)$$

y

$$\left\{ -\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{Q}{2(z+d)} - E_h \right\} h(z) = 0. \quad (7)$$

La ecuación 6 es el aporte de campo eléctrico aplicado y la ecuación 7 es debido a la carga imagen del electrón.

Para la ecuación 6 haciendo el cambio de variable

$$\begin{aligned} y &= \frac{kFz - E_g}{\gamma} \Rightarrow dy = \frac{kF}{\gamma} dz \\ \Rightarrow \frac{d^2}{dy^2} &= \left(\frac{\gamma}{kF} \right)^2 \frac{d^2}{dz^2} \end{aligned} \quad (8)$$

y haciendo $\alpha = \frac{kF}{\gamma}$ tenemos que

$$-\alpha^2 \frac{d^2 g(y)}{dy^2} + yg(y) = 0, \quad (9)$$

haciendo un nuevo cambio de variable $x = \beta y$, 9 queda de la forma

$$\alpha^2 \beta^2 \frac{\partial^2 g(x)}{\partial x^2} + \frac{x}{\beta} g(x) = 0 \quad (10)$$

$$\frac{1}{\beta} \left[\alpha^2 \beta^3 \frac{\partial^2 g(x)}{\partial x^2} - xg(x) \right] = 0. \quad (11)$$

Si tomamos $\alpha^2 \beta^3 = 1$

$$\begin{aligned}\beta &= \alpha^{-3/2} \\ \beta &= \left(\frac{\gamma}{kF}\right)^{-3/2},\end{aligned}$$

entonces de 11 tenemos que

$$\frac{\partial^2 g(x)}{\partial x^2} - xg(x) = 0 \quad (12)$$

La ecuación 12, tiene solución en funciones de **Airy**, tomando la solución $g(x) = A_i(x)$ tenemos:

$$\begin{aligned}g(z) &= A_i[\beta y] \\ g(z) &= A_i\left[\beta\left(\frac{kF}{\gamma}z - \frac{E_g}{\gamma}\right)\right]\end{aligned} \quad (13)$$

$$g(z) = A_i\left[\left(\frac{\gamma}{kF}\right)^{3/2}\left(\frac{kF}{\gamma}z - \frac{E_g}{\gamma}\right)\right].$$

Si tomamos q_0 como el cero de la función de **Airy**, tenemos

$$q_0 = \left(\frac{\gamma}{kF}\right)^{3/2}\left(\frac{kF}{\gamma}z - \frac{E_g}{\gamma}\right), \quad (14)$$

evaluando $z = -d$

$$\frac{kF}{\gamma}(-d) - \frac{E_g}{\gamma} = q_0\left(\frac{kF}{\gamma}\right)^{3/2}. \quad (15)$$

Despejando la energía se tiene

$$E_g = q_0 \gamma \left(\frac{kF}{\gamma} \right)^{3/2} + kF(-d). \quad (16)$$

Ahora para la ecuación 7 que representa la parte de la carga imagen del electrón, siendo $Q < 0 \implies Q = -|Q|$, queda de la forma:

$$\left\{ -\gamma \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{|Q|}{2(z+d)} - E_h \right\} h(z) = 0 \quad (17)$$

reescribiendo la ecuación 17

$$\left\{ -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{|Q|}{2\gamma(z+d)} \right\} h(z) = \varepsilon_h h(z) \quad (18)$$

donde

$$\varepsilon_h = \frac{E_h}{\gamma}. \quad (19)$$

Haciendo el cambio de variable $y = z + d$

$$-\frac{\partial^2 h(y)}{\partial y^2} + \frac{|Q|}{2\gamma y} h(y) = \varepsilon_h h(y) \quad (20)$$

evaluando el limite cuando $y \rightarrow \infty$, entonces la función $h(y) \rightarrow p(y)$, evaluando 20

$$-\frac{\partial^2 p(y)}{\partial y^2} = \varepsilon_h p(y) \quad (21)$$

la solución de la ecuación anterior tiene la forma

$$p(y) = Ae^{i\sqrt{\varepsilon_h}y} + Be^{-i\sqrt{\varepsilon_h}y} \quad (22)$$

como $p(y) \rightarrow 0$ cuando $y \rightarrow \infty$, entonces $\varepsilon_h = -\lambda$ con $\lambda > 0$

$$\Rightarrow p(y) = Ae^{i^2\sqrt{\lambda}y} + Be^{-i^2\sqrt{\lambda}y} \quad (23)$$

$$p(y) = Ae^{-\sqrt{\lambda}y} + Be^{\sqrt{\lambda}y} \quad (24)$$

de la ecuación 24 se toma la primera parte, por que esta garantiza que $p(y) \rightarrow 0$ para valores grandes de y ; $\Rightarrow B = 0$, entonces se tiene

$$p(y) = Ae^{-\sqrt{\lambda}y}. \quad (25)$$

Haciendo $h(y) = p(y)M(y)$ y reemplazando en la ecuación 20

$$-\lambda M(y)p(y) - p(y)\frac{\partial^2 M(y)}{\partial y^2} + 2\sqrt{\lambda}p(y)\frac{\partial M(y)}{\partial y} + \frac{|Q|}{2\gamma y}M(y)p(y) = \varepsilon_h M(y)p(y) \quad (26)$$

imponiendo la condición $\varepsilon_h = -\lambda$ y reescribiendo 26

$$y\frac{\partial^2 M(y)}{\partial y^2} - 2\sqrt{\lambda}y\frac{\partial M(y)}{\partial y} - \frac{|Q|}{2\gamma}M(y) = 0, \quad (27)$$

haciendo el cambio de variable $x = \sqrt{\lambda}y$ tenemos

$$x\frac{\partial^2 M(x)}{\partial x^2} - x\frac{dM(x)}{dx} - \frac{|Q|}{4\gamma\sqrt{\lambda}}M(x) = 0 \quad (28)$$

aplicando un nuevo cambio de variable $M(x) = xR(x)$ y reemplazando en 28

$$x \frac{\partial^2 R(x)}{\partial x^2} + (2 - x) \frac{\partial R(x)}{\partial x} - \left(1 + \frac{|Q|}{4\gamma\sqrt{\lambda}}\right) R(x) = 0 \quad (29)$$

comparando la ecuación 29 con la ecuación diferencial de los polinomios asociados de Lagrange

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_n^\alpha(x) + (\alpha + 1 - x) \frac{d}{dx} L_n^\alpha(x) + n L_n^\alpha(x) = 0, \quad (30)$$

podemos decir que la solución para la ecuación 29 es la misma que la solución de la ecuación 30 cuando $\alpha = -1$ y

$$n = -1 - \frac{|Q|}{4\gamma\sqrt{\lambda}} \quad (31)$$

despejando λ y sabiendo que $\varepsilon_h = -\lambda$, sustituimos en la ecuación 19 tenemos

$$E_h = -\frac{|Q|^2}{16\gamma(n+1)^2} \quad (32)$$

y

$$M(z) = 2\sqrt{\lambda}(z+d)L_n^1[2\sqrt{\lambda}(z+d)]. \quad (33)$$

Definiendo $f(z) = g(z)h(z)$ y al reemplazar $h(y) = p(y)M(y)$, donde $y = z+d$, se tiene:

$$f(z) = 2\sqrt{\lambda}(z+d)e^{\sqrt{\lambda}(z+d)}L_n^1[2\sqrt{\lambda}(z+d)] \left\{ A_i \left[\left(\frac{\gamma}{kF} \right)^{3/2} \left(\frac{kF}{\gamma}z - \frac{E_g}{\gamma} \right) \right] \right\}. \quad (34)$$

REFERENCIAS

- [1] M. J. Calderón, Belita Koiller, S. Das Sarma, J. Appl. Phys. **105**, 122410 (2009).
- [2] A. L. Saraiva, M. J. Calderón, Xuedong Hu, S. Das Sarma, Belita Koiller, <http://arxiv.org/abs/0901.4702>
- [3] M. J. Calderón, Belita Koiller, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **75**, 125311 (2007).
- [4] M. J. Calderón, Belita Koiller, Xuedong Hu, S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **96**, 096802 (2006)
- [5] Belita Koiller, Xuedong Hu, R. B. Capaz, A. S. Martins, S. Das Sarma, An. Acad. Bras. Cienc. **77** (2), 201-222 (2005)
- [6] D. J. Lockwood, Z. H. Lu, J. M. Baribeau, Phys. Rev. Lett. **76**, 539 - 541 (1996)
- [7] M. J. Calderon, Belita Koiller, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **74**, 081302(R) (2006)
- [8] M. J. Calderón, Belita Koiller, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **75**, 161304(R) (2007)
- [9] M. J. Calderón, Belita Koiller, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **77**, 155302 (2008)
- [10] Belita Koiller, R. B. Capaz, Xuedong Hu, S. Das Sarma, AIP Conf. Proc., Volumen **772**, pp. 1441-1444 (2005)

-
- [11] S. Das Sarma, Rogerio de Sousa, Xuedong Hu, Belita Koiller, *Solid State Communications* **133**, 737 (2005).
- [12] I. Shlimak, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Volumen **321**, Issue 7, Abril 2009, 884-887
- [13] G. Bastard, *Phys. Rev. B* **28**, 3241 (1983).
- [14] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira, *J. Phys. D* **31**, 3391 (1998).
- [15] T. Darnhofer and U. Rössler, *Physical Review B*, **47**, no. 23, pp. 16020-16023 (1993).
- [16] S. Çakmak, A. M. Babayev, E. Artunç, A. Kökçe and S. Çakmaktepe, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 18, Issue 4, June 2003, Pages 365-371.
- [17] D. B. Migas and V. E. Borisenko, *Physical Review B* 76, 035440 (2007).
- [18] K.H. Choa, S.H. Sona, S.H. Honga, B.C. Kima, S.W. Hwanga, D. Ahnb, B.-G. Parkc, B. Naserd, J.-F. Lind, J.P. Birdd, D.K. Ferryd, *Superlattices and Microstructures* 34 (2003) 245 251.
- [19] I. Barke, T.K. Rügheimer, Fan Zheng, F.J. Himpsel, Department of Physics, Madison, 1150 University Avenue, Madison, WI 53706, United States.
- [20] Neumannan d a. Nothe, *Europhysics letters Europhys. Lett.*, 4 (3), pp. 351-355 (1987).
- [21] Keun Hwi Cho, Young Chai Jung, Seung Hun Son, Sung Woo Hwang, Doyeol Ahny, Jonathan P. Bird, *Journal of the Korean Physical Society*, Vol. 47, November 2005, pp. S526 S529.

-
- [22] Yajie Dong, Guihua Yu, Michael C. McAlpine, Wei Lu, and Charles M. Lieber, “Si/a-Si Core/Shell Nanowires as Nonvolatile Crossbar Switches”.
- [23] Rurali Ricardo, “Estudio de las propiedades estructurales, electrónicas y de transporte de nanohilos con métodos de primeros principios”, RYC 2007 01369.
- [24] Susan K. Watson, Charles M. Marcus, Charles M. Lieber, Leonid I. Glazman, and David DiVincenzo, NSF Nanoscale Science and Engineering Grantees Conference, Dec 16-18, 2003 Grant 0210736.
- [25] I. D. Mikhailov, Carrillo nuñez Hamilton, Leonardo Acevedo Oscar, Revista colombiana de Física, volumen **39**, n. 1, p. 127-130 (2007).
- [26] W. Gutiérrez, J. E. Galván-Moya, L. F. García, I. D. Mikhailov, ScienceDirect Physica B: Condensed Matter Volume **404**, Issue 2, Pages 180-183 (2009).