

**ESTUDIO DEL EFECTO DE NO-PARABOLICIDAD DE LA BANDA DE
CONDUCCIÓN SOBRE LOS NIVELES ENERGÉTICOS DE UN PUNTO
CUÁNTICO AUTO-ENSAMBLADO**

JOHN LOZADA

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

2007

**ESTUDIO DEL EFECTO DE NO-PARABOLICIDAD DE LA BANDA DE
CONDUCCIÓN SOBRE LOS NIVELES ENERGÉTICOS DE UN PUNTO
CUÁNTICO AUTO-ENSAMBLADO**

JOHN LOZADA

**Trabajo de Grado para optar al título de
FÍSICO**

Director:

Dr. JAVIER BETANCUR

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2007**

En señal de admiración a su labor, este trabajo es
dedicado al profesor

Ilia Davidovich Mikhailov

Resumen

ESTUDIO DEL EFECTO DE NO-PARABOLICIDAD DE LA BANDA DE CONDUCCIÓN SOBRE LOS NIVELES ENERGÉTICOS DE UN PUNTO CUÁNTICO AUTO-ENSAMBLADO[†]

Autor: John Lozada[‡]

Palabras clave: Nanotecnología, Sistemas de baja dimensionalidad, Heteroestructuras, Puntos Cuánticos Auto-Ensamblados, Efecto de No-Parabolicidad

Se calcula el espectro energético de un electrón confinado en un punto cuántico auto-ensamblado de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$, para diferentes geometrías con simetría axial, usando la aproximación de masa efectiva y considerando un modelo de banda de conducción parabólica. La ecuación de onda es separable si se tiene en cuenta la aproximación adiabática, la cuál, permite desacoplar el movimiento lateral lento del portador de carga, de su movimiento transversal rápido en la dirección de crecimiento. La ecuación radial se resuelve mediante el método numérico de barrido trigonométrico. El efecto de no-parabolicidad de la banda se estima a través del re-escalamiento de las energías obtenidas, usando una relación empírica para la masa efectiva dependiente de la energía. Se presentan las curvas de energía, para los modelos de banda parabólica y no-parabólica, como función del radio y la altura del punto cuántico. Los resultados muestran un decrecimiento notable de los niveles energéticos, principalmente en puntos cuánticos de forma piramidal en los que el electrón se encuentra bajo un mayor grado de confinamiento que para las demás geometrías analizadas.

[†] Trabajo de grado

[‡] Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Dr. Ilia D. Mikhailov

Abstract

STUDY OF THE CONDUCTION BAND NON-PARABOLICITY EFFECT ON THE ENERGETIC SPECTRUM OF A SELF-ASSEMBLED QUANTUM DOT[†]

Author: John Lozada[‡]

Keywords: Nanotechnology, Low-Dimensional Systems, Heterostructures, Self-Assembled Quantum Dot, Non-Parabolicity Effect

The energetic spectrum of an electron confined inside $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ axially symmetric SAQDs is calculated under the Mass Effective Approximation scheme considering a parabolic conduction band model. The resulting wave equation is then separated having into account the Adiabatic Approximation which assumes that there is no coupling between the slow in-plane carrier movement from its fast transversal motion in the crystal-growth direction. A numerical procedure based on the trigonometrical sweep method is used for solving the yielding radial equation. Band non-parabolicity effect is estimated by means of re-escalating the obtained energies using an empirical relation for the energy-dependent effective mass. Energy curves are presented for both models as a function of the QD's radius and thickness. Results show a noteworthy decreasing of the energetic levels, principally in pyramidal QDs in which the electron is under most confinement.

[†] Undergraduate thesis

[‡] Faculty of Sciences, School of Physics, Ilia D. Mikhailov, PhD

1. Introducción

Los sistemas de baja dimensionalidad han revolucionado la física de semiconductores. Ellos están basados en la tecnología de las heteroestructuras, donde la composición de un semiconductor puede ser variada en escala nanométrica. De esta forma, ha sido posible la fabricación de los llamados *pozos cuánticos* (QWs)[†], estructuras donde los electrones, y en general los portadores de carga, están confinados dentro de regiones con geometrías de dimensión reducida: planos, líneas y puntos.

Los pozos cuánticos bidimensionales, o simplemente QWs, fueron las primeras heteroestructuras construidas, a comienzos de la década de los 70's [1-2]. Están formados por una capa delgada (de algunas decenas de nanómetros) de material semiconductor emparedada entre dos capas de otro semiconductor similar, pero con una banda de conducción más alta que la del primero. El resultado es la aparición de unas barreras de potencial que limitan el movimiento del portador a una región cuasi-planar, dentro de la cual, se logra una fuerte cuantización de sus excitaciones en la dirección perpendicular a las capas.

A medida que se han ido mejorando las técnicas de crecimiento de cristales, se han podido construir otros tipos de heteroestructuras de dimensionalidades cada vez menores como: los hilos cuánticos (QWWs)[†], estructuras en las que se limita el movimiento del portador en dos direcciones espaciales [3]; y más recientemente los puntos cuánticos (QDs)[†] [4-5], estructuras cuasi-cero-dimensionales en donde se ha alcanzado ya una cuantización completa del movimiento del portador.

Los QDs son llamados frecuentemente *átomos artificiales*, debido al fuerte confinamiento impuesto en todas las direcciones que hace que tengan características

[†] En inglés: quantum well (QW), quantum web wire (QWW) and quantum dot (QD).

similares a sistemas atómicos. La posibilidad de controlar su forma, dimensiones, estructura de niveles energéticos y el número de portadores de carga confinados en ellos, los convierte en excelentes laboratorios en miniatura, interesantes tanto para los físicos teóricos como para los experimentalistas, así como por sus posibles aplicaciones tecnológicas.

Se han implementado varios métodos de obtención de QDs como son: el grabado [4, 6-7], usando campos eléctricos modulados espacialmente [8-9], por interdifusión entre la barrera y el pozo cuántico [10], en la forma de microcristales semiconductores [11], el crecimiento selectivo [12] y el crecimiento auto-organizado [13]. Para todos los métodos mencionados el material predilecto ha sido la heterojuntura de GaAs/Ga(Al)As, aunque también se han usado otros semiconductores como los compuestos In(Ga)As/GaAs e InAs/In(Ga)As (en especial, los formados utilizando la última técnica mencionada).

El método de auto-cristalización o de crecimiento auto-organizado es el que produce los llamados puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQDs)[†] [14-15]. Este método consiste en la deposición del material utilizando la técnica conocida como Molecular Beam Epitaxy, usada comúnmente en la construcción de QWs, pero en este caso, el sustrato posee una constante de red ligeramente diferente a la del material que se deposita, lo que genera ciertas tensiones superficiales que aumentan a medida que se añade cada monocapa. Para cierto espesor crítico, el material sufre una transición (conocida como transición de Stranski-Krastanow [16]) en la cuál el crecimiento del cristal deja de ser epitaxial, formándose entonces, unas pequeñas “islas” de semiconductor con formas y tamaños regulares: los SAQDs.

El pequeño tamaño de los SAQDs, la homogeneidad de sus formas, la estructura cristalina perfecta, sin defectos de borde y el conveniente proceso de crecimiento (sin la precisión necesitada en la deposición de electrodos o en las técnicas litográficas) son sus más importantes características. De ahí, que hayan surgido ideas prometedoras acerca de su aplicación tecnológica en áreas como la electrónica y la opto-electrónica, como por ejemplo, la construcción del láser de punto cuántico [17-18], un láser semiconductor más

[†] En inglés: self-assembled quantum dot (SAQD).

eficiente y controlable; o la creación de medios de almacenamiento con capacidades enormes, basados en matrices densas de puntos cuánticos [19-20].

Por otra parte, se ha establecido que la reducción de la dimensionalidad de la estructura tiene un efecto sensible en los niveles cuánticos de los sistemas confinados en ella. Ya se han realizado una gran cantidad de trabajos analizando sistemas de electrones, de donadoras hidrogenoides, o excitónicos, en toda clase de heteroestructuras (véanse por ejemplo los siguientes trabajos [21-27] y las referencias dadas ahí). Se ha mostrado que en general, las energías del electrón libre y de enlace de dichos sistemas crecen a medida que aumentamos el nivel de confinamiento (i.e., estas energías son menores para un QW que para un QWW, y a su vez, menores aún que para un QD) y se reduce el tamaño del pozo cuántico en cada caso.

En lo referente a puntos cuánticos, los primeros trabajos teóricos se realizaron para geometrías simples como la cúbica [28], la esférica [29-31] y la cilíndrica [32], ya que con estas simetrías la ecuación de onda tridimensional es separable y conduce a soluciones exactas, útiles no solamente desde el punto de vista físico sino matemático, ahorrando gran cantidad de esfuerzo computacional y proporcionando una primera estimación de los espectros y energías de enlace de los sistemas analizados. Por ejemplo, Zhu *et al.* [29-31] han hallado soluciones para los estados base y primeros excitados de impurezas donadoras hidrogenoides atrapadas en puntos cuánticos esféricos, usando expansión en serie de Taylor para una barrera rectangular. También para ese mismo tipo de barrera, Porras-Montenegro *et al.* [33] han obtenido las energías de enlace para impurezas donadoras/aceptoras neutras usando métodos variacionales. Ribeiro-Latgé [28] han calculado las energías de enlace y densidad de los estados para impurezas donadoras centradas en QDs cúbicos.

Sin embargo, debido a su propio proceso de creación, los SAQDs tienen formas achatadas que difieren esencialmente de la esfera y el cubo, en las que sus dimensiones transversales son mucho mayores que su altura (aproximadamente unas diez veces mayor), y con formas comunes que incluyen pirámides, lentes, discos y anillos. Un primer enfoque de solución del problema del espectro energético dentro de SAQDs consiste en considerar

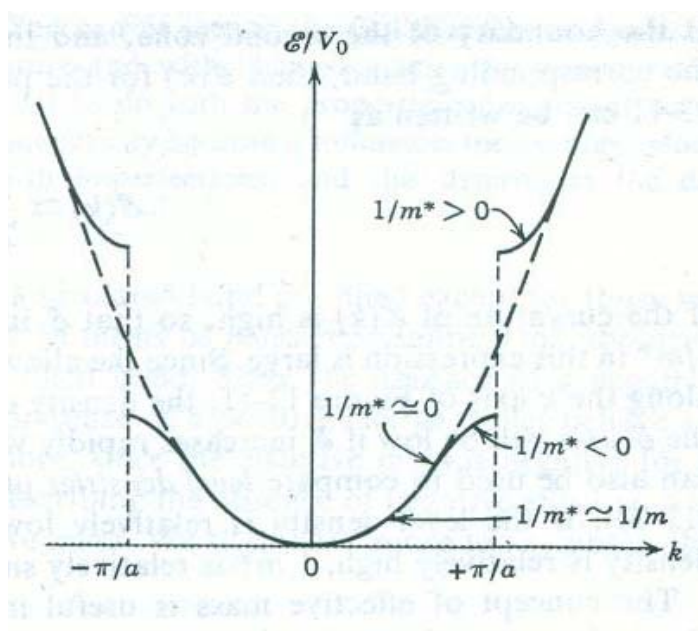
el sistema como bidimensional, ignorando la altura del SAQD y teniendo en cuenta únicamente el movimiento transversal [34-35]. Es evidente que esta aproximación es demasiado cruda, pues no tiene en cuenta que en realidad los SAQDs tienen morfologías complejas con altura variable que, como ya se ha demostrado en el trabajo [36], influyen considerablemente en el espectro electrónico y la distribución de carga dentro del punto cuántico.

Otro enfoque de solución (que es el que se utilizará en este trabajo) se basa en la llamada Aproximación Adiabática (AA) [32], que permite desacoplar el movimiento de los portadores de carga en uno lateral, correspondiente a un movimiento “lento”, y uno transversal, que corresponde a un movimiento “rápido” debido al mayor confinamiento en esta dirección. Lo anterior nos permite representar la función de onda para el electrón libre en una forma simple, casi separable, que nos permite evitar tediosos cálculos computacionales. Hawrylak *et al.* [37] han estudiado la estructura electrónica de SAQDs lenticulares como función del tamaño del punto cuántico, el potencial de confinamiento y el campo magnético aplicado, usando dos enfoques de solución de la ecuación de Schrödinger: la AA y diagonalización exacta del Hamiltoniano. Mikhailov y co-investigadores [36] han utilizado la AA para calcular la distribución de carga electrónica dentro de SAQDs axialmente simétricos con diferentes geometrías. Además, se han utilizado estos resultados para calcular las energías de estado base para D^0 y D^- como función del tamaño de la heteroestructura y la posición de la donadora mediante el método de dimensión fractal [38-39].

Es importante resaltar que la mayoría de los cálculos realizados para sistemas de baja dimensionalidad están dentro de la llamada Aproximación de Masa Efectiva (AME) [40], la cuál es ampliamente usada en la física de semiconductores. Ésta fue aplicada a sistemas de baja dimensionalidad en primer lugar por Bastard [21] para resolver el problema del espectro energético de sistemas electrónicos y de donadoras hidrogenoides confinados dentro de QWs. En esta aproximación se considera al electrón que se encuentra dentro de la red cristalina como si fuese libre pero con una cierta masa efectiva, m^* (diferente a su masa en reposo), que da cuenta de su interacción con el cristal. El potencial

de confinamiento y perturbaciones tales como campos externos o impurezas en la red son tenidas en cuenta como términos adicionales en el Hamiltoniano.

Ahora bien, según la teoría de bandas del estado sólido [41], la masa efectiva del electrón (y en general del portador) y la forma de la banda de conducción (o de valencia, según corresponda) están íntimamente relacionadas. De hecho, se define la masa efectiva como proporcional al inverso de la curvatura de la banda¹. Cuando estamos en regiones con energías cercanas al piso de la banda, la forma de la misma se puede aproximar mediante una parábola, lo que implica una masa efectiva constante para esas energías (ver fig.1). Pero para energías mayores, esta aproximación no es tan válida, ya que la forma de la



banda se desvía apreciablemente de la parabólica y, en este caso, la masa efectiva se hace fuertemente dependiente de la energía misma del electrón.

Como los niveles energéticos suben a medida que aumentamos el grado de confinamiento de las partículas, el efecto de no-parabolicidad de la banda de conducción se

¹ Es necesario aclarar que la forma de la banda varía según la dirección en el cristal que se esté considerando, y por tanto, la masa efectiva estará dada por un tensor de segundo orden en una formulación más general. Sin embargo, en esta tesis se usará un material que posee una banda de conducción que se puede considerar, con buena aproximación, como isotrópica; la definición dada arriba es suficientemente justa y nos da una buena idea de dicha dependencia.

espera que aumente a medida que se reduzca el tamaño del pozo. Además debe hacerse más fuerte con la disminución de la dimensionalidad de la estructura, es decir, será mayor para puntos cuánticos que para pozos cuánticos. Este comportamiento ha sido estudiado, en el caso de QWs, por Bajaj y Chaudhuri [42], que han calculado las variaciones en la energía de enlace de donadoras hidrogenoides en QWs de GaAs-Ga(Al)As para diferentes tamaños de pozo y alturas de barrera, comparándolos con los resultados obtenidos usando una banda parabólica. También, Ekenberg [43] ha estudiado este efecto sobre la energía de confinamiento en QWs de GaAs usando una expresión para la banda de conducción expandida hasta cuarto orden incluyendo términos anisotrópicos. En lo correspondiente a QDs se encuentran en la literatura pocos estudios que tengan en cuenta este efecto. En un trabajo realizado por nuestro grupo se ha estudiado el efecto de no-parabolicidad sobre la energía de enlace de una donadora neutra dentro de una QD esférico de GaAs en función de su radio [44], encontrándose un aumento en la energía de enlace de hasta un 50% debido a la no-parabolicidad de la banda de conducción. Pero hasta donde nosotros conocíamos, una investigación de este tipo no había sido realizada para SAQDs, cuyas geometrías difieren drásticamente de la esférica y donde se logra un confinamiento aún mayor que en las demás heteroestructuras debido a su reducido tamaño.

Para el presente trabajo, se han calculado la energía de estado base y de los primeros niveles excitados de un electrón dentro de SAQDs de GaAs-Ga(Al)As con diferentes geometrías, asumiendo en primera instancia un modelo de banda parabólica. Se ha hecho uso de la aproximación adiabática y del método de barrido trigonométrico para la solución de la ecuación de onda tridimensional resultante. El efecto de no-parabolicidad de la banda de conducción es tenido en cuenta a través de una relación empírica de la masa efectiva con la energía, mediante la cual re-escalamos los resultados obtenidos en la aproximación parabólica, de manera similar a como se ha hecho en los trabajos de García [44] y Tao Pang [45]. Finalmente se comparan los resultados obtenidos con ambos modelos.

El resto de esta tesis está organizado de la siguiente forma: en el capítulo 2 se presenta el modelo matemático utilizado en la descripción de los SAQDs. Se hace una breve reseña de los parámetros físicos utilizados en la AME, incluyendo los parámetros de

no-parabolicidad, y por último se plantea el Hamiltoniano del sistema. En el capítulo 3, se describe en detalle los métodos para resolver la ecuación de Schrödinger resultante: la AA y el método de barrido trigonométrico. Además, se explica el proceso de re-escalamiento de las energías para estimar el efecto de no-parabolicidad. Finalmente, en el capítulo 4, se presentan los resultados obtenidos acompañados del análisis correspondiente. Anexo al final del libro se encuentran los programas implementados en la elaboración de este trabajo, los cuales se codificaron en FORTRAN.

2. Modelo

2.1 Aproximación de masa efectiva (AME)

En este trabajo, se utiliza la aproximación de masa efectiva [40] como punto de partida para el cálculo de los niveles energéticos de un electrón confinado en un punto cuántico auto-ensamblado. Esta aproximación ha sido ampliamente usada en el análisis de sistemas de baja dimensionalidad y hace uso de la estructura de bandas del semiconductor analizado. Se puede enunciar de la siguiente forma:

Si la curva de dispersión de un semiconductor en bloque está dada por $\varepsilon(\mathbf{k})$ y si existe una perturbación suave (que no varía mucho en la distancia de una constante de red) $V(\mathbf{r})$ en el cristal, tenemos que el espectro energético de un portador dentro del semiconductor perturbado se encuentra como solución del problema:

$$[\varepsilon(-i\nabla) + V(\mathbf{r})]\psi = E\psi \quad (1)$$

Aquí hemos reemplazado el vector de onda $\mathbf{k}$ por su respectivo operador mecánico-cuántico, $(-i\nabla)$ y $V(\mathbf{r})$ puede representar, por ejemplo: un campo eléctrico o magnético aplicado, un potencial de Coulomb debido a una impureza en el cristal o un potencial de confinamiento.

Ahora apliquemos esta aproximación a nuestro problema. En nuestro caso, el portador de carga es un electrón, por lo que debemos introducir en la ec. (1), una expresión para la banda de conducción del material que se esté considerando (en el caso de huecos, debemos usar una expresión apropiada para la banda de valencia). Sabemos de la teoría de bandas de energía, que en primera aproximación, podemos representar una banda mediante una parábola de la siguiente forma [41]:

$$\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^* \quad (2)$$

donde m^* es la llamada masa efectiva del electrón. Esta es la forma más simple con la que podemos describir nuestra banda de conducción, asume una isotropía total de la estructura de bandas del material y es justa únicamente para regiones cercanas al centro de la banda ($k \rightarrow 0$ o el llamado punto de simetría Γ). Así que, reemplazando la ecuación (2) en la (1) obtendremos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \psi = E \psi \quad (3)$$

que es la ecuación de Schrödinger a resolver para un electrón inmerso en una red periódica y sujeto a un potencial externo V , dentro de la AME, asumiendo una banda de conducción *parabólica*.

Nótese que al utilizar la AME no hemos incluido el potencial de interacción con el cristal y solamente hemos tenido en cuenta los potenciales externos, pero a cambio de esto, hemos tenido que renormalizar la masa de nuestra partícula a una cierta masa efectiva m^* . Esta masa efectiva es constante *sólo* para el modelo de banda parabólica, ya que en general depende de la energía misma del portador, y por lo tanto, queda determinada por la estructura de bandas del material [41]. De hecho, es a través de esta dependencia que se tendrá en cuenta la no parabolicidad de la banda de conducción como se mostrará al final de este capítulo.

El otro término de que se compone nuestro Hamiltoniano, el potencial externo $V(\mathbf{r})$, que para nuestro problema viene dado por el potencial de confinamiento ocasionado por la heteroestructura, se especificará a continuación.

2.2 Potencial de confinamiento y morfología

Inicialmente los puntos cuánticos eran creados aplicando técnicas litográficas, de grabado o campos eléctricos, para limitar el movimiento lateral que de otra forma sería un

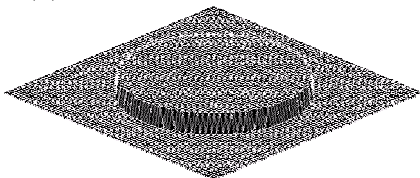
pozo cuántico bidimensional. Estos procesos inducen una gran cantidad de defectos en la estructura cristalina y no logran el fuerte confinamiento deseado para las aplicaciones optoelectrónicas. El crecimiento auto-organizado es una técnica prometedora con la que se pueden obtener puntos con una red cristalina casi perfecta, espacialmente homogéneos y con un alto grado de confinamiento debido a sus pequeñas dimensiones; de ahí, el interés suscitado en los últimos años por estas estructuras.

En los SAQDs, la naturaleza del confinamiento es muy similar a la que se encuentra en los QWs, con una barrera de potencial inducida en la interfaz del punto cuántico con el material que le rodea, por la discontinuidad en la banda de conducción de ambos materiales. Esto hace que la forma del punto cuántico determine la forma del pozo en el que está confinado el portador, y entonces, para poder especificar el potencial de confinamiento debamos precisar matemáticamente la morfología de tales puntos.

Se van a considerar cinco tipos de SAQDs con las siguientes formas: (a) disco, (b) pirámide, (c) lente, (d) anillo de borde rectangular y (e) anillo de borde suave, todos ellos con simetría axial. Ellos pueden ser descritos matemáticamente en coordenadas es cilíndricas mediante una función, $d(\rho)$, que define la dependencia del ancho del punto en la dirección z , d , de la distancia desde el eje de simetría, ρ . A continuación se muestran esquemáticamente estos QDs junto con la función $d(\rho)$ que los describe. En nuestro caso asumimos que el ancho de la llamada capa húmeda (la capa delgada de sustrato sobre la que se deposita inicialmente el material del punto cuántico) es igual a cero: $d_{\min} = 0$.

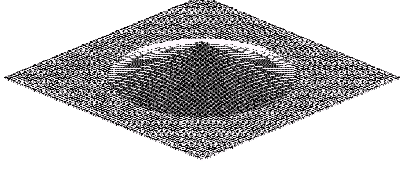
Figura 2.1 SAQDs con diferentes geometrías y la función $d(\rho)$ que las describe.

(a) Disco



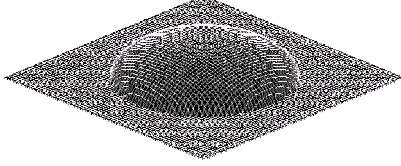
$$d(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho > R_{\text{ext}} \\ d_0, & \rho \leq R_{\text{ext}} \end{cases}$$

(b) Pirámide cónica



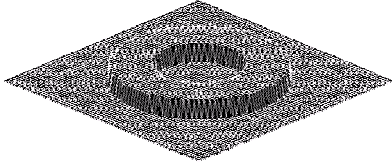
$$d(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho > R_{\text{ext}} \\ (d_0 - d_{\text{min}})(1 - \rho/R_{\text{ext}}) + d_{\text{min}}, & \rho \leq R_{\text{ext}} \end{cases}$$

(c) Lente



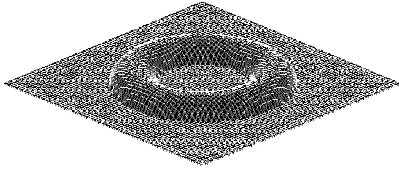
$$d(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho > R_{\text{ext}} \\ (d_0 - d_{\text{min}})\sqrt{1 - (\rho/R_{\text{ext}})^2} + d_{\text{min}}, & \rho \leq R_{\text{ext}} \end{cases}$$

(d) Anillo de borde rectangular



$$d(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho < R_{\text{int}} \wedge \rho > R_{\text{ext}} \\ d_0, & R_{\text{int}} \leq \rho \leq R_{\text{ext}} \end{cases}$$

(e) Anillo de borde suave



$$d(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho < R_{\text{int}} \wedge \rho > R_{\text{ext}} \\ (d_0 - d_{\text{min}})\sqrt{1 - (R_0 - \rho/a)^2} + d_{\text{min}}, & R_{\text{int}} \leq \rho \leq R_{\text{ext}} \end{cases}$$

con $R_0 = \frac{R_{\text{ext}} + R_{\text{int}}}{2}$ y $a = R_{\text{ext}} - R_{\text{int}}$.

Los tamaños y formas de estos SAQDs varían dependiendo de las condiciones usadas al momento del crecimiento y la técnica empleada, pero en general, se han reportado SAQDs con forma piramidal, lenticular y cilíndrica, con diámetros que varían entre los 10-30 nm y anchos de 2-5 nm [32]. Estas dimensiones les dan a los SAQDs un aspecto achatado, donde se logra un mayor grado de confinamiento en la dirección de crecimiento del cristal que en dirección perpendicular a ésta.

Usando entonces la función $d(\rho)$, podemos escribir el potencial de confinamiento de la siguiente forma:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} V_0, & \rho > R_{\text{ext}} \\ 0, & 0 \leq z \leq R_{\text{ext}} \end{cases} = V_0 [\Theta(-z) + \Theta(z - d(\rho))] \quad (4)$$

donde $\Theta(z)$ es la conocida función escalón o de Heaviside y V_0 es la altura de la barrera de potencial, cuyo valor exacto depende de la composición química de la heterojuntura. Hemos obtenido entonces un potencial que fija un valor nulo dentro del SAQD y cierto valor constante fuera de éste, mediante la composición de una serie de pozos rectangulares de barrera finita que se forman para cada valor de ρ , con un ancho $d(\rho)$ en dirección del eje z .

2.3 Parámetros físicos del material

Se ha considerado que el material del que están formados los SAQDs es el GaAs, rodeados de una solución ternaria de $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ (los subíndices indican las concentraciones con las que se encuentra cada elemento) que actúa como barrera. Para este material (GaAs) se encuentran en la literatura [49] los siguientes valores correspondientes a la masa efectiva del electrón (en aproximación de banda parabólica) y la constante dieléctrica:

$$m^* = 0.0665 \quad (5a)$$

$$\epsilon = 12.5 \quad (5b)$$

donde m^* está dada en unidades de la masa del electrón libre. Es importante aclarar, que no se ha tenido en cuenta en los cálculos numéricos la diferencia entre las masas efectivas y constantes dieléctricas de ambos materiales, lo cual se traduce en utilizar los mismos valores de dichos parámetros tanto para el pozo como la barrera. Por otra parte, la altura de la barrera depende de la concentración de aluminio y puede ser estimada a partir de la siguiente fórmula empírica [49]:

$$V_0 = 0.65\Delta E_g = 0.65 \cdot 1.247x \text{ eV} \quad (6)$$

donde ΔE_g es la diferencia entre las brechas de energía del GaAs y el $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$.

2.4 Ecuación de Schrödinger adimensional

Con el propósito de escribir más claramente las ecuaciones y facilitar el manejo de los datos numéricos al realizar los cálculos, se utilizan en este trabajo el Rydberg efectivo y el radio de Bohr efectivo como unidades adimensionales para la energía y la distancia respectivamente, definidas a partir de los parámetros físicos del material, mediante las siguientes relaciones:

$$\text{Ry}^* = \frac{m^* e^4}{2 \epsilon^2 \hbar^2} \quad a_0^* = \frac{\epsilon \hbar^2}{m^* e^2} \quad (7)$$

En el caso de heteroestructuras de GaAs/ $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ dichas unidades toman los valores, $a_0 = 9.8 \text{ nm}$ y $\text{Ry}^* = 5.83 \text{ meV}$, aproximadamente. Además, usando la ec. (6) con la correspondiente concentración de aluminio (30% en nuestro caso), hallamos un valor para la altura de la barrera, V_0 , de aproximadamente 40 Ry^* .

Utilizando las ecuaciones (7) y aplicando un simple cambio de variables podemos cambiar el Hamiltoniano dado por la ecuación (3), $H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r})$, por un Hamiltoniano adimensional, H_{adim} , escrito en la siguiente forma

$$H_{\text{adim}} = -\nabla^2 + V(\mathbf{r}) \quad (8)$$

en el cual ya no aparecen los parámetros físicos del sistema y en el que todas las distancias y energías están medidas con nuestras nuevas unidades efectivas. De manera que podemos escribir la ecuación de Schrödinger para un electrón confinado en un SAQD asumiendo banda de conducción parabólica en la forma

$$[-\nabla^2 + V(\mathbf{r})]\psi = E\psi \quad (9)$$

Ésta será la ecuación a resolver en primer lugar para obtener las energías de confinamiento de la partícula, usando los métodos presentados en el siguiente capítulo: aproximación adiabática y barrido trigonométrico.

2.5 Inclusión de la no-parabolicidad de la banda

Al utilizar la AME hemos supuesto que las energías electrónicas no se alejan mucho del piso de la banda de conducción, de manera que la aproximación parabólica de la banda es justificable. Sin embargo, en estructuras con un alto grado de confinamiento, como los SAQDs, los niveles energéticos se encuentran alejados de este nivel de referencia y por lo tanto un cálculo más exacto de los mismos debe incluir una expresión más precisa para la banda. Si asumimos que la estructura de la banda es isotrópica y posee simetría de inversión, podemos representar la banda mediante una expansión en serie de potencias pares de k de la siguiente manera:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = ak^0 + bk^2 + ck^4 + \dots \quad (11)$$

donde $a = 0$ debido a que tomamos como origen de energía el fondo de la banda y donde $b = \hbar^2/2m^*$ es el coeficiente del término parabólico de acuerdo con la ec. (3). El siguiente término, proporcional a k^4 , es la siguiente mejor aproximación que da cuenta de la no-parabolicidad de la banda; truncando la serie en este punto obtenemos:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \left(\hbar^2/2m^*\right)k^2 + ck^4 \quad (12)$$

Despejando k de esta ecuación alcanzamos

$$k = \left[\frac{m^*}{\alpha \hbar^2} \left(1 - \sqrt{1 - 4\alpha' \varepsilon} \right) \right]^{1/2} \quad (13)$$

donde $\alpha' = -\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^2 c$, y c es el coeficiente proporcional a k^4 , que se puede determinar, por ejemplo, usando teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de 14 bandas [46]. En el caso del GaAs $\alpha' = 0.64 \text{ eV}^{-1}$, y como generalmente, estamos interesados en energías de unos cuantos meV, el producto $\alpha'\varepsilon \ll 1$, y podemos expandir la raíz interna para tener

$$k \approx \frac{[2m^* \varepsilon (1 + \alpha' \varepsilon)]^{1/2}}{\hbar} \quad (14)$$

Notamos entonces que si $\varepsilon \rightarrow 0$, estaremos en la región parabólica de la banda y por lo tanto tendremos que el vector de onda tiende a la familiar ecuación $k = \sqrt{2m^* \varepsilon} / \hbar$. Por ende, el factor $(1 + \alpha' \varepsilon)$ da la corrección debida a no-parabolicidad de menor orden. Podemos entonces expresar los efectos no parabólicos de la banda de conducción definiendo una masa efectiva dependiente de la energía a través de

$$m^*(\varepsilon) = m^*(0)(1 + \alpha' \varepsilon) \quad (15)$$

donde como vemos, para energías cercanas al piso de la banda de conducción la masa efectiva toma el valor constante $m^*(0)$.

Podríamos usar en nuestros cálculos, una expresión hallada teóricamente partiendo de una expresión más precisa de la banda de energía. Braun y Rössler [46], por ejemplo, han mostrado que la banda de conducción de un compuesto semiconductor de los grupos III-V, tal como lo es el GaAs, está dada por

$$\begin{aligned} \varepsilon(\mathbf{k}) = & \hbar^2 k^2 / 2m^* + \alpha_0 k^4 + \beta_0 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_z^2) \\ & \pm \gamma_0 [k^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_x^2 k_z^2) - 9k_x^2 k_y^2 k_z^2]^{1/2} \end{aligned} \quad (16)$$

donde α_0 , β_0 y γ_0 son parámetros de no-parabolicidad que dependen del material considerado y cuyos valores para el GaAs son los siguientes:

$$\alpha_0(\text{eV } \text{\AA}^4) = -2107; \quad \beta_0(\text{eV } \text{\AA}^4) = -2288; \quad \gamma_0(\text{eV } \text{\AA}^3) = -27.57$$

Esta ecuación de la banda posee dos términos adicionales que describen la anisotropía de la banda y la violación de la simetría de inversión en el cristal respectivamente. Sin embargo, en nuestros cálculos se utilizará una fórmula empírica obtenida por Kolbas [47] a través de mediciones ópticas del semiconductor en bloque:

$$m^*(\varepsilon) = 0.0665 + 0.0436\varepsilon + 0.236\varepsilon^2 - 0.147\varepsilon^3 \quad (17)$$

La forma en que esta ecuación será usada para calcular las correcciones a la energía por no-parabolicidad de la banda, se mostrará al final del siguiente capítulo.

3. Teoría

3.1 Aproximación adiabática (AA)

Considérese la ecuación de Schrödinger tridimensional para un electrón confinado dentro de un SAQD asumiendo un modelo de banda parabólica dentro del marco de la AME y usando unidades adimensionales:

$$\left[-\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]f(\mathbf{r}) = Ef(\mathbf{r}) \quad (1)$$

Al resolver esta ecuación podemos aprovechar la simetría axial de los SAQDs escribiéndola en coordenadas cilíndricas (ρ, ϕ, z) , de la siguiente manera:

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \phi^2} + V(\rho, z)\right]f(\rho, \phi, z) = Ef(\rho, \phi, z) \quad (2)$$

donde $V(\rho, z)$ es el potencial de confinamiento especificado con anterioridad. Tal simetría nos permite escribir soluciones del tipo

$$f(\rho, \phi, z) = e^{im\phi} \Psi_m(\rho, z) \quad (3)$$

que si reemplazamos en la ec. (2) la convierten en la ecuación 2D en (ρ, z) :

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m^2}{\rho^2} + V(\rho, z)\right]\Psi_m(\rho, z) = E_m \Psi_m(\rho, z) \quad (4)$$

Debido a que el confinamiento en la dirección de crecimiento del cristal (eje z) es mucho más fuerte que en dirección lateral para los SAQDs, podemos utilizar el enfoque de la AA y desacoplar el movimiento en ambas direcciones, y así escribir la función de onda

electrónica como el producto de una función de onda radial $\psi(\rho)$ y una función de onda en z , $\psi_\rho(z)$ (que tiene a ρ como parámetro), de la siguiente manera:

$$\Psi(\rho, z) = \psi(\rho)\psi_\rho(z) \quad (5)$$

Reemplazando esta solución en la ec. (4) obtenemos las siguientes dos ecuaciones unidimensionales de segundo orden:

$$\left[-\frac{d^2}{dz^2} + V(\rho, z) \right] \psi_\rho(z) = E_z(\rho) \psi_\rho(z) \quad (6)$$

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + E_z(\rho) \right] \psi(\rho) = E_m \psi(\rho) \quad (7)$$

La primera describe el movimiento en dirección z , habiendo una ecuación diferente para cada valor del parámetro ρ . Esta ecuación describe un pozo cuántico rectangular de barrera finita, con un ancho $d(\rho)$ y altura de barrera V_0 . Las energías E_z halladas serán pues una función de ρ , con una fuerte dependencia en el perfil del punto cuántico y además, servirán como potencial efectivo de la ecuación radial (7). Con este procedimiento llegamos a unos resultados muy cercanos a los obtenidos solucionando la ecuación (4) directamente por métodos numéricos, como se ha mostrado, por ejemplo, en el trabajo de Peeters [32].

La ec. (6) tiene solución analítica, claramente; sus soluciones son de dos tipos:

$$\psi_\rho^+(z) = \begin{cases} \cos \kappa z, & |z| \leq d(\rho)/2 \\ \cos \kappa \frac{d}{2} \exp[-\beta(|z| - d/2)], & |z| \geq d(\rho)/2 \end{cases} \quad (8a)$$

$$\psi_\rho^-(z) = \begin{cases} \sin \kappa z, & |z| \leq d(\rho)/2 \\ \sin \kappa \frac{d}{2} \exp[-\beta(|z| - d/2)], & |z| \geq d(\rho)/2 \end{cases} \quad (8b)$$

donde los signos + y – representan los niveles pares e impares respectivamente, y en donde se han definido κ y β como: $\kappa = \sqrt{E_z(\rho)}$; $\beta = \sqrt{V_0 - E_z(\rho)}$. Además, los niveles energéticos pueden ser calculados a partir de las siguientes ecuaciones trascendentes obtenidas aplicando las condiciones de contorno:

$$\kappa \tan\left(\kappa \frac{d}{2}\right) = \beta \quad \text{solución par} \quad (9a)$$

$$\kappa \cot\left(\kappa \frac{d}{2}\right) = -\beta \quad \text{solución impar} \quad (9b)$$

Éstas han sido solucionadas numéricamente en este trabajo, utilizando el algoritmo de bisección para encontrar raíces.

3.2 Solución de la ecuación radial

Analicemos ahora la ecuación en ρ . En primer lugar, para $\rho \geq R_{\text{ext}}$, ésta toma la forma

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + (V_0 - E_m) \right] \psi(\rho) = 0 \quad (10)$$

donde vemos que se ha asignado el valor $E_z(\rho \geq R_{\text{ext}}) = V_0$, para puntos que se encuentren sobre la barrera. La ec. (10) es la llamada *ecuación modificada de Bessel*, que tiene como sus soluciones las funciones de Bessel modificadas [48]:

$$\psi(\rho) = c_1 I_m(\chi \rho) + c_2 K_m(\chi \rho) \quad (11)$$

donde se define χ como: $\chi^2 = V_0 - E_m$. Debido a que la función de onda debe permanecer finita cuando $\rho \rightarrow \infty$, $c_1 = 0$ y su solución será de la forma:

$$\psi(\rho) = cK_m(\chi\rho) \quad (12)$$

En el otro caso, cuando $\rho \leq R_{\text{ext}}$, tendremos que la ec. (7) se convierte en

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{m^2}{\rho^2} + E_z(\rho) - E_m \right] \psi(\rho) = 0 \quad (13)$$

que tiene como condiciones de contorno: $\psi(0) < \infty$, y

$$\frac{\psi'(R_{\text{ext}})}{\psi(R_{\text{ext}})} = \chi \frac{K'_m(\chi R_{\text{ext}})}{K_m(\chi R_{\text{ext}})} \quad (13a)$$

la cual se obtiene utilizando la condición de continuidad de la función de onda y su derivada, “cosiéndola” con la solución externa al pozo cuántico. Este problema requiere el uso de alguna técnica numérica para su solución ya que el potencial no es constante sino, como se recuerda, es obtenido mediante la interpolación de las energías obtenidas resolviendo la ec. (6). Se ha elegido para nuestro estudio, el método de barrido trigonométrico que nos permite, a través de un cambio de variables, reducir la ecuación diferencial de segundo orden (13) a una de primer orden, que se puede resolver fácilmente usando por ejemplo un algoritmo Runge-Kutta. Antes de aplicar el método de barrido a nuestro problema es conveniente hacer un cambio de variable para evitar los problemas asociados con la condición de frontera $\psi(0) < \infty$, que es difícil de implementar numéricamente y con la singularidad existente en este punto gracias al término que acompaña a la primera derivada. Haciendo pues $\psi(\rho) = \rho^m u(\rho)$, podemos expresar nuestra ecuación diferencial de la siguiente manera:

$$\frac{d^2 u}{d\rho^2} + \frac{2m+1}{\rho} \frac{du}{d\rho} + [E_m - E_z(\rho)]u = 0 \quad (14)$$

con las siguientes condiciones de contorno:

$$u(0)=0 \quad \frac{u'(R_{ext})}{u(R_{ext})} = \frac{m}{R_{ext}} - \chi \frac{K'(\chi R_{ext})}{K(\chi R_{ext})} \quad (14a)$$

donde ahora tenemos la ventaja esencial de que la singularidad mencionada, en $\rho = 0$, ha sido removida.

Introduzcamos entonces las coordenadas polares de Poincaré (A, θ) que son funciones a su vez de ρ :

$$u(\rho) = A(\rho)\cos\theta(\rho); \quad u'(\rho) = A(\rho)\sin\theta(\rho) \quad (15)$$

con las que obtenemos, después de cierta manipulación algebraica, la siguiente ecuación de primer orden en θ :

$$\theta'(\rho) = - \left[\sin^2 \theta(\rho) + (E_m - E_z) \cos^2 \theta(\rho) + \frac{2m+1}{\rho} \sin \theta(\rho) \cos \theta(\rho) \right] \quad (16)$$

sujeta a las nuevas condiciones de contorno

$$\theta(0) = \pi/2; \quad \theta'(R_{ext}) = \pi/2 - n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (16a)$$

La ec. (16) junto con la primera condición de frontera dada en la (16a) constituyen un problema de Cauchy que puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro E_m obteniéndose como solución la función de dos variables $\theta(\rho, E_m)$. Luego utilizamos la segunda condición de contorno con la cual llegamos a la ecuación trascendente

$$\theta(R_{ext}, E_m) = \pi/2 - n\pi, \quad n = 1, 2, \dots \quad (17)$$

y en donde el número cuántico n nos da el nivel de energía buscado. Por último se calcula la amplitud $A(\rho)$ realizando la integral

$$A(\rho) = \exp \left\{ \int_0^{\rho_{\text{ext}}} \left[(1 - E_m + E_z) \sin \theta(\rho) \cos \theta(\rho) - \frac{2m+1}{\rho} \sin^2 \theta(\rho) \right] d\rho \right\} \quad (18)$$

3.3 Procedimiento de re-escalamiento de las energías

Hasta el momento hemos asumido un modelo de banda parabólica para resolver el problema del electrón confinado dentro de un SAQD. Con base en estos resultados podemos estimar la corrección debido a la dependencia existente entre la masa efectiva y la energía (no-parabolicidad de la banda de conducción), por medio de un re-escalamiento de las energías obtenidas utilizando una expresión $m^*(\varepsilon)$ apropiada. Este procedimiento ha sido utilizado antes para puntos cuánticos esféricos [44,45].

Como ya se había mencionado, usaremos la relación empírica obtenida por Kolbas que se reproduce a continuación (ec. 16 del capítulo 2):

$$m^*(\varepsilon) = 0.0665 + 0.0436\varepsilon + 0.236\varepsilon^2 - 0.147\varepsilon^3$$

Utilizando esta expresión podemos redefinir nuestra unidad de energía, el Ry^* , a un nuevo Rydberg efectivo dependiente de la energía, a través de la masa efectiva, de la siguiente forma:

$$\text{Ry}^*(\varepsilon) = \frac{e^4}{2\varepsilon^2 \hbar^2} m^*(\varepsilon) \quad (19)$$

con el cuál podemos plantear la siguiente ecuación trascendente para ajustar las energías a nuestra nueva unidad

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\text{Ry}^*(\tilde{\varepsilon})} \quad (20)$$

donde $\tilde{\varepsilon}$ es la energía corregida debido a la no-parabolicidad de la banda. Esta ecuación se ha resuelto utilizando el algoritmo de Newton-Raphson para encontrar raíces. Los resultados se exponen en el siguiente capítulo.

4. Resultados

El efecto de no-parabolicidad de la banda de conducción conlleva, como ya se ha explicado, al aumento de la masa efectiva electrónica a medida que nos acercamos a la parte superior de la banda. Como resultado, se puede esperar que en general, este efecto sea esencial para pozos cuánticos de pequeñas dimensiones, ya que con la disminución del tamaño, los niveles energéticos suben y se desplazan hacia el “techo” de la BC, en contraste al caso de pozos cuánticos (QWs) de tamaños grandes, donde este efecto es notable sólo para los niveles fuertemente excitados. En los SAQDs, donde el efecto de confinamiento es casi siempre notable debido a que el espesor de estas heteroestructuras es del orden de apenas algunos nanómetros, la mayoría de los niveles energéticos encontrados están ubicados en la región superior de la BC donde el efecto de no-parabolicidad es muy fuerte. Por esta razón es importante tener en cuenta este efecto para todos los SAQDs independientemente que sus tamaños laterales sean grandes o pequeños relativamente. Además es posible demostrar que debido a este fuerte confinamiento, dentro de los SAQDs se encontrarán solamente un número pequeño de niveles energéticos discretos, como se ha podido evidenciar directamente en nuestros cálculos.

En la Fig. 1 se muestran algunos niveles energéticos de un electrón confinado en un disco cuántico de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ para alturas de $4\text{nm} = 0,410 a_0^*$ (a) y $8\text{nm} = 0,82 a_0^*$ (b), en función del radio de la heterojuntura. Se puede ver que todos los niveles energéticos bajan con el aumento del radio, lo cuál es natural gracias a la disminución del confinamiento. Las líneas sólidas presentan niveles energéticos calculados bajo un modelo de banda parabólica y las líneas punteadas son los resultados del cálculo para el modelo que incluye el efecto de no-parabolicidad. La diferencia entre los dos cálculos es bastante apreciable para radios pequeños del punto cuántico (franja de radios entre 5 y 30nm), disminuyendo a medida que el radio se hace más grande. También se ve que aún para el caso de radios grandes, donde el confinamiento lateral ha disminuido hasta hacerse casi despreciable, todavía permanece un confinamiento transversal suficientemente fuerte como para dejar el efecto de no-parabolicidad notable. Adicionalmente, se ve que, la diferencia entre los cálculos para

ambos modelos de banda disminuye y los niveles energéticos se acercan entre sí mucho más rápidamente al aumentarse el radio del punto cuántico.

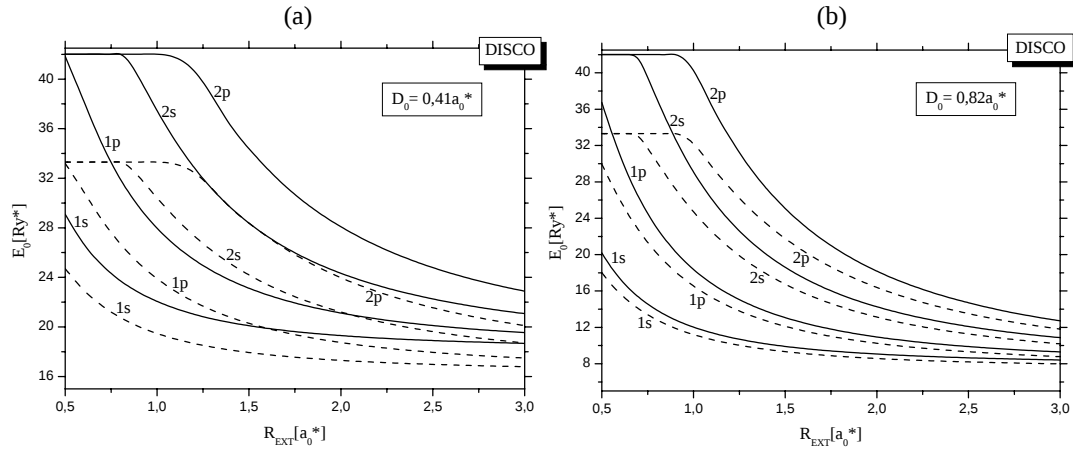


Fig. 1 Primeros niveles de energía de un disco cuántico de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ de altura $4\text{nm} = 0.41a_0^*$ (a) y $8\text{nm} = 0.82a_0^*$ (b), en función de su radio. Las líneas sólidas corresponden al cálculo para el modelo de banda parabólica y las líneas a trazos tienen en cuenta el efecto de no-parabolicidad.

En la Fig. 2 se muestran las energías de los niveles 1s y 2s en función de la altura de un disco cuántico de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ con radio exterior fijado en 40nm . Se puede ver que el aumento de la altura del disco desde 1nm hasta apenas 10nm produce un decrecimiento significativo de las energías de estos niveles, lo que muestra una vez más el papel importante que juega el confinamiento en dirección transversal (la dirección de crecimiento del cristal) para puntos cuánticos auto-ensamblados.

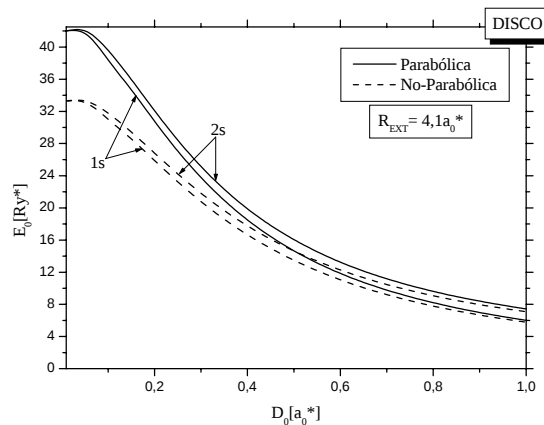


Fig. 2 Energías de los niveles 1s y 2s en función de la altura de un disco cuántico de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ con radio externo de $40\text{nm} = 4.1a_0^*$.

Observemos a continuación lo que sucede al espectro energético cuando consideramos un SAQD de forma piramidal. Este caso resulta interesante porque con esta geometría se logra el mayor confinamiento del electrón, debido al menor volumen al que está determinada la partícula. Esperamos de antemano que los niveles energéticos crezcan y que además el efecto de no-parabolicidad sea fuerte aún para radios del punto cuántico relativamente grandes. En la fig. 3, se muestran los niveles energéticos correspondientes a un punto cuántico piramidal de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ de (a) 4nm y (b) 8nm de altura en función del radio externo. Nuestras anteriores sospechas son confirmadas por nuestros cálculos. Además de un comportamiento similar al caso del disco cuántico encontramos, comparando las figuras 1 y 3, un crecimiento notable de los niveles energéticos acompañados de un aumento en la diferencia entre los cálculos para ambos tipos de banda, en el intervalo de radios de 10 a 30nm. Además podemos ver en la fig. 3 que existen muy pocos niveles de energía para radios menores de 20nm, alcanzándose rápidamente la altura de la barrera al disminuirse el radio.

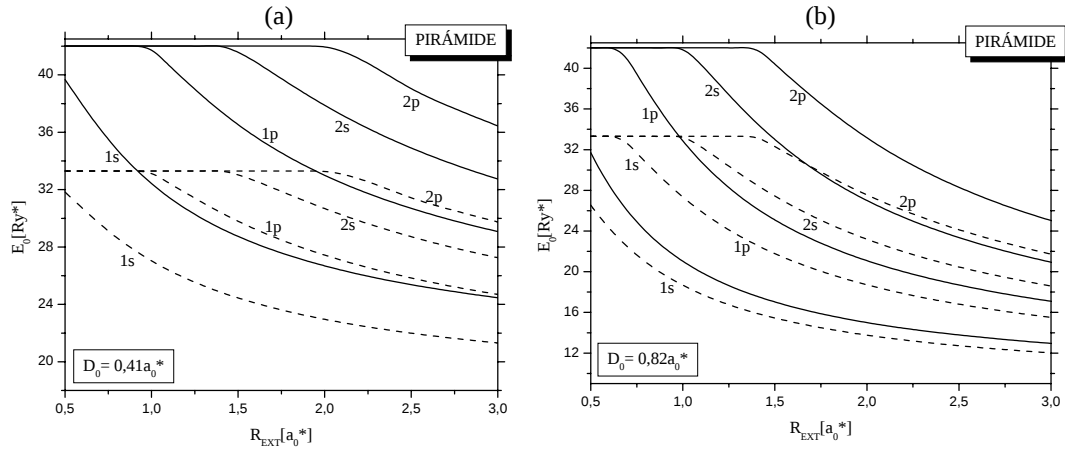


Fig. 3 Energías de los primeros niveles de un SAQD piramidal de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ de altura 4nm = $0.41a_0^*$ (a) y 8nm = $0.82a_0^*$ (b), en función de su radio externo. Las líneas sólidas corresponden al cálculo para el modelo de banda parabólica; las líneas a trazos tienen en cuenta el efecto de no-parabolicidad.

En la fig. 4 se muestra la dependencia de la altura del punto cuántico piramidal de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$, con radio externo fijo de 40nm, para los niveles 1s y 2s de energía. Se puede destacar que aún en este caso de gran confinamiento, la existencia del confinamiento

transversal es muy importante ya que para alturas de apenas 10nm los niveles energéticos descienden hasta cerca del piso de la banda.

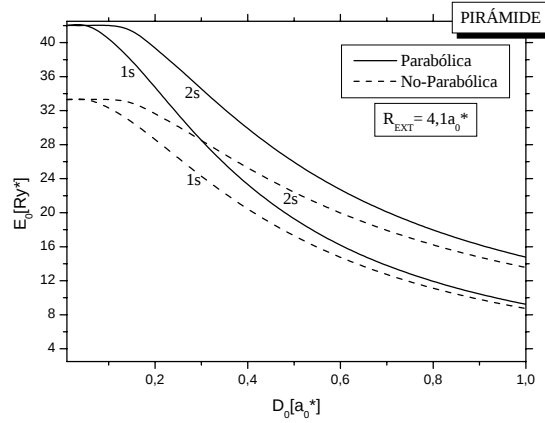


Fig. 4 Energías de los niveles 1s y 2s en función de la altura de una pirámide cuántica de $Ga_{0.3}Al_{0.7}As$ con radio externo de $40nm = 4,1a_0^*$.

Es importante resaltar un detalle del método de re-escalamiento de las energías utilizado para incluir el efecto de no-parabolicidad. Este método funciona bien hasta un cierto radio en el cual, cada nivel de energía en el modelo de banda parabólica alcanza la altura de la barrera. Para radios menores que un cierto radio crítico, el re-escalamiento falla ya que como se aprecia en las gráficas los cálculos para banda no-parabólica no tienen la oportunidad de seguir creciendo, que es lo que se espera si la masa efectiva aumenta, al seguir disminuyendo el radio externo y por lo tanto aumentándose el nivel de energía. Este problema puede ser solucionado si introducimos desde el principio, en nuestro Hamiltoniano, unidades re-escaladas con la fórmula más precisa para la banda de energía y efectuando a continuación todos los cálculos numéricos mencionados.

Análisis similares pueden hacerse para las gráficas pertenecientes a puntos cuánticos de forma lenticular (como los mostrados en la fig. 5 y 6) y anular (fig. 7) del mismo material, en las que se obtienen todas las características examinadas arriba para las otras geometrías. Se puede destacar aquí la pequeña separación existente entre los niveles energéticos correspondientes a un mismo número cuántico principal n para diferentes valores del número cuántico orbital (niveles 1s y 1p, o, niveles 2s y 2p) para el punto cuántico de

forma anular. Una posible causa de este comportamiento puede ser el fuerte confinamiento radial de este tipo de geometría, que hace que el término en el que va el número cuántico orbital m , i.e., m^2/ρ^2 , no varíe demasiado para los diferentes valores de m (ver ec. (10) del capítulo 3).

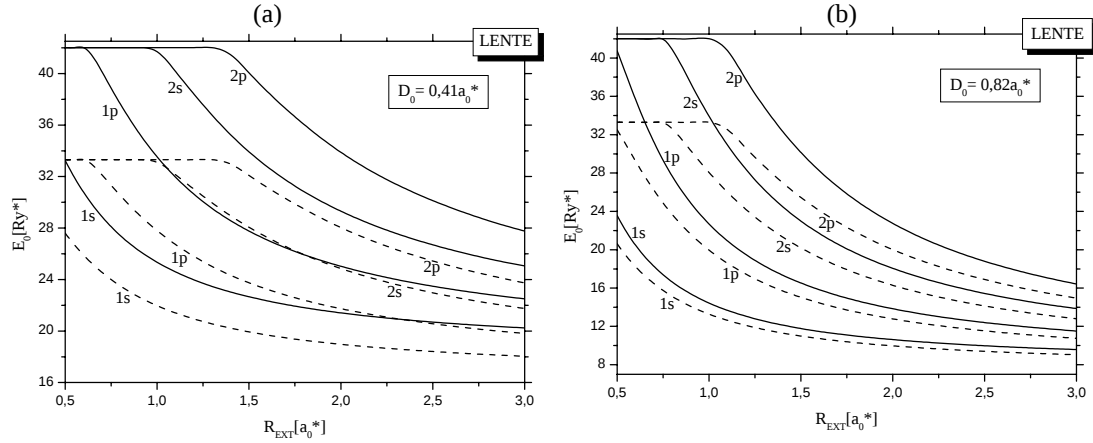


Fig. 5 Energías de los niveles más bajos de un QD lenticular de $Ga_{0.3}Al_{0.7}As$ de altura $4nm = 0,41a_0^*$ (a) y $8nm = 0,82a_0^*$ (b), como función del radio. Las líneas sólidas corresponden al cálculo para el modelo de banda parabólica; las líneas a trazos tienen en cuenta el efecto de no-parabolicidad.

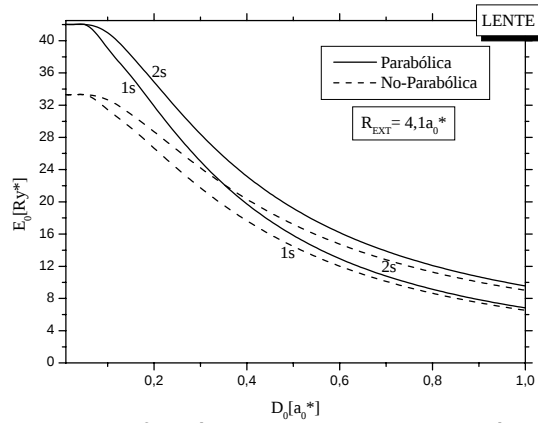


Fig.6 Energías de los niveles 1s y 2s en función de la altura de un lente cuántico de $Ga_{0.3}Al_{0.7}As$ con radio externo de $40nm = 4,1a_0^*$.

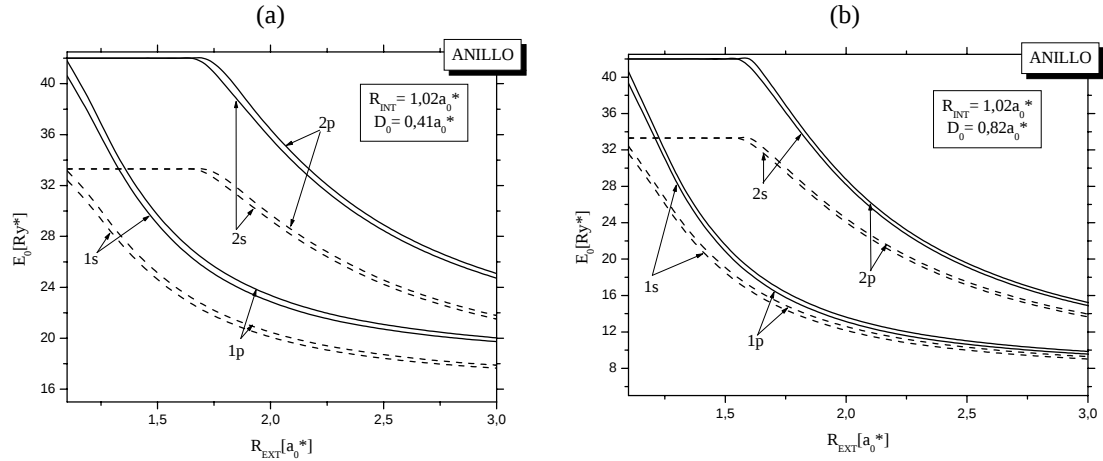


Fig. 7 (a) Energías de los niveles más bajos de un anillo cuántico de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ con radio interno de $10\text{nm} = 1,02a_0^*$ y altura $4\text{nm} = 0,41a_0^*$ en función de su radio externo. (b) Para alturas de $8\text{nm} = 0,82a_0^*$. Las líneas sólidas corresponden al cálculo para el modelo de banda parabólica; las líneas a trazos tienen en cuenta el efecto de no-parabolicidad.

Por último presentamos una comparación entre las diferentes geometrías de SAQDs analizadas para el nivel de energía 1s, asumiendo primero una altura de 4nm (Fig. 8a) dejando variar el radio externo; y luego para un radio externo fijo de 40nm (Fig. 8b) variando esta vez la altura del punto cuántico. Se aprecia cómo la pirámide es la estructura con mayor confinamiento con una curva de energía que sobrepasa a las pertenecientes a las demás geometrías. También se ve que la diferencia entre las curvas para ambos modelos es mucho más amplia para la pirámide que para el disco o la lente, como ya se ha mencionado.

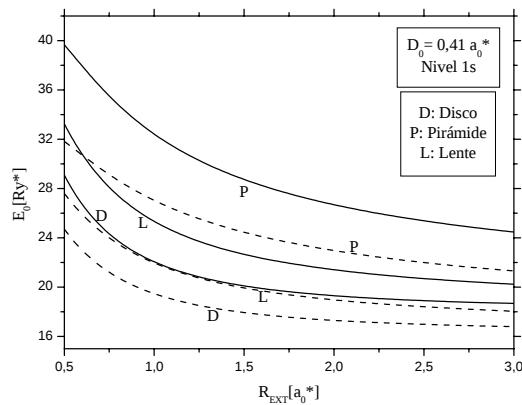


Figura 8a. Energías del estado 1s para diferentes formas de SAQDs de $\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}$ de altura $4\text{nm} = 0,41a_0^*$, en función de su radio externo. Las líneas sólidas corresponden al cálculo para el modelo de banda parabólica; las líneas a trazos tienen en cuenta el efecto de no-parabolicidad.

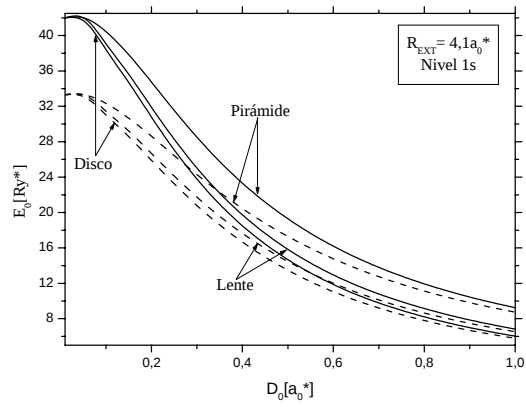


Figura 8b. Idéntica a la figura 8 pero en función de la altura.

5. Conclusiones

- ☒ Se ha analizado el efecto de no-parabolicidad de la banda de conducción del GaAs sobre los niveles energéticos de un electrón confinado dentro de SAQDs axialmente simétricos, encontrándose una notable diferencia entre las energías calculadas bajo un modelo de banda parabólica y las calculadas mediante el re-escalamiento de energías. Esto muestra la importancia del efecto de no-parabolicidad en estas estructuras debido al alto grado de confinamiento al que se someten los portadores.
- ☒ Dentro de las geometrías analizadas se encontró que la pirámide es la que logra el mayor confinamiento y por lo tanto donde se logra la mayor variación de los niveles energéticos con respecto a un modelo de banda parabólica.
- ☒ Se mostró, asimismo, que el confinamiento transversal juega un papel principal en las energías electrónicas ya que al disminuir el confinamiento lateral a casi cero permanece un efecto de no-parabolicidad notable. Además al variar la altura del SAQD y por lo tanto disminuir el confinamiento transversal se ve cómo los niveles energéticos descienden a casi el piso de la banda convergiendo los cálculos para ambos modelos de banda.
- ☒ Por último, se destaca la posibilidad de mejorar el método de re-esacalamiento mediante la introducción de unidades energéticas re-escaladas con nuestra fórmula más precisa para la banda desde el comienzo en nuestro Hamiltoniano.

6. Referencias

1. Chang, L. L., Esaki, L., Tsu, R., Appl. Phys. Lett. 24, 8227 (1994).
2. Dingle, R., Wiegmann, W., Henry, C. H., Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974).
3. Petroff, P. M., Gossard, A. C., Logan, R. A., Wiegmann, W., Appl. Phys. Lett. 41, 635 (1982).
4. Reed, M. A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W., Lee, J.W., Smith, H. D., J. Vacuum Sci. Technol. B, 4, 358 (1986).
5. Cibert, J., Petroff, P. M., Dolan, G. J., Pearton, S. J., Gossard, A. C., English, J. H., Appl. Phys. Lett. 49, 1275 (1986).
6. Demel, T., Heitmann, D., Grambow, P., Ploog, K., Phys. Rev. Lett. 64, 788 (1990).
7. Smith, T. P., Lee, K. Y., Knoedler, C. M., Hong, J. M., Kern, D. P., Phys. Rev. B 45, 14156 (1992).
8. Ashoori, R. C., Störmer, H. L., Weiner, J. S., Pfeifer, L. N., Pearton, S. J., Baldwin, K. W., West, K., Phys. Rev. Lett. 68, 3088 (1992).
9. Ashoori, R. C., Störmer, H. L., Weiner, J. S., Pfeifer, L. N., Baldwin, K. W., West, K., Phys. Rev. Lett. 71, 613 (1993).
10. Brunner, K., Bockelmann, U., Abstreiter, G., Walther, G., Böhm, G., Tränkle, G., Weimann, G., Phys. Rev. Lett. 69, 3216 (1992).
11. Ekimov, A. I., Efros, A. L., Onushenko, A. A., Solid State Comm. 56, 921 (1985).
12. Fukui, T., Ando, S., Tokura, Y., Appl. Phys. Lett. 58, 2018 (1991).
13. Petroff, P. M., Denbaars, S. P., Superlattices and Microstructures 15, 15 (1994).
14. Raymond, S., Fafard, S., Poole, P. J., Wójs, A., Hawrylak, P., Charbonneau, S., Leonard, D., Leon, R., Petroff, P. M., Merz, J. L., Phys. Rev. B 54, 11548 (1996).
15. Marzin, J. Y., Gérard, J. M., Izraël, A., Barrier, D., Bastard, G., Phys. Rev. Lett. 73, 716 (1994).
16. Stranski, I. N., von Krastanow, L., Akad. Wiss. Let. Mainz Math. Natur K1 Iib 146, 797 (1939).
17. Kirstaedter, N., Ledentsov, N. N., Grundmann, M., Bimberg, D., Ustinov, V. M., Ruvimov, S. S., Maximov, M. V., Kop'ev, P. S., Alferov, Zh. I., Richter, U., Werner, P., Gösele, U., Heydenreich, J., Electronics Lett. 30, 1416 (1994).
18. Shoji, H., Mukai, K., Ohtsuka, N., Sugawara, M., Uchida, T., Ishikawa, H., IEEE Photonocs Technol. Lett. 7, 1385 (1995).
19. Ashoori, R. C., Nature 379, 413 (1996).
20. Reed, M. A., Sci. Am., January (1993).
21. Bastard, G., Phys. Rev. B 24, 4714 (1981).
22. Green, R. L., Bajaj, K. K., Solid State Comm. 45, 825 (1983).
23. Green, R. L., Bajaj, K. K., Phys. Rev. B 31, 913 (1985).
24. Fraizzoli, S., Basan, F., Buczko, R., Phys. Rev. B 41, 5096 (1990).

25. Branis, S. V., Li, G., Bajaj, K. K., Phys. Rev. B 47, 1316 (1993).
26. Montes, A., Duque, C. A., Porras-Montenegro, N., J., Phys. Condensed Matter 10, 5351 (1998).
27. Zhu, J.-L., Phys. Rev. B 39, 8780 (1989).
28. Ribeiro, F. J., Latge, A., Phys. Rev. B 50, 4913 (1994).
29. Zhu, J.-L., Xiong, J.-J., Gu, B.-L., Phys. Rev. B 41, 6001 (1990).
30. Zhu, J.-L., Zhao, J.-H., Xiong, J.-J., Phys. Rev. B 50, 1832 (1994).
31. Zhu, J.-L., Xi Chen, Phys. Rev. B 50, 4497 (1994).
32. Peeters, F. M., Schweigert, V. A., Phys. Rev. B 53, 1468 (1996).
33. Porras-Montenegro, N., Pérez-Merchancano, S. T., Phys. Rev. B 46, 9780 (1992).
34. Song, J., Ulloa, S. E., Phys. Rev. B 63, 125302 (2001).
35. Szafran, B., Adamowski, J., Bednarek, S., J. Phys. Condensed Matter 14, 73 (2002).
36. Mikhailov, I. D., Marín, J. H., García, F., Phys. Stat. Sol. (b) 242, 1636 (2005).
37. Wojs, A., Hawrylak, P., Fafard, S., Jacak, L., Phys. Rev. B 54, 5604 (1996).
38. Mikhailov, I. D., Betancur, F. J., Escorcía, R. A., Sierra-Ortega, J., Phys. Stat. Sol. B 234, 590 (2002).
39. Mikhailov, I. D., Betancur, F. J., Escorcía R. A., Sierra-Ortega, J., Phys. Rev. B 67, 115317 (2003).
40. Luttinger, J.M., Kohn, W., Phys. Rev. 97, 869 (1955).
41. Kittel, C., *Introduction to solid state physics*, 7th Ed., Wiley, NY (1996).
42. Chaudhuri, S., Bajaj, K. K., Phys. Rev. B 29, 1803 (1984).
43. Ekenberg, E., Phys. Rev. B 36, 6152 (1987).
44. García, C., Mikhailov, I. D., Phys. Stat. Sol. (b) 220, 201 (2000).
45. Pang, T., Louie, S. G., Phys. Rev. Lett. 65, 1635 (1990).
46. Braun, M., Rössler, U., J. Phys. C 18, 3365 (1985).
47. Kolbas, R.L., Ph.D. thesis, University of Illinois at Urbana-Champaign, 1979
48. Arfken, G. B., Weber, H. J., *Mathematical Methods for Physicists*, 5th Ed., Harcourt Academic Press (2001).
49. Janssens, K. L., Peeters, F. M., Schweigert, V. A., Phys. Rev. B 63, 205311 (2001).

Anexo: Programa en FORTRAN

```
c ----- c
c Programa para calcular el espectro energetico y funciones de onda de
c un electron dentro de SAQDs axialmente simetricos con diferentes
c formas.
c Inicio: Febrero 23 de 2006
c Finalizacion: Mayo 5 de 2006
c ----- c
```

\$DEBUG

\$LARGE

```
PROGRAM FREEE
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PARAMETER (NP=20,NG=100,NM=1000,NIVEL=1)
PARAMETER(AME=0.0665,TOL=1.0D-8,C=0.30)
PARAMETER(NRAD=19,ND=14,NLEVEL=4)
COMMON /MODEL/ DISK, PYRAMID, RING, LENS, SOFTRING
COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, DMIN
COMMON /STATE/ NRO, MR, ENL
COMMON /ELIBRE/ E0
COMMON /EZ_SPLN/ XD(NP), EZD(NP), BD(NP), CD(NP), DD(NP), ED(NP)
COMMON /FRO_SPLN/ BF(NM), CF(NM), DF(NM), EF(NM), FONDA(NM)
COMMON /FASE/ THETA(NM), RM(NM)
COMMON /ADIM/ RBOHR, RY
COMMON /EINIT/ E00
LOGICAL DISK, PYRAMID, RING, LENS, SOFTRING
CHARACTER*10 NAME
DIMENSION AKP(20), SUBFUN(NM), S(NM)
DIMENSION RAD(NRAD), N_RO(NLEVEL), N_M(NLEVEL), DHIGH(ND)
REAL XMIN, XMAX, YMIN, YMAX
REAL XP1(NG), YP1(NIVEL+1,NG)
REAL XP2(NM), YP2(3,NM)
REAL TABR(NRAD,2*NLEVEL+1), TABD(ND,2*NLEVEL+1)
c DATA RAD /0.5,0.55,0.6,0.65,0.7,0.75,0.8,0.85,0.9,1.0,1.1,
c $ 1.2,1.3,1.4,1.5,1.7,1.9,2.0,2.5,2.8,3.0,3.5,4.0,6.0/
DATA RAD /1.1,1.2,1.3,1.4,1.5,1.55,1.6,1.65,1.7,1.8,1.85,1.9,2.0,
$ 2.5,2.8,3.0,3.5,4.0,6.0/
DATA DHIGH /0.01,0.03,0.05,0.1,0.15,0.2,0.25,0.3,0.4,0.5,0.75,1.0,
$ 1.25,1.5/
DATA N_RO /0,0,1,1/
DATA N_M /0,1,0,1/
OPEN(1,FILE='SAQD.res')
c Parametros del modelo. Unidades adimensionales
```

```

DMIN = 0.0
WRITE(*,*) 'Enter in the following parameters: Rint, Rext, D0[nm]'
READ(*,*) RINTNM, REXTNM, D0NM
EPSILON = 12.5
RBOHR = 0.053*EPSILON/AME
RY = 13.6*AME/EPSILON**2
D0 = D0NM/RBOHR
RINT = RINTNM/RBOHR
REXT = REXTNM/RBOHR
V0EV = 0.65*1.247*C
V0 = V0EV/RY
WRITE(*,*) 'RBohr = ', RBOHR, '[nm]', ' Ry = ', RY, '[eV]'
WRITE(1,*) 'RBohr = ', RBOHR, '[nm]', ' Ry = ', RY, '[eV]'
WRITE(1,*) 'Parametros adimensionales'
WRITE(1,*) 'Epsilon = ', EPSILON
WRITE(1,*) 'V0[Ry] = ', V0
WRITE(1,*) 'Rint = ', RINTNM, '[nm]', 'D0 = ', D0NM, '[nm]'
WRITE(1,*) 'Rint = ', RINT, '[a0*]', 'D0 = ', D0, '[a0*]'
WRITE(1,*) 'Rext = ', REXTNM, '[nm]', 'Rext = ', REXT, '[a0*]'
CLOSE(1)
c Definir el tipo de punto cuantico
WRITE(*,*) 'Disk..1, Pyramid..2, Ring..3, Lens..4, Soft Ring..5 ?'
READ(*,*) NSHAPE
DISK = .FALSE.
PYRAMID = .FALSE.
RING = .FALSE.
LENS = .FALSE.
SOFTRING = .FALSE.
IF (NSHAPE .EQ. 1) DISK = .TRUE.
IF (NSHAPE .EQ. 2) PYRAMID = .TRUE.
IF (NSHAPE .EQ. 3) RING = .TRUE.
IF (NSHAPE .EQ. 4) LENS = .TRUE.
IF (NSHAPE .EQ. 5) SOFTRING = .TRUE.
c Graficar la imagen de punto cuantico 3D
XMIN = -1.5*REXT
XMAX = 1.5*REXT
YMIN = -1.5*REXT
YMAX = 1.5*REXT
CALL SURF_PNT(XMIN,XMAX,YMIN,YMAX)
c Calculo de las energias en z para los primeros niveles especificados
c por NIVEL
OPEN(1,FILE='Akd.dat')
DMIN = 0.01*D0
DMAX = 2.0*D0
EPS = 1.0D-12
HD = (DMAX-DMIN)/(NP-1)
DO I=1, NP
    D = DMIN+HD*(I-1)

```

```

        CALL AK(D, EPS, AKP)
        WRITE(1, *) D, (AKP(K), K=1, NIVEL)
    END DO
    CLOSE(1)
c Construir la funcion Ez(R0) y grafica los primeros niveles de
c energia
    ROMIN = 0.0
    ROMAX = 1.5*REXT
    H = (ROMAX-ROMIN)/(NG-1)
    DO K=1, NG
        RO = ROMIN+H*(K-1)
        XP1(K) = RO
        YP1(1,K) = DFUN(RO)/D0
    END DO
    DO I=1, NIVEL
        OPEN(1, FILE='Akd.dat ', STATUS='OLD')
        DO J=1, NP
            READ(1, *) XD(J), (BASURA, K=1, I-1), EZD(J), (BASURA, K=I+1, NIVEL)
        END DO
        KPR = 0
        CALL SPLINE(NP, XD, EZD, BD, CD, DD, ED, KPR, INT)
        DO K=1, NG
            RO = ROMIN+H*(K-1)
            YP1(I+1,K) = EZ(RO)/V0
        END DO
        CLOSE(1)
    END DO
    NAME = 'EzFun.pcx'
    CALL GRAPHIC(XP1, YP1, NIVEL+1, NG, NAME)
c Calculo de las energias del electron libre para los diferentes estados
c (nz,nro,m)
    DO NRHO=0, 2
        DO LR=0, 2
            WRITE(*, *) NRHO, LR, FREENERGY(1, NRHO, LR)
        END DO
    END DO
    READ(*, *)
c Funcion subintegral para calcular A(ro)
    MR = 0
    NRO = 0
    E0 = FREENERGY(1, MR, NRO, REXT, D0)
    WRITE(*, *) 'Energia Electron Libre = ', E0
    READ(*, *)
    OPEN(1, FILE='FONDA.DAT')
    DO K=1, NM
        RO = RM(K)
        SUBFUN(K) = (1.0D0+EZ(RO)-E0)*DSIN(2.0D0*THETA(K))/2.0D0-
$              ((2.0D0*MR+1.0D0)/RO)*(DSIN(THETA(K)))**2

```

```

        WRITE(1,*) RM(K),THETA(K)
    END DO
    CLOSE(1)
c Calculo de la integral con DQSF
    H = RM(2)-RM(1)
    CALL DQSF(H,SUBFUN,S,NM)
c Construcccion de la funcion de onda radial normalizada
    SM = 0.0D0
    DO K=1, NM
        FONDA(K) = DCOS(THETA(K))*DEXP(S(K))
        SM = SM+FONDA(K)**2
    END DO
    SM = SM*H
    FM = 1.0D0/DSQRT(SM)
    DO K=1, NM
        FONDA(K) = FM*FONDA(K)
    END DO
c Coeficientes de spline para la funcion de onda radial
    KPR = 0
    CALL SPLINE(NM,RM,FONDA,BF,CF,DF,EF,KPR,INT)
c Grafica de la funcion de onda radial
    ROMIN = 1.0D-10
    ROMAX = 2.5*REXT
    H = (ROMAX-ROMIN)/(NG-1)
    DO I=1, NG
        RO = ROMIN+H*(I-1)
        XP2(I) = RO
        YP2(1,I) = EZ(RO)/V0
        YP2(2,I) = E0/V0+0.5D0*FRO(RO)
        YP2(3,I) = E0/V0
    END DO
    NAME = 'Fro.pcx'
    CALL GRAPHIC(XP2,YP2,3,NG,NAME)
c Construcccion de la tabla de energias para los diferentes niveles
c (nz,nro,m) en funcion del radio externo
    NZ = 1
    DO IRAD=1, NRAD
        R = RAD(IRAD)
        DO ILEVEL=1, NLEVEL
            NRHO = N_RO(ILEVEL)
            LR = N_M(ILEVEL)
            E1 = FREENERGY(NZ,NRHO,LR,R,D0)
            E00=E1*RY
            E2 = E_RENORM(E1)
            WRITE(*,*) 'Variacion del radio'
            WRITE(*,*) NRHO,LR,R,E1,E2
            TABR(IRAD,2*ILEVEL) = E1
            TABR(IRAD,2*ILEVEL+1) = E2
        END DO
    END DO

```

```

        TABR(IRAD,1) = R
    END DO
END DO
OPEN(1,FILE='Erad.dat')
DO I=1,NRAD
    WRITE(1,10) (TABR(I,J),J=1,2*NLEVEL+1)
END DO
CLOSE(1)
10    FORMAT(1X,F4.2,8F7.3)
c Construcccion de la tabla de energias en funcion del ancho
DO ID=1, ND
    DH = DHIGH(ID)
    DO ILEVEL=1, NLEVEL
        NRHO = N_R0(ILEVEL)
        LR = N_M(ILEVEL)
        E1 = FREENERGY(NZ,NRHO,LR,REXT,DH)
        E00=E1*RY
        E2 = E_RENORM(E1)
        WRITE(*,*) 'Variacion de la altura maxima'
        WRITE(*,*) NRHO,LR,DH,E1,E2
        TABD(ID,2*ILEVEL) = E1
        TABD(ID,2*ILEVEL+1) = E2
        TABD(ID,1) = DH
    END DO
END DO
OPEN(1,FILE='Ed.dat')
DO I=1,ND
    WRITE(1,20) (TABD(I,J),J=1,2*NLEVEL+1)
END DO
CLOSE(1)
20    FORMAT(1X,F5.2,8F7.3)
RETURN
STOP
END

c ----- c
c Funcion que define el ancho del punto cuantico en funcion de la
c distancia desde el eje de simetria.
c ----- c

DOUBLE PRECISION FUNCTION DFUN(R0)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
LOGICAL DISK, PYRAMID, RING, LENS, SOFTRING
COMMON /MODEL/ DISK, PYRAMID, RING, LENS, SOFTRING
COMMON /CONFINEMENT/ V0,RINT,REXT,D0,V0MIN, DMIN
DFUN = DMIN
IF (R0 .LT. REXT) THEN
    IF (DISK) THEN
        D = D0
    ELSE IF (PYRAMID) THEN

```

```

        D = D0
        IF (R0 .GT. RINT) D = (D0-DMIN)*(1.0-(R0-RINT)/
$              (REXT-RINT))+DMIN
        ELSE IF (RING) THEN
            D = D0
            IF (R0 .LT. RINT) D = DMIN
        ELSE IF (LENS) THEN
            D = D0
            IF (R0 .GT. RINT) D = (D0-DMIN)*DSQRT(1.0-((R0-RINT)
$              /(REXT-RINT))**2)+DMIN
        ELSE IF (SOFTING) THEN
            R0 = (RINT+REXT)/2.0
            ANCH = (REXT-RINT)/2.0
            D = DMIN
            IF (R0 .GT. RINT .AND. R0 .LT. REXT) THEN
                D = (D0-DMIN)*DSQRT(1.0-((R0-R0)/ANCH)**2)+DMIN
            END IF
        END IF
        DFUN = D
    END IF
    RETURN
END

```

C ----- C

```

SUBROUTINE AK(D,EPS,AKRAIZ)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
EXTERNAL FPAR, FIMPAR
COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, DMIN
PARAMETER(NIV=20,NP=100)
DIMENSION AKRAIZ(NIV), RZPAR(NIV), RZIMPAR(NIV)
PI = 4.0D0*DATAN(1.0D0)

```

c Evaluar el parametro A para saber el numero de raices a buscar. NPAR
c y NIMPAR contienen el numero de raices para los estados par e impar
c respectivamente

```

    A = DSQRT(V0*D**2/4.0D0)
    NPAR = A/PI+1
    NIMPAR = A/PI+0.5
    DMINIM = 0.05D0
    XL = 0.0001D0
    XR = A-EPS
    PASO = (XR-XL)/(NP-1)
    DO I=1, NIV
        AKRAIZ(I) = DSQRT(V0)
    END DO
    IF (D .GT. DMINIM) THEN
        CALL RAICES(FPAR,D,XL,XR,PASO,EPS,NPAR,RZPAR)
        CALL RAICES(FIMPAR,D,XL,XR,PASO,EPS,NIMPAR,RZIMPAR)
        DO I=1, NPAR
            AKRAIZ(2*I-1) = RZPAR(I)*2.0D0/D

```

```

        IF (AKRAIZ(2*I-1) .LT. 1D-15) AKRAIZ(2*I-1) = DSQRT(V0)
    END DO
    DO I=1, NIMPAR
        AKRAIZ(2*I) = RZIMPAR(I)*2.0D0/D
        IF (AKRAIZ(2*I) .LT. 1D-15) AKRAIZ(2*I) = DSQRT(V0)
    END DO
END IF
RETURN
END

C ----- C
c Funciones trascendentes para los estados par e impar
DOUBLE PRECISION FUNCTION FPAR(X,D)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, DMIN
FPAR = X*DSIN(X)-DSQRT(V0*D**2/4.0D0-X*X)*DCOS(X)
RETURN
END

C ----- C
DOUBLE PRECISION FUNCTION FIMPAR(X,D)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, D0MIN
FIMPAR = X*DCOS(X)+DSQRT(V0*D**2/4.0D0-X*X)*DSIN(X)
RETURN
END

C ----- C
DOUBLE PRECISION FUNCTION EZ(R0)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, DMIN
PARAMETER(NP=20)
COMMON /EZ_SPLN/ XD(NP),EZD(NP),BD(NP),CD(NP),DD(NP),ED(NP)
D = DFUN(R0)
EZ = V0
IF (R0 .LT. REXT) THEN
    KPR = 0
    Z = SEVAL(KPR,NP,D,XD,EZD,BD,CD,DD,ED)
    EZ = Z*Z
END IF
RETURN
END

C ----- C
DOUBLE PRECISION FUNCTION FRO(R0)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PARAMETER(NM=1000, EPS=1.0D0-6)
COMMON /FRO_SPLN/ BF(NM), CF(NM), DF(NM), EF(NM), FONDA(NM)
COMMON /FASE/ THETA(NM), RM(NM)
COMMON /ELIBRE/ E0
COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, DMIN
IF (R0 .LT. EPS) THEN

```

```

        KPR=0
        XX = EPS
        FRO = SEVAL(KPR,NM,XX, RM, FONDA, BF, CF, DF, EF)
    ELSE IF (R0 .LE. REXT) THEN
        KPR = 0
        FRO = SEVAL(KPR,NM,R0, RM, FONDA, BF, CF, DF, EF)
    ELSE
c Fuera del punto usar funcion de Bessel
        KPR = 0
        XX = REXT-EPS
        FRO0 = SEVAL(KPR,NM,XX, RM, FONDA, BF, CF, DF, EF)
        AKP = DSQRT(V0-E0)
        X1 = AKP*R0
        X2 = AKP*REXT
        CALL IK01A(X1,BI0,DI0,BI1,DI1,BK01,DK0,BK1,DK1)
        CALL IK01A(X2,BI0,DI0,BI1,DI1,BK02,DK0,BK1,DK1)
        FRO = FRO0*BK01/BK02
    END IF
    IF (FRO .LT. 0.0D0) FRO = 0.0D0
    RETURN
END

C ----- C
DOUBLE PRECISION FUNCTION FREENERGY(NZ,NRHO,LR,RAD,DHIGH)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
PARAMETER(NP=20)
COMMON /EZ_SPLN/ XD(NP), EZD(NP), BD(NP), CD(NP), DD(NP), ED(NP)
COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, DMIN
COMMON /STATE/ NRO, MR, ENL
DIMENSION AKP(20)
c Calculo de la energia total
    NIVEL = 1
    REXT = RAD
    D0 = DHIGH
    OPEN(1,FILE='Akd.dat')
    DMIN = 0.01*D0
    DMAX = 2.0*D0
    EPS = 1.0D-12
    HD = (DMAX-DMIN)/(NP-1)
    DO I=1, NP
        D = DMIN+HD*(I-1)
        CALL AK(D,EPS,AKP)
        WRITE(1,*) D, (AKP(K),K=1,NIVEL)
    END DO
    CLOSE(1)
    OPEN(1,FILE='Akd.dat',STATUS='OLD')
    DO J=1, NP
        READ(1,*) XD(J), (BASURA,K=1,NZ-1),EZD(J), (BASURA,K=NZ+1,NIVEL)
    END DO

```

```

KPR = 0
CALL SPLINE(NP,XD,EZD,BD,CD,DD,ED,KPR,INT)
CLOSE(1)
MR = LR
NR0 = NRHO
EMIN = 0.0D0
EMAX = V0-1.0D-10
FREEENERGY = ENERGY(EMIN,EMAX,TOL)
RETURN
END

C ----- C
C Subrutinas para el reescalamiento de las energias. AM(E) da la
C relacion entre la masa efectiva como funcion de la energia.
C Se utiliza un algoritmo Newton_Raphson para encontrar las raices
C correspondientes a la ecuación trascendente asociada.
  DOUBLE PRECISION FUNCTION RYD(E)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  AM = 0.0665+0.0436*E+0.236*E**2-0.147*E**3
  RYD = AM/0.0655
  RETURN
  END

C ----- C
  DOUBLE PRECISION FUNCTION D_RYD(E)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  D_AM = 0.0436+2*0.236*E-3*0.147*E**2
  D_RYD = D_AM/0.0665
  RETURN
  END

C ----- C
  DOUBLE PRECISION FUNCTION FUNE(E)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  COMMON /EINIT/ E00
  FUNE = E-E00/RYD(E)
  RETURN
  END

C ----- C
  DOUBLE PRECISION FUNCTION DFUNE(E)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  COMMON /EINIT/ E00
  DFUNE = 1.0+D_RYD(E)*E00/RYD(E)**2
  RETURN
  END

C ----- C
  DOUBLE PRECISION FUNCTION E_RENORM(E0)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  COMMON /ADIM/ RBOHR, RY
  COMMON /CONFINEMENT/ V0, RINT, REXT, D0, V0MIN, DMIN
  E = E0*RY

```

```
DO I=1,10
  E = E-FUNE(E)/DFUNE(E)
END DO
EE = E/RY
IF (EE .GT. V0) EE = V0
E_RENORM = EE
RETURN
END
```