

**ESTADO BASE DE UNA IMPUREZA D^0 DESCENTRADA
EN UN PUNTO CUANTICO ESFERICO DE GaAs – (Ga,Al)As
CON DIFERENTES FORMAS DE POTENCIAL**

JESÚS DAVID GONZÁLEZ ACOSTA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
POSGRADO EN FÍSICA MATERIA CONDENSADA
BUCARAMANGA JUNIO 2004**

**ESTADO BASE DE UNA IMPUREZA D^0 DESCENTRADA
EN UN PUNTO CUANTICO ESFERICO DE GaAs – (Ga,Al)As
CON DIFERENTES FORMAS DE POTENCIAL**

JESÚS DAVID GONZÁLEZ ACOSTA

**Tesis para optar al título de
Magíster en Física**

**Director
Dr. FRANCISCO JAVIER BETANCUR**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
POSGRADO EN FÍSICA MATERIA CONDENSADA
BUCARAMANGA JUNIO 2004**

*A mi madre Aura Estella Acosta Rivera
y a mi hermano del alma Estiffer González
Acosta.*

...A Tania Isabel, mi esposa.

... A Dios el dador de todas las cosas.

*A la memoria de mi abuela Baldomera Rivera Mieles.
"Te llevaré en mi corazón todos los días de mi vida"*

AGRADECIMIENTOS

Mis agradecimientos:

Al Doctor Javier Betancur; por su empeño en transmitir todo su conocimiento y experiencia, para contribuir en mi formación profesional.

A mi maestro, Doctor Ilia Mikhailov, por su guía, enseñanzas, sabios consejos y por darme la oportunidad y las herramientas para mirar más allá en el fascinante mundo de la física. Gracias.

A mi madre, por haberme dado la formación moral para ser un hombre de bien y sus sacrificios para levantar sus dos hijos, sin contar con ayuda.

A mi único hermano, por velar por el bienestar de mi madre durante la realización de mis estudios de postgrado.

A mi compañero y amigo Eduardo Orozco, por sus aportes a este trabajo.

A mi compañero José Luis Aguilar, por su amistad sincera y apoyo durante todos estos años durante mis estudios de pregrado y la maestría.

A los Profesores José Sierra Ortega, Ruthber Escorcia y sus familias las cuales siempre han sido un apoyo fundamental en esta ciudad.

Al profesor Jesús Beltrán por apoyo y enseñarme que siempre se puede llegar mas lejos.

A todos mis compañeros y amigos, por su amistad en los momentos difíciles.

A mi esposa Tania Isabel, por su comprensión para lograr mis metas profesionales.

A mis Tías, Ena y Maria Acosta, por su apoyo incondicionales para obtener mis objetivos.

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
RESUMEN	
ABSTRACT	
INTRODUCCIÓN	12
1. ASPECTOS FUNDAMENTALES	16
1.1 Compuestos III-V	16
1.2 Aproximación masa efectiva	18
1.3 Defectos de heteroestructura	20
2. METODOS UTILIZADOS	23
2.1 Principio variacional de Schrödinger	23
2.2 Método de dimensión Fractal	24
2.3 Método de barrido trigonométrico	27
3. ASPECTOS ESPECIFICOS DEL TRABAJO	32
3.1 Impurezas Donadoras en un SQD	32
3.2 Modelo de confinamiento	33
3.3 Densidad de estados de impurezas en SQD	36
4. ANALISIS DE RESULTADOS	37
5. CONCLUSIÓN	50
CITAS BIBLIOGRAFICAS	51
BIBLIOGRAFIA	53
ANEXOS	55

INDICE DE FIGURAS

	Pág.
Fig1. Simple ilustración del efecto de difusión: El material difundido se mueve de áreas de alta concentración a otro de baja.	21
Fig.2. Sistema de referencia usado para una impureza en un SQD.	33
Fig 3.Representación esquemática del potencial de confinamiento en un QD de GaAs/Ga _{0.7} Al _{0.3} As con diferentes anchos W de la región de transición (a) sin núcleo repulsivo y (b) con núcleo repulsivo.	35
Fig. 4. Energía de enlace del estado base de en función D^0 (en un SQD sin núcleo repulsivo $R_i=0$) en función de la posición ζ a lo largo del radio del SQD para diferentes formas de potencial de confinamiento.	38
Fig. 5 Energía de enlace del estado base D^0 en función de la posición ζ a lo largo del radio del SQD con un potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.001a_0^*$ sin núcleo repulsivo y diferentes radios R de SQD.	40
Fig. 6 Energía de enlace del estado base D^0 en función del radio R del SQD con un perfil del potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.001a_0^*$.	41
Fig. 7 Energía de enlace del estado base D^0 en un SQD en función del radio R_e del SQD con diferentes formas de potencial de confinamiento.	42
Fig. 8 Energía de enlace del estado base D^0 en función de la posición ζ a lo largo del radio del SQD con un potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.001a_0^*$ y diferentes radio de núcleo repulsivo.	44

Fig. 9 Energía de enlace del estado base D^0 en función de la posición ζ a lo largo del radio del SQD con un potencial de confinamiento $W = 1.0a_0^*$ y diferentes radio de núcleo repulsivo.	45
Fig. 10 Densidad de estados de impureza en un SQD sin núcleo repulsivo y diferentes formas de potencial de confinamiento.	46
Fig. 11 Densidad de estados de impureza en un SQD con perfil de potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.001a_0^*$ y distintos radios de núcleo repulsivo de SQD.	48

INDICES DE ANEXOS

	Pag.
- ANEXO A. (Programa en FORTRAN para calcular la energía de enlace).	55
- ANEXO B. (Programa en FORTRAN para calcular densidad de estados en un SQD sin núcleo repulsivo).	70
- ANEXO C. (Programa en FORTRAN para calcular densidad de estados en un SQD con inclusión núcleo repulsivo).	73

ACRONIMOS

D^0 : Impureza donadora neutra.

D^- : Impureza ionizada negativamente

SQD: Punto cuántico.

QW: Pozo cuántico.

QWW: Hilo cuántico.

AME: Aproximación de masa efectiva.

D.O.S: Densidad de estados de impurezas.

E_b : Energía de enlace.

MDF: Método de Dimensión Fractal

ESTADO BASE DE UNA IMPUREZA D^0 DESCENTRADA EN UN PUNTO CUANTICO ESFERICO DE $GaAs - (Ga,Al)As$ CON DIFERENTES FORMAS DE POTENCIAL*.

Autor: Jesús David González Acosta**

En este trabajo se analiza la energía de enlace y la densidad de estados para el estado base en puntos cuánticos (SQDs) para una distribución homogénea de impurezas donadoras neutras D^0 , utilizando el recientemente desarrollado método de Dimensión Fractal, en el cual el problema de un D^0 se reduce al de un átomo de hidrógeno, en un espacio efectivo con dimensión fraccionaria que depende de la separación entre el ion y el electrón. Se muestran curvas novedosas de densidad de estados y energía de enlace calculadas en función del radio del punto, para una D^0 centrada y descentrada con diferentes formas de potencial de confinamiento: Rectangular, parabólico y de barrera suave con y sin núcleo repulsivo. En esta investigación encontramos que las curvas de densidad de estados de impureza con núcleo repulsivo poseen picos adicionales, donde estos dependen del ancho y el alto de la barrera en el centro del punto. Para un potencial infinito también se encontró que la energía de enlace se incrementa a medida que el radio del punto decrece, mientras que para un potencial de confinamiento finito, la energía de enlace alcanza un máximo cuando el radio del punto disminuye hasta un límite tal, que posteriormente dicha energía disminuye hasta un valor determinado del radio del SQD para el cual no tenemos estados ligados en el pozo de potencial. Estos resultados están en buena concordancia con resultados obtenidos previamente para el espectro de una D^0 con un potencial rectangular.

* Trabajo de grado

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Dr. F. Javier Betancur

OFF-CENTER DONORS IN $GaAs - (Ga,Al)As$ SPHERICAL QUANTUM DOTS
WITH DIFFERENT POTENTIAL SHAPES*.

Author: Jesús David González Acosta**

Binding energy and the density of states for the ground-state in spherical quantum dots (SQDs) are analyzed, for a randomly distribution neutral D^0 donors impurities, using the recently developed Fractal Dimension Method. In this method, problems of the D^0 are reduced to an hydrogen-like atom, in an isotropic effective space with fractional dimension, which depends on the electron-ion donor separation. Novel curves for the density of impurity states and the binding energy as function of the SQD radius with different potential form of confinement: square-well, parabolic and soft-edge barrier potentials, with and without the repulsive core are presented. In this research is found that the curves of the density of states, with repulsive core provide additional peaks, which depend on the width and the height barrier at the center of the SQD. As the dot radius decreases for infinite potential, binding energy is increased, whereas that for a finite potential, as the radius decreases up to a critic value (radius, R_c), binding energy reaches a peak, and then diminishes to a limiting value corresponding to the radius for which there are no bound state in the dot. These results are in a very good agreement with those previously obtained for donor spectra in SQD with different potential shapes.

* Grade Work

** Science Faculty, Physics department, Dr. F. Javier Betancur

INTRODUCCION

Los puntos cuánticos (QDs) semiconductores pueden ser caracterizados como sistemas donde los portadores de carga (electrones o huecos) son confinados en todas direcciones espaciales. Una consecuencia de este confinamiento es que el espectro electrónico pasa a una serie de niveles discretos, los cuales son ocupados por un número finito de partículas, a diferencia con hilos (QWWs) y pozos cuánticos (QWs) donde debido al confinamiento incompleto la ocupación de los niveles es similar a una muestra macroscópica [1].

En las últimas tres décadas el estudio de estados de impurezas donadoras neutras (D^0) en heteroestructuras de baja dimensionalidad se ha realizado en muchos trabajos teóricos y experimentales. El pionero en el estudio de estas impurezas fue Bastard, quien calculó la energía de enlace del estado base de un D^0 en un QW con potencial rectangular infinito [2] y finito [3], usando el método variacional. Con base en este modelo se realizaron estudios de estados de impurezas en QW y se analizaron los efectos de campos externos sobre estos estados [4-6].

El análisis de impurezas D^0 en puntos cuánticos esféricos (SQDs) se ha desarrollado utilizando diferentes métodos: Diferencias finitas [7], principio variacional de Schrödinger [8] y expansión en serie [9-11]. Con este último se ha obtenido la energía del estado base [9] y primeros estados excitados para una D^0 centrada [10] y descentrada [11] en un SQD de $GaAs - (Ga,Al)As$. En una serie de investigaciones también se consideraron SQDs con diferentes geometrías, cúbico [12,13] y esférico [7-

11], con diferentes formas de potencial confinamiento: rectangular [7-14], exponencial [7] y Wood-Saxon [15]. Adicionalmente se realizaron cálculos de las densidades de estados de impurezas D^0 en SQDs con formas cúbica [12] y esférica con barreras finita e infinita [12,14].

Recientemente para calcular la energía de enlace se desarrolló el método de Dimensión Fraccionaria [16-19], en el cual el espacio real anisotrópico se reemplaza por otro espacio efectivo, isotrópico y homogéneo con una dimensión reducida. En este método, la dimensión fraccionaria se considera como un parámetro de la teoría que depende de la altura de la barrera y del ancho del pozo, pero es la misma para toda la heteroestructura. Este método permite en muchos casos encontrar la solución del problema en forma mucho más compacta que otros métodos. Sin embargo, este método, como lo anotaron algunos autores [18], pierde su validez en condiciones donde el confinamiento y campo magnético fuerte. Además este método se hace menos exacto cuando el confinamiento es multilateral, como por ejemplo en QWW y QD donde el confinamiento es más fuerte que en QW y superredes.

En una situación real la función de onda de la D^0 en la heterojuntura semiconductor se sufre cambios significativos de acuerdo a la geometría de la heterojuntura, tamaño, forma del potencial de confinamiento y la posición de la impureza dentro o fuera de ésta. Cuando se considera el modelo de confinamiento con altura de barrera infinita, se encuentra que la energía de enlace de una D^0 en un QW, aumenta cuatro veces con respecto a su valor en el bloque, cuando el ancho del pozo de potencial tiende a cero

[20]. La gran diferencia de energía de enlace del átomo de hidrogeno tridimensional ($1Ry^*$) y el bidimensional ($4Ry^*$), es interpretado como una disminución en la dimensionalidad del espacio desde tres hasta dos, cuando el ancho del pozo tiende a cero. Además se ha encontrado que también existe un cambio en la dimensionalidad del espacio cuando varía la posición de la impureza en la heterojuntura [21], por esta razón en una teoría rigurosa debe incluirse la dimensionalidad del espacio, no “en promedio” como lo hace el método de dimensión fraccionaria [18], sino como un parámetro que depende del ancho, altura del pozo, y de la posición de la impureza en la heterojuntura.

El método de Dimensión Fractal (MDF) propuesta por nuestro grupo [21] bajo la cual se desarrolló este trabajo, ha extendido el método de dimensión fraccionaria eliminándole las limitaciones. En el se demuestra que la dimensión del espacio depende de la separación entre las partículas y sus posiciones dentro de la heteroestructura. En esta teoría, dentro del marco de la aproximación de masa efectiva, tanto las características del espacio efectivo, como las ecuaciones diferenciales, para los sistemas de pocas partículas en un espacio con dimensión reducida, se deducen a partir del principio variacional de Schrödinger. A diferencia con otras teorías este método sin ninguna modificación se puede aplicar para heteroestructuras con una configuración arbitraria e incluir efectos relacionados con diferentes formas de potencial de confinamiento, variación de los parámetros del material, no-parabolicidad de la banda de conducción, etc.

De otra parte, se conoce que el perfil de potencial de confinamiento en las heterojunturas semiconductoras es proporcionado por los saltos de las energías correspondientes a los pisos de las bandas de conducción en las juntas y ésta depende de varios factores como, los cambios bruscos de la constante dieléctrica [22], defectos de tensión [23], o voltaje externo [24]. Por lo general las investigaciones sobre sistemas de baja dimensionalidad han considerado potenciales de confinamiento rectangular o parabólico. Estas dos formas de confinamiento no son suficientemente flexibles para describir adecuadamente los potenciales de confinamiento realistas [7]. En este trabajo, usando el MDF descrito arriba, se considera una nueva forma de potencial de confinamiento, el cual es una versión no abrupta de la función paso, con la que se puede obtener cualquier perfil de potencial de confinamiento lo suficientemente flexible para aproximarse a un potencial realista de los SQD. Apartir de estas consideraciones se analizó el efecto de este perfil de confinamiento y el núcleo repulsivo sobre la energía de enlace del estado base y la densidad de estados de impurezas D^0 por rango unitario de energía.

1. ASPECTOS FUNDAMENTALES

1.1 Compuestos III-V

Entre los materiales semiconductores que tienen importancia cada vez mayor por sus aplicaciones tecnológicas se encuentran los semiconductores llamados compuestos III-V, debido a sus numerosas aplicaciones en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. Ejemplos de compuestos III-V tenemos entre otros: *GaAs*, *InP*, *GaSb*, *InAs*, *GaP*. A partir de las propiedades ya conocidas de estos semiconductores se han desarrollado aleaciones semiconductoras ternarias y cuaternarias, en las que intervienen tres o cuatro elementos de los grupos III y V (*GaAlAs*, *InGaAsP*, ...). Lógicamente la aparición de estas aleaciones semiconductoras incrementa enormemente las propiedades de estos materiales ya que, seleccionando la composición adecuada se puede controlar con gran precisión características tales como el intervalo prohibido de energía o el parámetro de red.

El enlace que presentan los átomos en los compuestos III-V es de tipo covalente, rígido y direccional, correspondiente al orbital híbrido sp^3 . La diferencia de electronegatividades entre los átomos del grupo III (*Ga, In*) y del grupo V (*Al, P*) es muy pequeña, por lo que el grado de ionicidad es muy baja. El átomo del grupo III actúa como catión mientras que el átomo del grupo V lo hace como anión. La estructura cristalina de estos materiales es de tipo esfalerita, llamada también de sulfuro de zinc. Estos compuestos semiconductores poseen características especiales que hacen su

estudio relativamente fácil, ya que por ejemplo para el GaAs, ambos elementos poseen igual constante de red ($a = 0.5653\text{nm}$ a $T = 298^0\text{K}$), el piso de la banda de conducción y el techo de la banda de valencia se encuentran en $\vec{k} = 0$ o sea que la absorción óptica corresponde a transiciones con brecha directa, entre otras características.

Cuando se forman heteroestructuras semiconductoras de $GaAs(Ga,Al)As$, por ejemplo en SQDs, éstas constan de un centro de $GaAs$ recubierto con $(Ga,Al)As$; la concentración de Aluminio puede ser modificada para obtener distintas alturas de la barrera de confinamiento; y dependiendo de la magnitud de la difusión del $(Ga,Al)As$, hacia el centro del SQD, podemos obtener distintos potenciales de confinamiento.

Una muestra dopada (semiconductora tipo n) se forma cuando un átomo del grupo IV reemplaza al átomo de Ga en la red cristalina. Uno de los electrones de la impureza donadora no participa en el enlace químico y “queda casi libre” en la banda de conducción para formar estados acoplados. Este electrón puede ser fácilmente ionizado por excitaciones térmicas o excitaciones eléctricas, por lo cual son llamadas impurezas poco profundas. En general se llaman donadores poco profundos, cuando la energía de ionización de un electrón ligado a ellos es mucho menor que la brecha de energía del semiconductor. Por tal razón en las impurezas poco profundas el enlace está dominado por el potencial de largo alcance extendiéndose espacialmente sobre miles de celdas unitarias. Los niveles profundos caen dentro de la brecha de la banda y son fuertemente localizados.

1.2 Aproximación masa efectiva.

Cuando un átomo dopante es introducido en un cristal, la periodicidad del cristal es modificada y el potencial de la impureza modifica el potencial del cristal en ese punto de la red. Mientras esto suceda en todo el material semiconductor, calcular el potencial Coulombiano entre electrón y el ion donador es bastante complicado, debido a que el electrón de la impureza se encuentra apantallado por un gas de electrones del cristal, por lo que el movimiento de este en el semiconductor se ve afectado.

La ecuación de Schrödinger de la donadora esta dado por

$$(H_0 + U) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1.1)$$

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

$$U = -|e|V_s \quad (1.2)$$

con $V_s = +\frac{|e|}{\epsilon r}$ que es una aproximación del potencial de Coulomb de el donador,

donde ϵ es la constante dieléctrica estática del cristal y $\psi(\vec{r})$ es la función de onda del electrón donador.

Para resolver (1.1) podemos expandir $\psi(\vec{r})$ en términos de las funciones de Bloch $\psi_{nk}(\vec{r})$ del cristal perfecto, de manera que formen un conjunto ortonormal, pero esta aproximación requiere extensivos cálculos numéricos. En este caso es mejor la

aproximación de masa efectiva para resolver el problema de la donadora (1.1), usando parámetros conocidos de la estructura de banda del cristal.

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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon r} \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (1.3)$$

donde $V(\vec{r})$ es el potencial de confinamiento.

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

$$a^* = 0.53 \epsilon \frac{m_0}{m} \text{ \AA} \quad (1.4)$$

Por ejemplo, en el GaAs el valor de la constante dieléctrica es $\epsilon = 12.85$ y la masa efectiva del electrón en la banda de conducción es $m = 0.067m_0$, por lo que resulta

$a^* \approx 100 \text{ \AA}$. La energía de ligadura del electrón en ese estado fundamental es el Rydberg efectivo,

$$Ry^* = \frac{13600}{\epsilon^2} \frac{m}{m_0} \text{ meV} \quad (1.5)$$

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

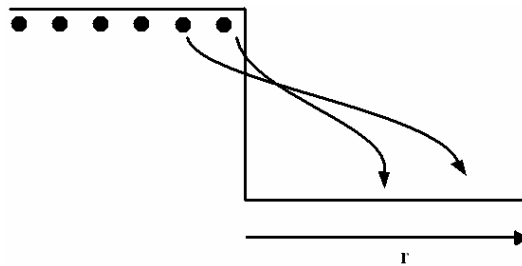
Una de las ventajas del compuesto *GaAs* es que su estructura de bandas es aproximadamente parabólica, entonces su masa efectiva m^* , es aproximadamente isotrópica e independiente de la energía.

1.3 Defectos de heteroestructura

Al igual que sucede en los semiconductores en bloque, los defectos que pueden aparecer en las heteroestructuras modifican sustancialmente sus propiedades físicas y, en particular, las propiedades electrónicas. Por ello se hace necesario un estudio detallado de los efectos que pueden producir los defectos en las heteroestructuras. Aquí sólo nos vamos a ocupar principalmente de las impurezas, pero no debe olvidarse de otros defectos que inevitablemente aparecen, como por ejemplo las dislocaciones o regiones de transición (regiones al interior del SQD en la cual existe una difusión de aluminio de la barrera) también tienen su importancia en el estudio de los niveles energéticos de portadores en las heteroestructuras.

La difusión de material en la interfase de dos semiconductores tiene una gran probabilidad de que ocurra, particularmente a elevadas temperaturas, utilizadas durante el crecimiento de la heteroestructura, o a temperaturas un poco mas bajas que la de crecimiento pero mas prolongada que puede ocurrir durante la normal operación del dispositivo semiconductor.

Fig1. Simple ilustración del efecto de difusión: el material difundido se mueve de áreas de alta concentración a otro de baja



El cambio de perfil en la heterounión inevitablemente altera las propiedades electrónicas del sistema, que a su vez afecta las características del dispositivo y por lo tanto el tiempo de vida de operación.

Suponer que el cambio en la heterounión es abrupto, es olvidar el carácter atómico de los materiales. Un modelo sencillo para estudiar una heterounión no abrupta es suponer que las propiedades físicas en dicha región del material evolucionan gradualmente desde los valores en uno de los semiconductores hasta los valores en el otro semiconductor. Consideremos el caso de una heterounión entre dos semiconductores

binarios, con composiciones AC y BD. En el material masivo AC tenemos enlaces exclusivamente entre átomos A y C, y análogamente ocurre en el semiconductor BD. Sin embargo, justo en la heterounión tenemos una capa de, digamos, átomos C que por un lado se unen a los átomos A pero por el otro, por ejemplo, a átomos B. Igual ocurre con los átomos B, que por una parte forman enlaces con los átomos D pero en el otro lado están unidos a los átomos C. En este caso se dice que la heterounión es gradual y no se puede decir que se produzca en un único plano. Lógicamente esta consideración de heterounión gradual modifica el cálculo de los niveles electrónicos respecto al caso ideal y por ello muchos autores de artículos sobre este tema no la incluyen, caso contrario, en este trabajo de investigación, donde se harán cálculos, para distintas formas de la barrera de potencial, incluyendo además puntos cuánticos con un centro de GaAs y una concentración adicional de aluminio, el cual se puede obtener por difusión de aluminio durante el proceso de formación del SQD.

Además podemos ver claramente que en las heteroestructuras no es aplicable este modelo hidrogenoide porque las heterouniones crean discontinuidades que rompen la simetría de traslación. Por ello, la energía de ligadura del electrón en la impureza depende explícitamente de la posición de la misma. Imaginemos, por ejemplo, el caso de una impureza situada en un SQD. Resulta claro que esta energía de ligadura dependerá de si la impureza está cerca de las heterouniones o situada en mitad del pozo de potencial. La medida de la proximidad de las impurezas respecto a las heterouniones viene dada en este caso por la relación entre radio R del SQD, y la posición de la impureza en éste.

2. METODOS UTILIZADOS

2.1 Principio variacional de Schrödinger

En general, el Hamiltoniano de la ec. (1.3) no es separable, debido a la presencia del término de interacción electrostática entre el electrón y el ion, por lo cual se hace necesario utilizar métodos aproximados, tales como teoría de perturbaciones, método variacional, principio variacional de Schrödinger, etc. Este último se utiliza en este trabajo y se describe brevemente a continuación:

Minimicemos el funcional:

$$F[\psi(\vec{r})] = \int \psi^*(\vec{r}) \left(\hat{H} - E \right) \psi(\vec{r}) dr \quad (2.1)$$

donde \hat{H} y E representan el Hamiltoniano y la energía del sistema, respectivamente y $\psi(\vec{r})$ es una función de prueba.

Nótese que si $F[\psi] \rightarrow \text{mín}$, entonces:

$$\delta F[\psi] = \int \delta \psi^*(\vec{r}) \left(\hat{H} - E \right) \psi(\vec{r}) dr + \int \psi^*(\vec{r}) \left(\hat{H} - E \right) \delta \psi(\vec{r}) dr = 0 \quad (2.2)$$

puesto que $(\hat{H} - E)$ es autoadjunto, se tiene que:

$$\int \delta \psi^*(\vec{r}) \left(\hat{H} - E \right) \psi(\vec{r}) dr = \int \psi^*(\vec{r}) \left(\hat{H} - E \right) \delta \psi(\vec{r}) dr \quad (2.3)$$

entonces (2.2) puede ser escrita como: $2 \int \psi^*(\vec{r}) \left(\hat{H} - E \right) \delta\psi(\vec{r}) dr = 0$; y considerando

que esta relación es válida $\forall \delta\psi^*$, debe cumplirse que: $(\hat{H} - E)|\psi\rangle = 0$; o bien:

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad (2.4)$$

por lo tanto, el problema variacional $F[\psi(\vec{r})] = \int \psi^*(\vec{r}) \left(\hat{H} - E \right) \psi(\vec{r}) dr \rightarrow \min$, es

equivalente a la ecuación de Schrödinger $\hat{H} \psi = E \psi$. Este es el principio variacional de Schrödinger y su ventaja, respecto al método variacional de Ritz, radica en que en el primero se puede utilizar una función de prueba sin parámetros variacionales. Es decir, la función de prueba puede estar expresada en términos de otra función; lo cual permite elegir una función más precisa y flexible para describir mejor al sistema físico en cuestión.

2.1 Método de dimensión Fractal

El método más usado para analizar los espectros de impurezas en sistemas de baja dimensionalidad es el método variacional de Ritz. La eficiencia de éste depende del grado de flexibilidad de la función de prueba, relacionado con el número de parámetros variacionales utilizados, para poder describir entre otros, los cambios de simetría del sistema y el comportamiento de la impureza dentro del SQD. Desafortunadamente esto en general conduce a cálculos demasiado extensos. Sin embargo, el método de dimensión Fractal (MDF) [21], a pesar de utilizar una función de prueba, no involucra ningún parámetro variacional, ni cálculos demasiado complejos y puede utilizarse en

heterojunturas con diferente geometría, potenciales no convencionales, presencia de campos externos, variación de los parámetros del material, entre otros; sin modificaciones sustanciales.

El MDF permite reducir el problema de la D^0 en un medio ambiente anisotrópico tridimensional, a uno equivalente en un espacio isotrópico, homogéneo con dimensión variable.

Ahora bien, dentro del marco de aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano adimensional para el cálculo del estado base de una impureza D^0 en un SQD, puede ser escrito de la siguiente forma

$$\hat{H}(\vec{r}, Z) = -\nabla^2 + V(\vec{r}) + \frac{2Z}{|\vec{r} - \xi|} \quad (2.5)$$

La energía y las distancias se miden en R^* y a_0^* , respectivamente, donde Z es igual uno para la donadora y cero para el electrón libre. La solución puede encontrarse a través del problema de valores propios,

$$\hat{H}(\vec{r}, Z = 0)f_0(\vec{r}) = E_0 f_0(\vec{r}), \quad (2.6)$$

$$\hat{H}(\vec{r}, Z = 1)\Psi_{D^0}(\vec{r}) = E(D^0)\Psi_{D^0}(\vec{r}), \quad (2.6a)$$

donde la ecuación (2.6) puede ser resuelta por métodos analíticos o computacionales, para la obtención de $f_0(\vec{r})$ y la respectiva energía E_0 del electrón desacoplado.

La ecuación (2.6a) no es completamente separable y debemos usar algún método aproximado para resolver el correspondiente problema de valores propios, para ello proponemos la siguiente función para el estado base del D^0 .

$$\Psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(\vec{r})\Phi_{D^0}(|\vec{r} - \zeta|) \quad (2.7)$$

donde Φ_{D^0} es una función envolvente, que describe la modificación de la distribución electrónica producida por el potencial de confinamiento a medida que la donadora se desplaza en el SQD y depende solo de la distancia de separación entre el ión y el electrón, $|\vec{r} - \zeta|$. Colocando el origen de coordenadas en la posición del ion y usando el principio variacional en la forma,

$$F[\Phi] = \langle f_0 \Phi_{D^0} | \hat{H}(\vec{r}, Z=1) - E | f_0 \Phi_{D^0} \rangle \rightarrow \min \quad (2.8)$$

y después de integrar bajo todos los ángulos y algunas manipulaciones este funcional para la función de prueba (2.7) puede ser escrito

$$F[\Phi_{D^0}] = \int_0^\infty J(r) \left\{ \left[\frac{d\Phi_{D^0}}{dr} \right]^2 - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}^2 + (E_0 - E) \Phi_{D^0}^2 \right\} dr \rightarrow \min \quad (2.9)$$

$$\frac{\delta F[\Phi_{D^0}]}{\delta \Phi_{D^0}} = 0 \quad (2.9a)$$

Donde $\frac{\delta}{\delta \Phi_{D^0}}$ denota la derivada funcional y el Jacobiano, $J(r)$ esta dado por

$$J(r) = 4\pi r^2 P(r) \quad (2.10)$$

$$P(r) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta f_0(r \sin\theta \cos\varphi + \zeta_x, r \sin\theta \sin\varphi + \zeta_y, r \cos\theta + \zeta_z) \quad (2.11)$$

Vemos que la ecuación (2.10) está relacionada con la densidad de carga, $P(r)$ para el estado base del electrón libre promediado bajo una esfera de radio r centrado en la posición del ión.

Calculando la derivada funcional de la ecuación (2.9) podemos obtener una ecuación de Euler-Lagrange unidimensional para la función Φ_{D^0}

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d}{dr} \Phi_{D^0}(r) \right] - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = [E(D^0) - E_0] \Phi_{D^0}(r) \quad (2.12)$$

Esta ecuación se puede interpretar como la ecuación de un átomo de hidrógeno en un espacio efectivo y homogéneo, con una parte radial del elemento de volumen $J(r)$ el cual hemos llamado jacobiano. Esta ecuación puede ser resuelta por cualquier método numérico conocido, pero es claro que, la solución únicamente nos permite obtener valores aproximados de la energía del estado base del D^0 , debido a que la función de onda no es exacta, pero la solución a la ecuación (2.12) es la mejor aproximación, entre todas las funciones de onda posibles.

2.3 Método de Barrido Trigonométrico

Diferentes métodos han sido utilizados para resolver el problema de un D^0 en un SQD: Variacional, series de potencia, expansión en shifted $1/N$, diagonalización exacta, o numérica. En este caso se propone usar el método de barrido trigonométrico [15,25] para obtener soluciones numéricas para nuestro caso.

El método de barrido trigonométrico [15, 25] es un método numérico de alta precisión que permite resolver ecuaciones diferenciales de la forma:

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d}{dr} \Phi_{D^0}(r) \right] - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = [E(D^0) - E_0] \Phi_{D^0}(r) \quad r_{min} < r < r_{max}$$

En este método se utilizan coordenadas polares de Poincaré para reducir la ecuación de segundo orden a otra de primer Orden; obteniendo una ecuación trascendente para los niveles energéticos, aún para el caso de potenciales no convencionales.

Así, la solución de la ecuación de onda para el estado base del electrón libre (2.6), la podemos escribir como

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df_0}{dr} \right) + V(r) f_0 = E_0 f_0; \quad 0 < r < R_0; \quad \frac{df_0(0)}{dr} = 0; \quad (2.13)$$

$$-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{df_0}{dr} \right) + V(r) f_0 = E_0 f_0; \quad R_0 < r < \infty; \quad f_0(\infty) = 0; \quad (2.14)$$

Vemos que estas ecuaciones corresponden al caso del átomo de hidrogeno, para el electrón desacoplado, debido a su simetría, ya que solo tenemos dependencia de r en (2.13) y (2.14). La solución de la ecuación (2.14) fuera del SQD se puede obtener de forma analítica

$$f_0(r) = C e^{-kr} / r; \quad k = \sqrt{V_0 - E_0}; \quad R_0 < r < \infty, \quad (2.15)$$

donde C es una constante de normalización. En contraste, la ecuación (2.13) puede ser resuelta solo numéricamente, por ello utilizaremos el método de barrido trigonométrico para resolverla. Inicialmente hacemos la siguiente sustitución:

$$f_0(r) = A(r) \cos \vartheta(r); \quad \frac{df_0(r)}{dr} = A(r) \text{sen} \vartheta(r) \quad (2.16)$$

$A(r)$ y $\mathcal{G}(r)$ representan la amplitud y la fase de las curvas de Poincaré en coordenadas polares. Substituyendo (2.16) en (2.13) y después de algunas manipulaciones podemos obtener el siguiente problema para la fase:

$$\mathcal{G}'(r) = -\left[\text{sen}^2 \mathcal{G}(r) + \alpha(r) \cos^2 \mathcal{G}(r) + 2 \text{sen} \mathcal{G}(r) \cos \mathcal{G}(r) / r\right]; \quad \alpha(r) = (V(r) - E); \quad \mathcal{G}(0) = 0 \quad (2.17)$$

Esta ecuación diferencial posee una singularidad en $r=0$, y puede producir una inestabilidad en el método de Rounge-Kutta aplicado para la solución de esta ecuación. Para eliminar esta singularidad en la vecindad usaremos utilizar expansión en serie de Taylor, de la cual tomaremos los términos para r pequeño,

$$f_0(r) = -\frac{1}{3} \alpha(0)r + O(r^2) \quad \text{para } r \rightarrow 0$$

Usando esta aproximación podemos transferir la condición inicial del problema de Cauchy del punto $r=0$ a el punto $r=\varepsilon$, considerando $\varepsilon \ll 1$ y rescribimos el problema de Cauchy (2.18) de la siguiente forma

$$\mathcal{G}(r) = -\frac{1}{3} \alpha(r)r; \quad 0 < r < \varepsilon; \quad \mathcal{G}(\varepsilon) = -\frac{1}{3} \alpha(0)\varepsilon$$

$$\mathcal{G}'(r) = -\left[\text{sen}^2 \mathcal{G}(r) + \alpha(r) \cos^2 \mathcal{G}(r) + 2 \text{sen} \mathcal{G}(r) \cos \mathcal{G}(r) / r\right]; \quad \varepsilon < r < R_0 \quad (2.18)$$

La amplitud $A(r)$ puede ser obtenida por la relación

$$A(r) = A_0 \exp\left\{\int_0^r \left[\text{sen} \mathcal{G}(x) \cos \mathcal{G}(x) [1 - \alpha(r)] - 2 \text{sen}^2 \mathcal{G}(r) / x\right] dx\right\} \quad (2.19)$$

Para derivar la ecuación trascendente para la energía del estado base debemos calcular la razón f' / f en los puntos $r = R_0 - 0$ y $r = R_0 + 0$. Dentro del SQD en concordancia con la relación (2.16) tenemos:

$$\tan \mathcal{G}(R_0) = f'(R_0) / f(R_0) \quad (2.20)$$

De otra parte en concordancia con la relación (2.15):

$$f'(R_0)/f(R_0) = -\sqrt{V_0 - E_0} - 1/R_0 \quad (2.21)$$

Comparando las ecuaciones (2.20) y (2.21) obtenemos la ecuación trascendente para los niveles de energía:

$$\mathcal{G}(R_0, E_0) = -\pi n - \arctan\left(\sqrt{V_0 - E_0} + 1/R_0\right), \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.22)$$

Donde el número cuántico n define la cantidad de números cuánticos en dirección radial.

La solución de la ecuación de onda (2.6a) para el estado base de una impureza D^0 en un SQD, se puede obtener mediante la aplicación del método de barrido trigonométrico, para ello primero representamos la ecuación (2.6a) de la siguiente manera

$$\Phi''_{D^0}(r) + \left[\frac{2}{r} + \frac{P'(r)}{P(r)}\right] \Phi'_{D^0}(r) + \left[\frac{2}{r} + E(D^0) - E_0\right] \Phi_{D^0}(r) = 0, \quad (2.23)$$

Donde

$$P(r) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta f_0(r \sin\theta \cos\varphi + \zeta_x, r \sin\theta \sin\varphi + \zeta_y, r \cos\theta + \zeta_z) \quad (2.24)$$

Para resolver la ecuación de onda (2.23) con la condición inicial (2.24) usamos la siguiente sustitución:

$$\Phi_{D^0}(r) = A(r) \cos \mathcal{G}(r); \quad \Phi'_{D^0} = A(r) \sin \mathcal{G}(r) \quad (2.25)$$

Sustituyendo (2.25) en (2.23) se puede obtener después de algunas manipulaciones algebraicas el siguiente problema de Cauchy para la fase $\mathcal{G}(r)$:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}'(r) &= -\left[\text{sen}^2 \mathcal{G}(r) + \alpha(r) \cos^2 \mathcal{G}(r) + w(r) \text{sen} \mathcal{G}(r) \cos \mathcal{G}(r)\right]; \quad \mathcal{G}(0) = -\pi/4 \\ w(r) &= \frac{2}{r} + \frac{P'(r)}{P(r)} = \frac{2}{r} + \frac{d}{dr} \ln P(r); \quad \alpha(r) = \frac{2}{r} + E(D^0) - E_0; \end{aligned} \quad (2.26)$$

El problema de Cauchy (2.27) puede ser resuelto por el método de Runge-Kutta y el valor de la función $\mathcal{G}(r)$, en el punto $r = R_{\max}$, suficientemente grande, puede ser encontrado para cada valor de la energía de la D^0 ($E(D^0)$). La ecuación trascendente para la energía de la D^0 :

$$\mathcal{G}(R_{\max}, E(D^0)) = -\frac{\pi}{2} \quad (2.27)$$

una vez la función $\mathcal{G}(r)$ como una solución del problema de Cauchy (2.27) y la energía de la D^0 como una solución de la ecuación trascendental, $A(r)$ puede ser entonces obtenida a través de la relación:

$$A(r) = A_0 \exp \left\{ \int_0^r \left[\text{sen} \mathcal{G}(x) \cos \mathcal{G}(r) [1 - \alpha(x)] - 2 \text{sen}^2 \mathcal{G}(x) / x \right] dx \right\} \quad (2.28)$$

3. ASPECTOS ESPECIFICOS DE LA TESIS

3.1 Impurezas Donadoras en un Punto Cuántico Esférico

Un SQD se puede construir mediante la disposición de una capa de un semiconductor (GaAs), entre capas de otro semiconductor (GaAlAs), de tal manera que este último acota el movimiento de los portadores de carga en las tres direcciones de los ejes coordenados. Debido a esta configuración, se considera que un SQD corresponde a un sistema de baja dimensionalidad, de dimensión cero.

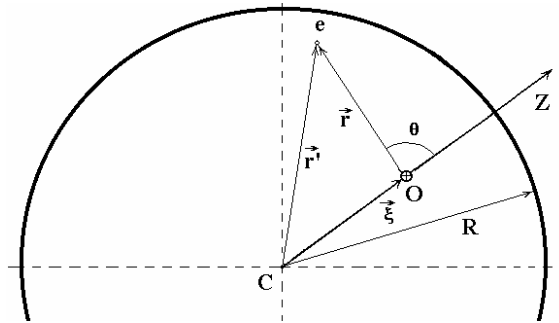
Este modelo considera la perturbación del potencial producida por una impureza donadora como la superposición del potencial periódico del cristal y el potencial del átomo hidrogenoide inmerso en el cristal. La interacción coulombiana entre el electrón excesivo del D^0 y la carga positiva en la impureza hidrogenoide, es más débil que la del átomo de hidrogeno por causa del apantallamiento originado por la presencia de los demás electrones atómicos en el cristal. Por ello se considera que el electrón se encuentra débilmente unido a la D^0 . Este apantallamiento en el modelo de Bastard se describe a través de la constante dieléctrica, ϵ del semiconductor y el potencial coulombiano se puede escribir como:

$$V = \frac{e}{\epsilon r}$$

Teniendo en cuenta la simetría del sistema para nuestro caso, escogeremos el origen de coordenadas del sistema de referencia en la posición del ion, dada por el vector ζ y la

dirección del eje Z a lo largo de la línea que conecta el centro del SQD con la ubicación del ion (Fig.2).

Fig.2. Sistema de referencia usado para una impureza en un SQD



Para estudiar este problema, se hace uso de la aproximación de masa efectiva (AME), según la cual, el efecto del potencial periódico se manifiesta en la alteración de la masa libre del electrón, por lo tanto se le asigna una masa efectiva m^* , en la banda de conducción. Con lo que la ecuación a resolver es (1.3).

3.2 Modelo de confinamiento

La función paso de Heviside, $\theta(z - z_0)$, se define como $\theta(z - z_0) = 0$ si $z < z_0$ y $\theta(z - z_0) = 1$ si $z > z_0$, es comúnmente usada para describir el cambio abrupto en las propiedades de los materiales entre dos medios en la heteroestructura $GaAs(Ga,Al)As$ en la dirección del eje z en el punto $z = z_0$. Sin embargo, si consideramos la difusión de Al en la interface de la región de transición, debemos considerar un modelo con una variación no abrupta de los parámetros del material en la juntura de la heteroestructura.

Por esta razón se sugiere el uso de una versión no abrupta de la función paso definida como:

$$\theta(z, z_0, W) = \begin{cases} 0; & z < z_0 - W \\ \left[\frac{(z - z_0)^2}{W^2} - 1 \right]^2; & z_0 - W \leq z < z_0 \\ 1; & z \geq z_0 \end{cases} \quad (3.1)$$

que provee diferentes formas del perfil de la junción controlada por el parámetro W . El parámetro W puede ser asociado con el ancho de la región de transición en la junción. Podemos ver que la función $\theta(z, z_0, W)$ tiene una región de transición donde esta se incrementa desde 0 en el punto $z = z_0 - W$ hasta 1 en la barrera cuando $z = z_0$. Diferentes formas del potencial de confinamiento $V(z) = V_0 \theta(z, z_0, W)$ pueden ser obtenidas por la variación del parámetro W , ya que si $W \rightarrow 0$ obtendríamos un potencial de confinamiento rectangular, mientras que si W se hace grande este sería de borde suave. Nosotros consideramos la función (3.1) una versión suavizada de la función paso cuyas primera y segunda derivada son continuas en todo el espacio. Esta propiedad es importante para estabilidad del procedimiento numérico que se usa para resolver la ecuación de Schrödinger unidimensional.

Para analizar el efecto del potencial de confinamiento en la energía de enlace del D^0 en el SQD de $GaAs(Ga,Al)As$, debemos considerar dos modelos. Primero, el modelo de borde suave, donde se considera que el potencial dentro del SQD ($0 < r < R_0 - W$) es igual a cero, e igual a V_0 en la barrera ($r > R_0$) y se incrementa desde cero hasta V_0 en la región de transición ($R_0 - W < r < R_0$). La relación para el potencial de confinamiento está dada por:

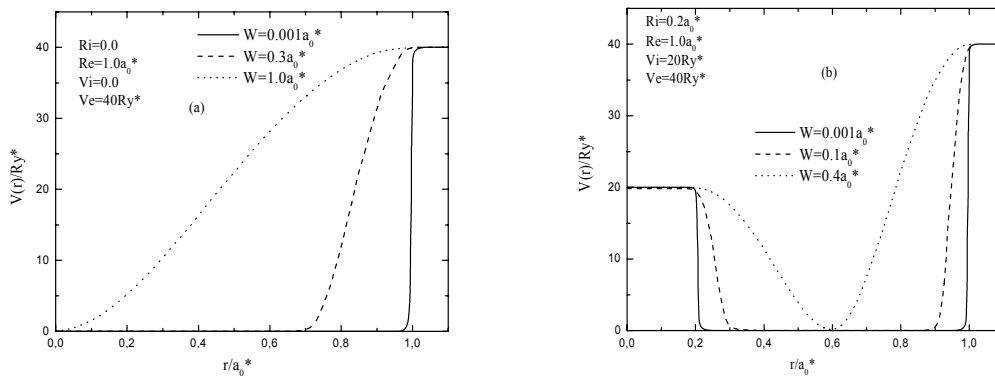
$$V(r) = V_0 \mathcal{G}(r, R_0, W). \quad (3.2)$$

Para el segundo modelo asumimos que en el centro del SQD tenemos una isla de radio R_i , la cual está compuesta de *GaAs* con una concentración adicional de *Al*. El potencial de confinamiento para esta heteroestructura puede ser descrito a través de la siguiente relación:

$$V(r) = V_i \mathcal{G}(-r, -R_i, W) + V_0 \mathcal{G}(r, R_0, W) \quad (3.3)$$

Donde R_i y V_i son el radio y el potencial del núcleo (isla centrada en el SQD) y R_0 y V_0 son el radio y la altura del pozo de potencial del SQD.

Fig 3. Representación esquemática del potencial de confinamiento en un QD de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As con diferentes anchos W de la región de transición (a) sin núcleo repulsivo y (b) con núcleo repulsivo.



3.3 Densidad de estados de impurezas en SQD

Es fundamental el conocimiento de la densidad de estados para el estudio de propiedades ópticas y de transporte electrónico en las distintas heteroestructuras ya mencionadas. Para determinar la densidad de estados de impurezas en un SQD consideramos una distribución de impurezas homogénea dentro de un anillo de radio interno y externo ζ_r y $\zeta_r + d\zeta_r$ respectivamente. Para encontrar el número de donadoras, dN localizadas dentro de este intervalo a partir de la expresión $dN = 4n\pi\zeta_r^2 d\zeta_r = 4n\pi\zeta_r^2 |dE(\zeta_r)/d\zeta_r|^{-1} dE$, donde n es la densidad de impurezas por unidad de área transversal del hilo y $E = E_b(\zeta_r)$ es la energía de enlace de la donadora, la cual depende de la posición de la impureza. Esta energía de enlace es muy sensible al potencial de confinamiento y tendrá efectos considerables sobre la densidad de estados de impurezas por unidad de energía de enlace, $g(E_b)$ la cual está dada por:

$$g(E_b) = 4\pi\zeta_r^2(E_b) \left| \frac{d\zeta_r(E_b)}{dE_b} \right| = 4\pi\zeta_r^2 \left| \frac{dE_b(\zeta_r)}{d\zeta_r} \right|^{-1} \quad (3.4)$$

la función (3.4) puede ser calculada una vez se haya determinado $\zeta_r(E_b)$, lo cual puede hacerse utilizando interpolación cúbica a las curvas $E = E_b(\zeta_r)$.

4. ANALISIS DE RESULTADOS

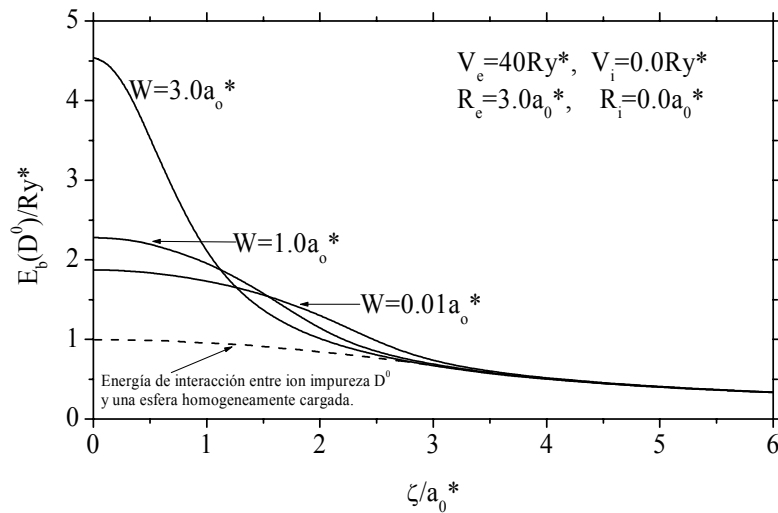
Mediante el uso del método de Dimensión Fractal, presentado en el capítulo anterior y algoritmos computacionales anexados en este trabajo de grado, se calcularon las energías de enlace de una D^0 en función radio del SQD, analizando los efectos del desbordamiento de la función de onda; y la energía de enlace en función de la posición de la impureza D^0 en el SQD de $GaAs(Ga,Al)As$, con diferentes formas de potencial (rectangular, suave, parabólica) y la inclusión en algunos casos de núcleo repulsivo. De acuerdo con estos cálculos se analiza la densidad de estados de impurezas por rango unitario de energía para los distintos casos expuestos anteriormente.

La altura del pozo de potencial depende únicamente de la concentración de aluminio, mientras que, la forma, de la difusión de aluminio hacia el SQD, o sea la región de transición W . La altura del pozo utilizada va desde cero hasta $40Ry^*$ la cual corresponde a una concentración de 30% de aluminio. El radio máximo del SQD utilizado es de $3.0a_0^*$.

En la Fig. 4 se presentan los resultados del cálculo de la energía de enlace del D^0 en un SQD de $GaAs(Ga,Al)As$, de radio $R_e=3.0a_0^*$, $R_i=0.0$ y altura del pozo de potencial de $V_e=40Ry^*$, en función de la posición del D^0 para tres diferentes regiones de transición W . Las curvas correspondientes a los parámetro $W=0.01a_0^*$, $1.0a_0^*$, $3.0a_0^*$, describe la dependencia de la energía de enlace con la posición del D^0 en el SQD y los potenciales de confinamiento casi rectangular, borde suave y parabólico, respectivamente. Podemos

observar que la energía de enlace presenta sus mayores valores para cada caso cuando el D^0 se halla en el centro del SQD, esto es debido al confinamiento al que es sometida la impureza, siendo este mayor en el centro del SQD. Vemos además que el mayor valor de la energía de enlace en el centro del SQD se presenta para el potencial de confinamiento parabólico ($W= 3.0a_0^*$), ya que el confinamiento es mayor, seguido del potencial de borde suave ($W= 1.0a_0^*$), mientras que para el potencial casi rectangular ($W= 0.01a_0^*$) obtenemos el más pequeño de los valores energía de enlace por su menor confinamiento.

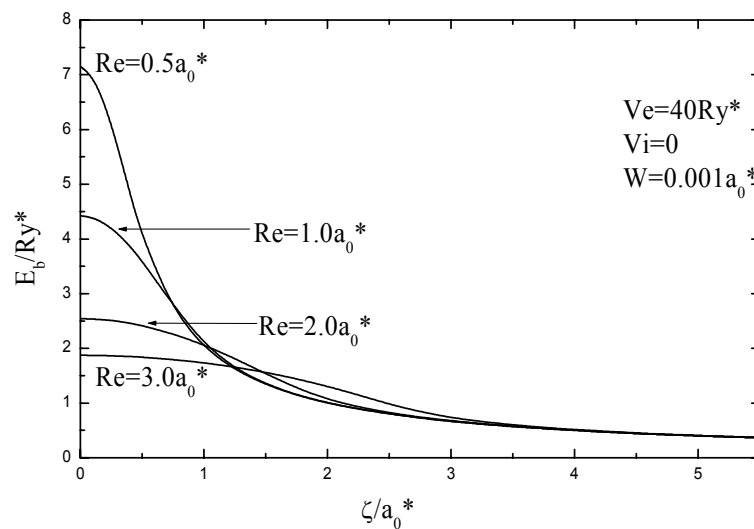
Fig. 4. Energía de enlace del estado base de un D^0 (en un SQD sin núcleo repulsivo $R_i=0$) en función de la posición ζ a lo largo del radio del SQD para diferentes formas de potencial de confinamiento.



A medida que la impureza se desplaza a lo largo del radio del SQD, desde el centro hacia la barrera, vemos que la energía de enlace disminuye suavemente. Esto se debe a que el electrón tiende a estar localizado en el centro del SQD por el fuerte

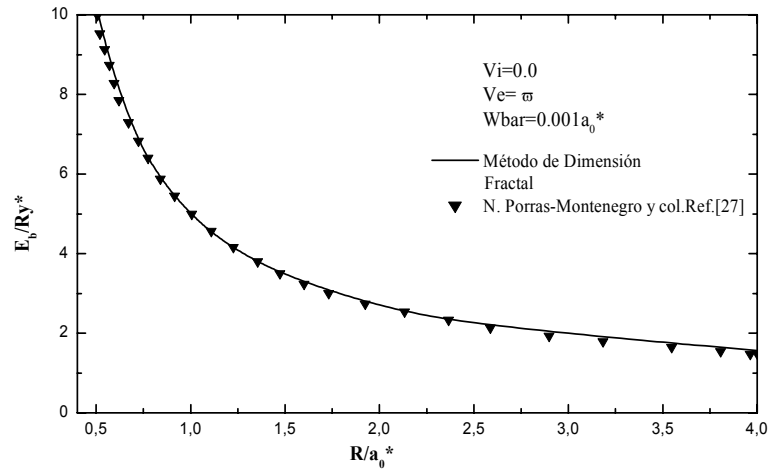
confinamiento impuesto, ya que este es mayor que la energía de enlace del D^0 , la cual es del orden de $k_B T$ (excitaciones térmicas). La curva punteada en la Fig. 4 presenta la energía de interacción electrostática entre el ión y una esfera homogéneamente cargada de radio $R=3.0a_0^*$, como una función de la distancia entre el ión y el centro de la esfera. Se puede ver que la energía de enlace es grande en comparación con la energía electrostática, cuando el D^0 se halla en el centro del SQD. Esto se debe a la asimétrica distribución de la carga del electrón en el SQD, comparado con la alta probabilidad del electrón cerca del D^0 a diferencia de cuando se halla lejos de este. Para posiciones del D^0 fuera del SQD la diferencia entre la energía de enlace y energía de interacción electrostática, se hace insignificante. La causa principal, es que la probabilidad del electrón cerca del ión donador, se ve reducida y por ende la energía de enlace la cual se hace comparable a la energía de interacción electrostática entre una esfera cargada negativamente casi homogénea y una carga positiva.

Fig. 5 Energía de enlace del estado base D^0 en función de la posición ζ a lo largo del radio del SQD con un potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.001a_0^*$ sin núcleo repulsivo y diferentes radios R de SQD.



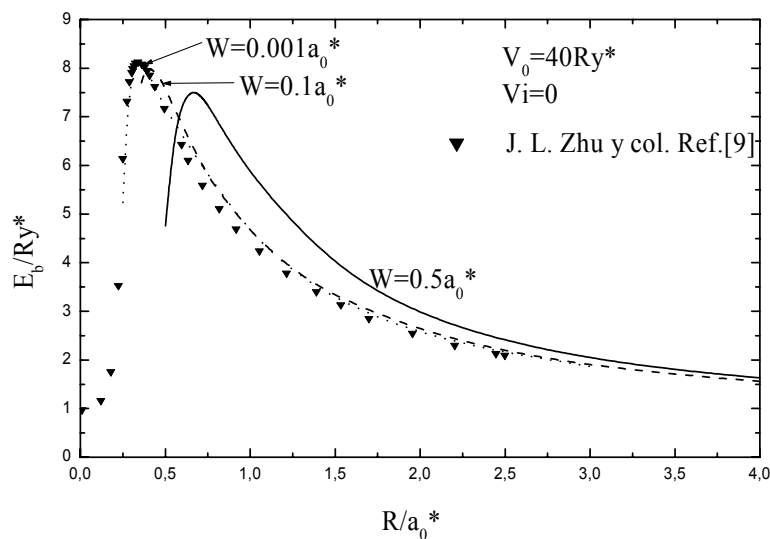
En la Fig. 5 se muestra la energía de enlace del D^0 en un SQD, con un potencial de confinamiento casi rectangular, utilizando varios radios del SQD. Donde la energía se incrementa a medida que disminuimos el radio externo R_e del SQD debido al confinamiento, disminuye la separación media entre el electrón y el ión, y por ello se registra este incremento. Mientras que la energía de enlace disminuye a medida que la impureza se desplaza en la barrera ya que la separación ión electrón se incrementa. Estos resultados instan a analizar las consecuencias en la energía de enlace y la función de onda electrónica, mediante la reducción del radio R_e . Para ello analizaremos estos efectos para SQD con diferentes formas de potencial y valores finitos e infinitos del potencial.

Fig. 6 Energía de enlace del estado base D^0 en función del radio R del SQD con un perfil del potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.001a_0^*$.



En la Fig. 6 Se observa un aumento en la energía de enlace del D^0 a medida que el radio R_e disminuye, utilizando una barrera de potencial infinita, esto se debe como ya se anotó anteriormente, debido al fuerte confinamiento al que es sometido la impureza, pero cabe resaltar en la curva que la energía continua creciendo a medida que disminuimos R_e , a diferencia de cuando se usa un potencial finito donde el valor de la energía alcanza un límite y posteriormente comienza a disminuir. En esta gráfica se comparan los resultados obtenidos en este trabajo de grado con los obtenidos para este mismo caso en la Ref.14. En la cual observamos que las curvas coinciden excelentemente, obteniendo así una buena concordancia entre los métodos utilizados (Dimensión Fractal y Variacional).

Fig. 7 Energía de enlace del estado base D^0 en un SQD en función del radio R_c con diferentes formas de potencial de confinamiento, W .



En la Fig. 7 como ya se había mencionado al reducir el radio del SQD, la energía de enlace debe incrementarse, pero a diferencia de nuestro caso anterior, ésta alcanza un máximo y posteriormente disminuye, esto sucede debido a que la función de onda ha sufrido un desbordamiento, obedeciendo a la relación de incertidumbre de Heisenberg, lo cual conduce a que la función de onda nuevamente adquiera su forma tridimensional. El confinamiento espacial conduce a un incremento de la energía cinética de la partícula y cuando esta alcanza un valor ligeramente mayor que la altura de la barrera ($T > V_e$), la partícula vuelve a quedar libre. Aplicando el principio de incertidumbre, se puede obtener una relación para determinar el valor aproximado del radio crítico R_c (radio para

el cual la función de onda se ha desbordado). Para el potencial rectangular, en función de la altura de la barrera V_e y atendiendo el carácter tridimensional del SQD, la relación

para el radio crítico, está dada por $R_c = a_0^* \sqrt{\frac{15}{4V_e}}$. Esta relación está en acuerdo con

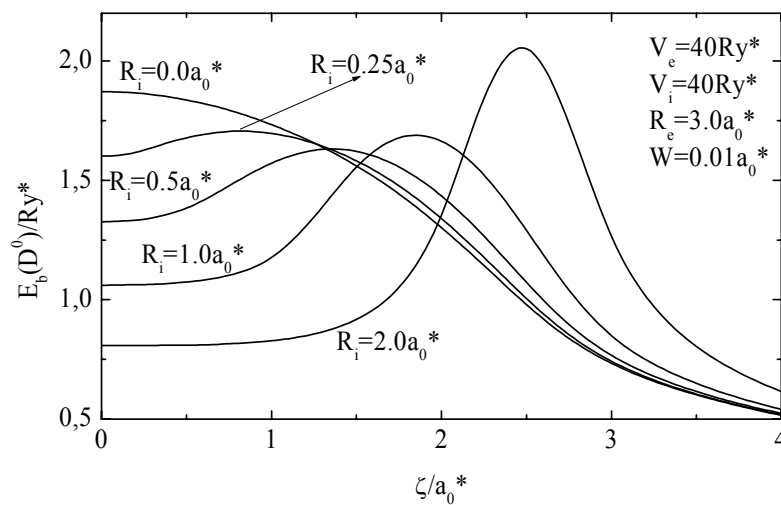
los valores obtenidos en la Fig.7 para la curva con perfil de confinamiento $W=0.001 a_0^*$, ya que aplicando la relación obtenemos un valor de $R_c= 0.308 a_0^*$.

Por otra parte podemos observar en la Fig.7 que el mayor valor de la energía de enlace se obtiene en el caso del potencial de barrera rectangular ($W=0.001 a_0^*$), esto se debe a que la difusión existente para los demás perfiles de potencial ($W=0.1 a_0^*$ y $W=0.5 a_0^*$), no permite reducir el radio del SQD, hasta valores del radio que si pueden ser alcanzados por el potencial rectangular, por lo cual en este caso se puede obtener un mayor confinamiento y por ende un mayor valor de la energía de enlace al alcanzar el R_c .

Las curvas de la Fig. 7 se compararon con las curvas obtenidas en la Ref. [9], en la cual resuelven el problema variacional, mediante el uso del método de diferencias finitas. Este método posee un nivel de complejidad mayor comparado con el método de Dimensión Fractal, en cuanto al tiempo prolongado en cálculos computacionales. Cabe resaltar que la función de prueba utilizada en el método de Dimensión Fractal posee gran flexibilidad, por lo que, esta se ajusta muy bien al ser utilizadas en distintas heteroestructuras con diferentes formas de potencial, obteniéndose excelentes resultados, los cuales se reflejan en las recientes publicaciones realizadas por el grupo

de Física Computacional de la Materia Condensada (FICOMACO) de la Universidad Industrial de Santander UIS.

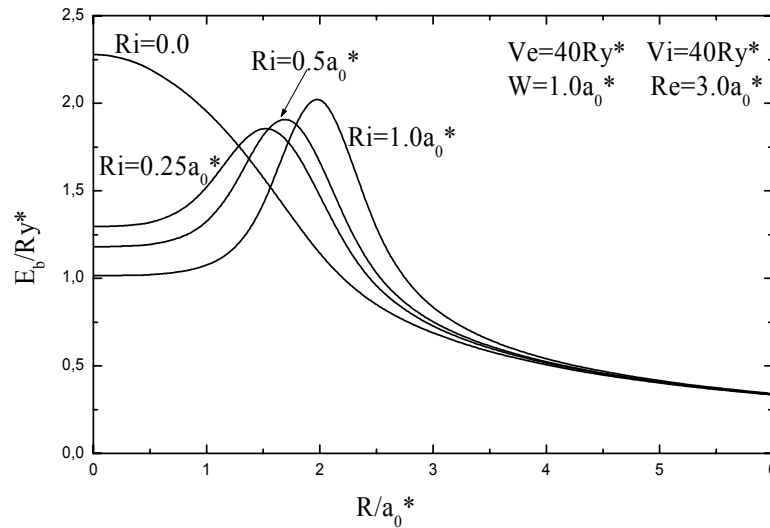
Fig. 8 Energía de enlace del estado base en función de la posición, ζ del D^0 a lo largo del radio del SQD con un potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.01a_0^*$ y diferentes radio del núcleo repulsivo.



En la Fig. 8 se analiza la dependencia de la energía de enlace con el desplazamiento del D^0 desde el centro del SQD de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ hacia la barrera y los efectos sobre la energía de enlace para diferentes radios del núcleo repulsivo (R_i). En esta figura se observan desplazamientos sucesivos de los picos de las curvas y aumentos de la energía de enlace a medida que R_i se incrementa. Se puede apreciar claramente que para pequeños valores de R_i el tunelamiento de la función de onda en el núcleo repulsivo es grande, y por eso la energía de enlace es mayor cerca del centro, mientras que para valores grandes de R_i , dado que el tunelamiento de la función de onda se hace menor en

el núcleo repulsivo, el valor de la energía de enlace disminuye cerca del centro, pero vemos que, para estos valores de R_i existen picos adicionales, debido a que el electrón tiende a estar entre la barrera y el núcleo repulsivo, además del fuerte confinamiento existente en esta región. El comportamiento de la energía de enlace del D^0 , es reflejado en las curvas de densidad de estados de impurezas. Cabe anotar que las curvas presentadas en el la Fig. 8 son totalmente novedosas, hasta la fecha no hay referencias de trabajos realizados en SQD con la inclusión de núcleo repulsivo en revistas nacionales o internacionales.

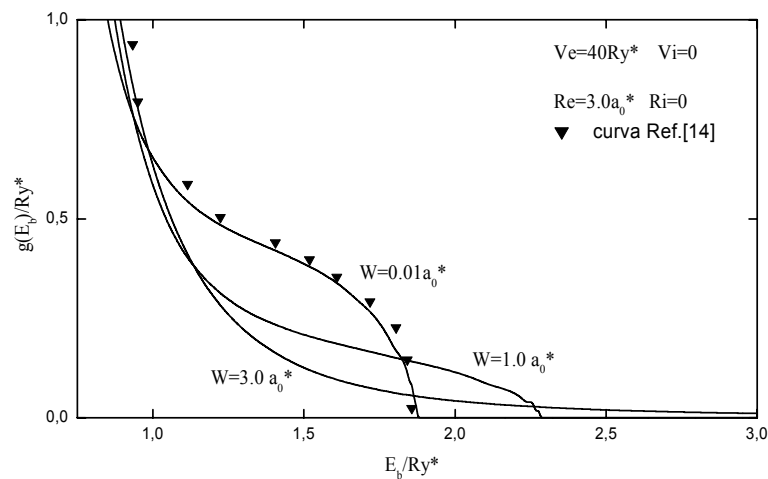
Fig. 9 Energía de enlace del estado base D^0 en función de la posición ζ del D^0 a lo largo del radio de un SQD con un potencial de confinamiento de $W = 1.0a_0^*$ y diferentes radio de núcleo repulsivo.



En la Fig. 9 se muestra la energía de enlace de una D^0 en un SQD con núcleo repulsivo, con $W=1.0a_0^*$ y diferentes valores de R_i . Podemos observar que el electrón tiende a

permanecer en las regiones entre la barrera y el núcleo, como consecuencia de esto los máximos de la energía de enlace en esta región, sufren un desplazamiento para los distintos R_i . Estos máximos de la energía de enlace dan efectos importantes a la densidad de estados de impurezas. Además podemos ver la energía de enlace disminuye cuando la impureza se desplaza en la barrera, porque la distancia entre el electrón y el ión se incrementa.

Fig. 10 Densidad de estados de impureza en un SQD sin núcleo repulsivo y diferentes formas de potencial de confinamiento.



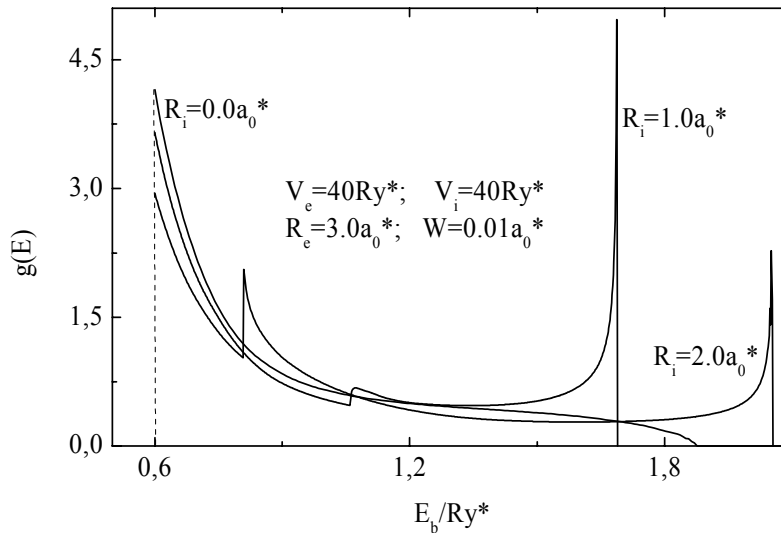
En la Fig. 10 se muestra la densidad de estados de impureza D^0 en un SQD sin núcleo repulsivo con diferentes formas de potencial de confinamiento. Se observan pendientes de considerable inclinación al final de las curvas de densidad de los estados, particularmente en las curvas correspondientes a SQD con regiones de transición $W = 0.01 a_0^*$ (rectangular) y $W = 1.0 a_0^*$ (suave). La singularidad presentada en las curvas

para pequeñas energías, es debido a que la energía de enlace presenta poca variación para grandes valores de ζ , (como se puede apreciar en la Fig.4).valores que han superado el radio del SQD.

La ecuación $g(E_b) = 4\pi\zeta_r^2 \left| \frac{dE_b(\zeta_r)}{d\zeta_r} \right|^{-1}$ para la densidad de estados de impurezas por

rango unitario de energía; nos proporciona estas singularidades, como se puede observar, la ecuación muestra la dependencia de la variación de la energía con la posición del D^0 en la heteroestructura. Se puede observar en la Fig.10. para bajas energías, se presentan singularidades en la densidad de estados. Esto se debe a que la impureza D^0 se está desplazando a través de la barrera, por lo que las variaciones en la energía no son considerables, esta variación es fácilmente observable en la curva de energía de enlace en función de la posición de la Fig.4. Bajo estas condiciones tenemos una correspondencia con el caso de densidad de estados de impurezas para un D^0 en el volumen. En esta grafica comparamos los resultados obtenidos con los de la Ref. [14] obteniendo una buena correspondencia.

Fig. 11 Densidad de estados de una impureza en un SQD con perfil de potencial de confinamiento casi rectangular $W = 0.01a_0^*$ y distintos radios de núcleo repulsivo de SQD.



En la Fig. 11 Se muestra la densidad de estados de impurezas D^0 , en un SQD con un potencial de confinamiento rectangular, y diferentes R_i del núcleo repulsivo. Se observa que la inclusión de un núcleo repulsivo, afecta considerablemente la densidad de estados de impurezas en comparación con la densidad como se hizo en la Fig.10. En la curva correspondiente a un $R_i=2.0a_0^*$ se observan tres picos, donde el pico de la izquierda, es debido a que al incrementar el radio del núcleo, la energía de enlace del D^0 tiende a su valor de energía en el bulk; y por ello la variación de la energía enlace es pequeña; igual sucede con el pico de la derecha, solo que en este caso la impureza ya se encuentra desplazándose en la barrera. Obteniéndose en ambos casos resultados similares al de una impureza en el bulk. El pico en el centro de la curva, se debe al máximo que presenta la curva de energía de enlace en función de la posición, por el

fuerte confinamiento al que es sometido, dado que la región entre el núcleo y la barrera se halla reducido; por esta razón, la singularidad en la densidad de estados es una contribución de las impurezas D^0 en el centro de esta región.

La densidad de estados de impurezas asociado con la posición de los D^0 en el bulk, el centro del SQD (sin núcleo) y la región intermedia entre el núcleo y la barrera. Puede ofrecer un importante entendimiento de los experimentos ópticos con SQD dopados y los espectros de absorción y fotoluminiscencia.

5. CONCLUSION

Una de las características importantes de nuestro método, es la utilización de una función de prueba, la cual describe el comportamiento interno del electrón el SQD, en lugar de una función con parámetros variacionales.

El método permite incluir diferentes formas de potencial de confinamiento sin causar problema alguno para el cálculo computacional.

Las variaciones que sufre el sistema, quedan consignadas en el Jacobiano asociado al sistema; razón por la cual la estructura del método se mantiene invariante.

La inclusión de un núcleo repulsivo en esta investigación dio lugar a nuevas curvas de energía de enlace en función de la posición. Es claro que la singularidad adicional depende de la geometría de las dimensiones del punto y pueden controlarse deliberadamente lo cual repercute en la densidad de estados. Este hecho modificara considerablemente el espectro de absorción y fotoluminiscencia relativo al SQD.

Los resultados están en buena concordancia con los resultados obtenidos por otros autores, donde se analiza la energía de enlace en función de la posición y el radio del

punto, la densidad de estados, además de los límites de confinamiento para el cual la función de onda de la donadora se desborda.

Siguiendo la misma línea de investigación trazada en este trabajo, se puede considerar como una extensión de éste, el análisis de D^0 y Excitones en SQD e incluir en los cálculos el efecto de mezclas de los estados $1s$ y $2p$. Además puede ser calculado la polarizabilidad en el sistema.

Este trabajo de investigación dio lugar a la aceptación de una publicación internacional en la revista indexada Physics E Low Dimensional system y a dos ponencias internacionales, una de ellas en el Pan American Advanced Studies Institute On Physics at the Nanometer Scale (PASI) 2003. San Carlos de Bariloche Argentina. Y otra en el XVI Simposio Latino Americano De Fisica Del Estado Solido (SLAFES) 2002. Mérida Venezuela.

CITAS BIBLIOGRAFICAS

1. R. Turton, *the Quantum Dots*, Oxford University Press, 1995, pag. 84-90
2. G. Bastard, Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981)
3. G. Bastard, L. E. Mendez, L. L. Chang y L. Esaki, Phys. Rev. B **26**, 1974 (1982)
4. W. T. Masselink, Y. C. Chang y H. Morkoç , Phys. Rev. B **28**, 7373 (1983)
5. L. E. Oliveira y L. M. Falicov, Phys. Rev. B **34**, 8676 (1986)
6. R. L. Greene y K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **37**, 4604 (1988)
7. M. Ciurla, J. Adamoski, B. Szafran, S. Bednarek. Phys. Rev. E **15** **261** (2002)
8. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, J. Sierra-Ortega, Phys. Stat. Sol. (b) **243** 560-610 (2002)
9. J. L. Zhu, Phys. Rev. B **39**, 8780 (1989)
10. J. L. Zhu, J.H. Zhao, J. J. Xiong y B. L. Gu, Phys. Rev. B **41**, 6001 (1990).
11. J. L. Zhu, Xi Chen, Phys. Rev. B **50**, 4497 (1994)
12. F. J. Ribeiro, A. Latgé, Phys. Rev. **50**, 4913 (1994)
13. P. G. Bolcatto, C. R. Proetto, Phys. Rev. B **59**, 12487 (1994)
14. N. Porrás-Montenegro, S. T. Pérez-Merchancano, A. Latgé J. Appl. Phys. **74**, 7626 (1993)
15. F. J. Betancur, I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira J. Appl. Phys. **31**, 3391

(1998)

16. D. R Herrick and F. H. Stillinger. Phys. Rev. A **11**, 42 (1975)
17. F. H. Stillinger, J Math. Phys. Rev. B **18**, 1224 (1977)
18. P. Lefebvre, P. Christol and H. Mathieu, Phys. Rev. B **48**, 17308 (1993);
46, 4092 (1992).
19. E. Reyes-Gomes, L. E. Oliveira and M. de Dios-Leyva, J. Appl. Phys. 85,
4045 (1999).
20. F. Domínguez-Adame, *Electrones en Heteroestructuras Semiconductoras*,
pag. 35
21. I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. Escorcía and J. Sierra-Ortega, Phys.
Rev. B **67**,115317 (2003); Phys. Stat. Sol. **234** (b), 590 (2002),
Phys.stat.Sol.(c) **0**, 747753 (2003)
22. J. Cen, R. Chen and K. K. Bajaj. Phys. Rev. **B** 50, 10947 (1994)
23. M. Grudman, O. Stier and Bimberg, Phys. Rev. **B** 52, 11969 (1995)
24. P. D. S. Verns, S. Mailk, G. Mcpherson, D. Childs, C. Roberts, R.
Murray, B. A. Joyce, H. Davock, Phys. Rev **B** 58. R10127 (1998)
25. Pruefer H, *Matematische Annalen* 95 (1926)
26. R. Miller et al. Phys. Rev. B **29**, 7085 (1984)
27. N. Porrás-Montenegro, S. T. Pérez-Merchancano Phys. Rev. B 46, 9780 (1992)

BIBLIOGRAFÍA

- Banyai, L. and Koch, S.W. *in Semiconductor Quantum Dots*
- Bastard, G. Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981)
- Bastard, G. ;Mendez, L. E. ; Chang ,L. L. y Esaki, L. Phys. Rev. B **26**, 1974 (1982)
- Betancur, F. J. ; Mikhailov, I. D. y Oliveira, L. E. J. Appl. Phys. **31**, 3391 (1998)
- Bolcatto, P. G. y Proetto, C. R. Phys. Rev. B **59**, 12487 (1994)
- Cen, J. ; Chen, R. y Bajaj, K. K. Phys. Rev. **B 50**, 10947 (1994)
- Ciurla, M.; Adamoski, J.; Szafran, B. y Bednarek, S. Phys. Rev. E **15 261** (2002)
- Domínguez-Adame, F. *Electrones en Heteroestructuras Semiconductoras*, pag. 35
- Greene, R. L. y Bajaj, K. K. Phys. Rev. B **37**, 4604 (1988)
- Grudman, M.; Stier , O. y Bimberg, Phys. Rev. **B 52**, 11969 (1995)
- Herrick, D. R y Stillinger, F. H. Phys. Rev. A **11**, 42 (1975)
- Lefebvre, P. ; Christol, P. y Mathieu, H. Phys. Rev. B **48**, 17308 (1993); **46**, 4092 (1992).
- Mikhailov, I. D. ; Betancur, F. J. ; Escorcia, R. A.; Sierra-Ortega, J. Phys. Stat. Sol. (b) **243** 560-610 (2002)
- Mikhailov, I. D.; Betancur, F. J. ; Escorcia, R. y Sierra-Ortega, J. Phys. Rev. B **67**,115317 (2003); Phys. Stat. Sol. **234** (b), 590 (2002), Phys.stat.Sol.(c) **0**, 747753 (2003)

Miller, R. et al. Phys. Rev. B **29**, 7085 (1984)

Oliveira, L. E. y Falicov, L. M. Phys. Rev: B **34**, 8676 (1986)

Porras-Montenegro, N. ; Perez-Merchancano, S. T. y Latgé, A. J. Appl. Phys. **74**, 7626 (1993)

Pruefer, H. *Mathematische Annalen* **95** (1926)

Reyes-Gomes, E. ; Oliveira, L. E. y De Dios-Leyva, M. J. Appl. Phys. **85**, 4045 (1999).

Ribeiro, F. J. y Latgé, A. Phys. Rev. **50**, 4913 (1994)

Stillinger, F. H. J Math. Phys. Rev. B **18**, 1224 (1977)

Verns, P. D. S. ; Mailk, S.; Mcpherson, G. ; Childs, D. ; Roberts, C. ; Murray, R.; Joyce, B. A. ; Davock, H. Phys. Rev **B 58**. R10127 (1998)

Zhu, J. L. Phys. Rev. B **39**, 8780 (1989)

Zhu, J. L. y Chen, Xi Phys. Rev. B **50**, 4497 (1994)

Zhu, J. L. ; Zhao, J.H.; Xiong, J. J. y Gu, B. L. Phys. Rev. B **41**, 6001 (1990).

ANEXOS.

ANEXO A.

Programa para calcular de la energía de enlace del estado base de una D^0 en un SQD de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, con y sin la inclusión de núcleo repulsivo, en función de la posición de la impureza. Los subprogramas necesarios para la solución de integrales, métodos interpolativos,...etc. Se encuentran en la librería denominada libex.

MAIN PROGRAM

```
parameter(NM=1000,NP=600,NS=1000)
parameter(m1=2)
parameter(npos=28)
c Rmax - es limite para calcular Jacobiando
c-----
implicit double precision(a-h,o-z)
Character*10 name,name1
real xp(np),yp1(m1,np)
dimension ps(npos)
c-----
common /anilo/ RINT,REXT,Vi,V0,Wbar
common /onda/ fonde(NM),xonde(NM)
common /Splne/ Be(NM),Ce(NM),De(NM),Ee(NM)
common /front/ Rmax
common /Elibre/ E0e
common /pos/ Ra
common /SplnS/ BS(NS),CS(NS),DS(NS),ES(NS),XS(NS),YS(NS)
common /onda/ fonda(NM),xonda(NM)
common /Splna/ Ba(NM),Ca(NM),Da(NM),Ea(NM)
c-----
external Vpot,Fright,Fright1,S0S
c-----
data ps/0.0,0.1,0.2,0.3,0.4,0.5,0.75,1.0,1.25,1.5,1.75,
$ 2.0,2.25,2.5,2.75,3.0,3.25,3.5,3.75,4.0,4.25,4.5,
```

\$ 4.75,5.0,5.25,5.5,5.75,6.0/

```
c-----
c Definicion de los archivos para la salida
write(*,*)' Teclee el titulo del archivo para salvar'
write(*,*)' los resultados del calculo '
read(*,'(a)') name
open(2,file=name)
c-----
c Parametros de la estructura de punto cuantico
Rext=3.0
Rmax=5*Rext
V0=40.0
write(*,*) 'Rint,Wbar, Vi/V0 -?'
read(*,*) Rint,Wbar,af
Vi=af*V0
c Escribir en archivo los parametros de QD
Write(2,*)' Vi V0 RINT REXT Wbar '
Write(2,4) Vi,V0,RINT,REXT,Wbar
4 format(2x,5f7.2)
c Encontrar la energia (E0e) del electron
Emin=0.1d0
Emax=V0-0.001
ITMAX=100
Call Sweep(Vpot,Fright,Emin,Emax,
$ Energy,Fiout,NM,xonde,fonde,Be,Ce,De,Ee,ITMAX)
E0e=Energy
write(*,*) 'ENERGIA DEL ELECTRON '
write(*,*) 'E0e= ',E0e
write(2,*) 'E0e= ',E0e
read(*,*)
c-----
c graficar la funciøn de onda electronica
zmin=0.0
zmax=1.5*REXT
h=(zmax-zmin)/(np-1)
do ik=1,np
z=zmin+h*(ik-1)
xp(ik)=z
yp1(1,ik)=froe(z)
yp1(2,ik)=Vpot(z)/V0
c write(2,*) xp(ik),yp1(1,ik)
end do
name1='froe.pcx'
c read(*,*)
call graphic(xp,yp1,m1,np,name1)
```

```

c Inicio del ciclo para diferentes posiciones de impureza
  do i=1,npos
    Ra=ps(i)
c Calcular Jacobiano
c-----
    NS2=NS/3
    NS1=NS-NS2
    rmn=0.001
    If(Ra.lt.Rext) then
      rmx=3*Rext
      h1=(rmx-rmn)/(NS1-1)
      do ik=1,NS1
        rx=rmn+h1*(ik-1)
        XS(ik)=rx
        YS(ik)=dlog(S0(rx))
      end do
      h2=(Rmax-rmx)/(NS2-1)
      do ik=NS1+1,NS
        rx=rmx+h2*(ik-NS1)
        XS(ik)=rx
        YS(ik)=dlog(S0(rx))
      end do
    else
      rmx=Ra
      h1=(rmx-rmn)/(NS1-1)
      do ik=1,NS1
        rx=rmn+h1*(ik-1)
        XS(ik)=rx
        YS(ik)=dlog(S0(rx))
      end do
      h2=(Rmax-rmx)/(NS2-1)
      do ik=NS1+1,NS
        rx=rmx+h2*(ik-NS1)
        XS(ik)=rx
        YS(ik)=dlog(S0(rx))
      end do
    end if
c   do ik=1,NS
c   write(2,*) XS(ik),YS(ik)
c   end do
    CALL SPLINE(NS,XS,YS,BS,CS,DS,ES,KPR,INT)
c Graficar Jacobiano
  do ik=1,np
    xp(ik)=XS(ik)
    rr=xp(ik)
    yp1(1,ik)=DS0S(rr)

```

```

c   if(yp1(1,ik).gt.10.0) yp1(1,ik)=10.0
c   yp1(1,ik)=0.0
c   yp1(2,ik)=SOS(rr)
c   end do
c   name1='j.pcx'
c   call graphic(xp,yp1,m1,np,name1)
c Encontrar la energia del donor
c   Emin=-10.0
c   Emax=0.0
c   ITMAX=100
c   write(*,*) ' Rmax-? '
c   read(*,*) Rmax
c   Call Sweep1(Rmax,Fright1,Emin,Emax,
$   Energy,Fiout,Nmalla,xonda,fonda,Ba,Ca,Da,Ea,ITMAX)
c   EBD0=-Energy
c   write(*,*) 'ENERGIA DE DONADORA '
c   write(*,*) 'EBD0= ',EBD0
c   write(2,77) Ra,EbD0
77  format(2x,f7.2,f10.5)
c   end do
c   close(2)
c   stop
c   end

```

```

c-----
c I. POTENCIAL DE CONFINAMIENTO

```

```

c-----
c funcion de paso suavizada
c function Step(r,R0,Wbar)
c implicit double precision(a-h,o-z)
c if(r.le.R0-Wbar) then
c   Step=0.0d0
c else if(r.lt.R0) then
c   y=(R0-r)/Wbar
c   Step=(y*y-1.0d0)**2
c else
c   Step=1.0d0
c end if
c return
c end

```

```

c-----
c Potencial de confinamiento con nucleo repulsivo
c function Vpot(r)
c implicit double precision(a-h,o-z)
c common /anilo/ RINT,REXT,Vi,V0,Wbar
c Vpot=V0*Step(r,Rext,Wbar)+Vi*Step(-r,-Rint,Wbar)
c return

```

```

end
c-----
c-----

PROGRAMA BARRIDO TRIGONOMETRICO

c-----

c-----
c TODO PARA ELECTRON DESACOPLADO
c-----
c Subprograma que describe las partes derechas
c de la ecuacion de onda para electron desacoplado
  Subroutine Fright(x,y,yp)
  Implicit Real*8 (a-h,o-z)
  common /anilo/ RINT,REXT,Vi,V0,Wbar
  Common /enivel/ Eniv
  external Vpot
  sn=dsin(y)
  s2=sn*sn
  cs=dcos(y)
  cs2=cs*cs
  alf=Eniv-Vpot(x)
  yp=-(s2+alf*cs2+2*sn*cs/x)
  return
  end
c-----

  Subroutine Sweep(Vpot,Fright,Emin,Emax,
  $ Energy,Fiout,Nmalla,xonda,fonda,BB,CC,DD,EE,ITMAX)
  parameter(NM=1000)
  parameter(m=1)
  parameter (eps=0.001)
  Implicit Real*8 (a-h,o-z)
  dimension fonda(NM),xonda(NM),fi(NM),sss(nm)
  dimension BB(NM),CC(NM),DD(NM),EE(NM)
  common /anilo/ RINT,REXT,Vi,V0,Wbar
  Common /enivel/ Eniv
  external Fright, Veff
c Solucion de ecuacion trascendente
c   pi2=2.0d0*datan(1.0)
  pi=pi
  pi1=pi2*2
  he=(emax-emin)/20.0
  xl=emin
  Eniv=xl

```

```

it=1
xinit=eps
xout=REXT
alf0=Eniv-Vi
yinit=-alf0*eps/3.0
yfin=-datan(dsqrt(V0-Eniv)+1.0/REXT)
call rngkt(Fright,xinit,xout,yinit,NM,xonda,fi)
Fiout=fi(NM)-yfin
write(*,*) it,Eniv,Fiout
c      write(*,*) Eniv,V0,xmax
c      read(*,*)
fl=Fiout
xr=emin+hE
5      Eniv=xr
      it=it+1
      alf0=Eniv-Vi
      yinit=-alf0*eps/3.0
      yfin=-datan(dsqrt(V0-Eniv)+1.0/REXT)
      call rngkt(Fright,xinit,xout,yinit,NM,xonda,fi)
      Fiout=fi(NM)-yfin
      fr=Fiout
      write(*,*) it,Eniv,Fiout
c      read(*,*)
      If(fl*fr.ge.0.0d0) then
        xl=xr
        fl=fr
        xr=xl+he
        if(xl.gt.emax) then
          write(*,*) 'no hay raices'
          read(*,*)
          stop
        end if
        go to 5
      end if
10     x=(xl+xr)/2.0d0
        Eniv=x
        it=it+1
        alf0=Eniv-Vi
        yinit=-alf0*eps/3.0
        yfin=-datan(dsqrt(V0-Eniv)+1.0/REXT)
        call rngkt(Fright,xinit,xout,yinit,NM,xonda,fi)
        Fiout=fi(NM)-yfin
        fx=Fiout
        write(*,*) it,Eniv,Fiout
        if(it.gt.ITMAX) go to 40
c      write(*,*) 'iter= ',it

```

```

        if(dabs(xr-xl).le.1.d-14) go to 40
        if(fx*fl) 30,60,50
30      xr=x
        fr=fx
        go to 10
50      xl=x
        fl=fx
        go to 10
40      continue
60      Energy=x
        write(*,*) 'Funcion de onda'
c  Calcular la funcion subintegral para A(z) en los puntos de la malla
        do kk=1,nmalla
            z=xonda(kk)
            fonda(kk)=(1.0+Vpot(z)-Energy)*
$          dsin(2*fi(kk))/2.0d0-2*(dsin(fi(kk)))**2/z
        end do
c  Calcular los coeficientes de spline para funcion subintegral
        KPR=0
        CALL SPLINE(NM,Xonda,Fonda,BB,CC,DD,EE,KPR,INT)
c  Calcular integrales con splines cubicas
        S=0.0d0
        sss(1)=S
        sm=sss(1)
        do kk=1,nm-1
            dx=xonda(kk+1)-xonda(kk)
            ds=fonda(kk)*dx+bb(kk)*dx**2/2+cc(kk)*dx**3/3
$          +dd(kk)*dx**4/4
            s=s+ds
            sss(kk+1)=S
            if(s.gt.sm) sm=s
        end do
c  Calcular funcion de onda sobre la malla
        fm=1.0d0
        do kk=1,nm
            fonda(kk)=dcos(fi(kk))*dexp(sss(kk)-sm)
            if(kk.eq.1) then
                fm=fonda(kk)
            else
                if(fonda(kk).gt.fm) fm=fonda(kk)
            end if
        end do
        fm=1.0d0/fm
c  Normalizar la funcion de onda
        do kk=1,nm
            fonda(kk)=fm*fonda(kk)

```

```

        end do
c Crear funcion de spline para funcion de onda
    KPR=0
    CALL SPLINE(NM,Xonda,Fonda,BB,CC,DD,EE,KPR,INT)
    Return
    End

```

```

c-----
c funcion de onda para electron desacoplado
function froe(ro)
parameter (NM=1000)
parameter (eps=0.001)
implicit double precision(a-h,o-z)
common /anilo/ RINT,REXT,Vi,V0,Wbar
common /ondae/ fonde(NM),xonde(NM),Nmalle
common /Splne/ Be(NM),Ce(NM),De(NM),Ee(NM)
common /Elibre/ E0e
    if(ro.lt.eps) then
        KPR=0
        xx=eps
        froe=SEVAL(KPR,NM,xx,Xonde,fonde,Be,Ce,De,Ee)
    else if (ro.lt.REXt) then
        KPR=0
        froe=SEVAL(KPR,NM,ro,Xonde,fonde,Be,Ce,De,Ee)
    else
        KPR=0
        xx=REXT-0.001
        froe=SEVAL(KPR,NM,xx,Xonde,fonde,Be,Ce,De,Ee)
        akap=dsqrt(V0-E0e)
        froe=REXT*froe*dexp(-akap*(ro-REXT))/ro
    end if
return
end

```

```

c-----
c TODO PARA JACOBIANO
c-----

```

```

c funcion S0
function S0(r)
implicit double precision(a-h,o-z)
common /p1/ pp
external FunS0
common /pos/ Ra
if(Ra.lt.0.09) then
    ff=froe(r)
    S0=ff*ff
else
    pp=r

```

```

c C lculo de la integral
  Relerr=1.0d-10
  Abserr=1.0d-10
  eps=0.001
  ax=-1.0d0
  bx=1.0d0-eps
  Call Quanc8(FunS0,ax,bx,Abserr,Relerr,Res,
$      Err,Nofunc,Flag)
  If (Flag.ne.0.0d0) Write(*,2) Flag
2  Format(
$ 'Cuidado... El Resultado Puede Ser Equivocado Flag= ',F6.2)
  S0=Res+(froe(dabs(r-Ra)))**2*eps

  end if
  return
  end
c-----
c funcion subintegral para S0
  function FunS0(x)
  implicit double precision(a-h,o-z)
  common /pos/ Ra
  common /p1/ pp
  common /state/ nr,lr,mr
  r=pp
  arg=r**2+RA**2-2*r*Ra*x
  if(arg.lt.1.d-16) arg=1.0d-16
  arg=dsqrt(arg)
  ff=froe(arg)
  FunS0=ff*ff
  return
  end
c-----
c funcion Spline para S0
  function S0S(r)
  parameter (NS=1000)
  implicit double precision(a-h,o-z)
  common /SplnS/ BS(NS),CS(NS),DS(NS),ES(NS),XS(NS),YS(Ns)
  rr=r
  if(rr.gt.XS(NS)) rr=XS(NS)
  KPR=0
  S0S=SEVAL(KPR,NS,rr,XS,YS,BS,CS,DS,ES)
c  if(S0S.lt.1.d-16) S0S=1.d-16
  return
  end
c-----
c La derivada de funcion Spline para S0

```

```

function DS0S(r)
parameter (NS=1000)
implicit double precision(a-h,o-z)
common /SplnS/ BS(NS),CS(NS),DS(NS),ES(NS),XS(NS),YS(NS)
rr=r
if(rr.gt.XS(NS)) rr=XS(NS)
  KPR=1
  DS0S=SEVAL(KPR,NS,rr,XS,YS,BS,CS,DS,ES)
return
end
c-----
c funcion Wfun(r)
  function Wfun(r)
  parameter (eps=0.00001)
  implicit double precision(a-h,o-z)
  common /pos/ Ra
  rr=r
  if(rr.lt.eps) rr=eps
  ff1=froe(rr+Ra)
  ff2=froe(dabs(rr-Ra))
c   Wfun=1.0/rr+(ff1**2*(rr+Ra)-ff2**2*(rr-Ra))/(S0S(rr)*rr*Ra)
  Wfun=2.0/rr+DS0S(rr)
  return
  end
c-----
c TODO PARA DONADORA D0
c-----
c Subprograma que describe las partes derechas de
c las ecuacion diferencial
c para donadora
  Subroutine Fright1(x,y,yp)
  Implicit Real*8 (a-h,o-z)
  Common /enivel/ Eniv
  external S0S
  sn=dsin(y)
  cs=dcos(y)
  s2=sn*sn
  cs2=cs*cs
  w=Wfun(x)
  alf=Eniv+2.0/x
  yp=-(s2+alf*cs2+w*sn*cs)
  return
  end
c-----
  Subroutine Sweep1(Rmax,Fright1,Emin,Emax,
  $   Energy,Fiout,Nmalla,xonda,fonda,BB,CC,DD,EE,ITMAX)

```

```

parameter(NM=1000)
Implicit Real*8 (a-h,o-z)
Common /enivel/ Eniv
dimension fonda(NM),xonda(NM),fi(NM),sss(nm)
dimension BB(NM),CC(NM),DD(NM),EE(NM)
external Fright1, SOS
c Solucion de ecuacion trascendente
c   pi2=2.0d0*datan(1.0)
   pi=pi2*2
   pi4=pi2/2.0
   he=(emax-emin)/20.0
   xl=emin
   Eniv=xl
   it=1
   xinit=1.0d-2
   xout=Rmax
   yinit=-pi4
c   yfin=-datan(dsqrt(dabs(Eniv)))
   yfin=-pi2
call rngkt(Fright1,xinit,xout,yinit,NM,xonda,fi)
Fiout=fi(NM)-yfin
write(*,*) it,Eniv,Fiout
c   write(*,*) Eniv,V0,xmax
c   read(*,*)
   fl=Fiout
   xr=emin+hE
5   Eniv=xr
   it=it+1
c   yfin=-datan(dsqrt(dabs(Eniv)))
   yfin=-pi2
call rngkt(Fright1,xinit,xout,yinit,NM,xonda,fi)
Fiout=fi(NM)-yfin
fr=Fiout
write(*,*) it,Eniv,Fiout
c   read(*,*)
If(fl*fr.ge.0.0d0) then
   xl=xr
   fl=fr
   xr=xl+he
   if(xl.gt.emax) then
     write(*,*) 'no hay raices'
     read(*,*)
     return
   end if
   go to 5
end if

```

```

10    x=(xl+xr)/2.0d0
      Eniv=x
      it=it+1
c     yfin=-datan(dsqrt(dabs(Eniv)))
      yfin=-pi2
      call rngkt(Fright1,xinit,xout,yinit,NM,xonda,fi)
      Fiout=fi(NM)-yfin
      fx=Fiout
      write(*,*) it,Eniv,Fiout
      if(it.gt.ITMAX) go to 40
c     write(*,*) 'iter= ',it
      if(dabs(xr-xl).le.1.0d-6) go to 40
      if(fx*fl) 30,60,50
30    xr=x
      fr=fx
      go to 10
50    xl=x
      fl=fx
      go to 10
40    continue
60    Energy=x
      write(*,*) 'Funcion de onda'
c     Calcular la funcion subintegral para A(z) en los puntos de la malla
      do kk=1,nmalla
        z=xonda(kk)
        w=Wfun(z)
        alf=Eniv+2/z
        fonda(kk)=(1.0-alf)*
$      dsin(2*fi(kk))/2.0d0-w*(dsin(fi(kk)))**2
      end do
c     Calcular los coeficientes de spline para funcion subintegral
      KPR=0
      CALL SPLINE(NM,Xonda,Fonda,BB,CC,DD,EE,KPR,INT)
c     Calcular integrales con splines cubicas
      S=0.0d0
      sss(1)=S
      sm=sss(1)
      do kk=1,nm-1
        dx=xonda(kk+1)-xonda(kk)
        ds=fonda(kk)*dx+bb(kk)*dx**2/2+cc(kk)*dx**3/3
$      +dd(kk)*dx**4/4
        s=s+ds
        sss(kk+1)=S
        if(s.gt.sm) sm=s
      end do
      sm=0.0

```

```

c Calcular funcion de onda sobre la malla
  fm=1.0d0
  do kk=1,nm
    fonda(kk)=dcos(fi(kk))*dexp(sss(kk)-sm)
    if(kk.eq.1) then
      fm=fonda(kk)
    else
      if(fonda(kk).gt.fm) fm=fonda(kk)
    end if
  end do
  fm=1.0d0/fm
c Normalizar la funcion de onda
  do kk=1,nm
    fonda(kk)=fm*fonda(kk)
  end do
c Crear funcion de spline para funcion de onda
  KPR=0
  CALL SPLINE(NM,Xonda,Fonda,BB,CC,DD,EE,KPR,INT)
  Return
  End

c -----
c PROCEDIMIENTOS DE RUNGE -KUTTA
c -----
c Subrutina que realiza N pasos de Runge Kutta
c para una ecuación diferencial de primera orden
c Parametros de entrada:
c  xin -el punto inicial
c  xout -el punto final
c  N - numero de los nodos de la malla
c  yin-valor de la función en el punto inicial
c Parametros de salida:
c  x(i) -coordenadas de la malla, i=1,2,...,N
c  y(i)-valores de la función sobre la malla
c -----
  subroutine mngkt(right,xin,xout,yin,N,x,y)
  implicit real*8 (a-h,o-z)
  dimension x(n),y(n)
  external right
c El paso de la malla
  h=(xout-xin)/(n-1)
c primer punto de la malla
  x(1)=xin
  y(1)=yin
  xpred=x(1)
  ypred= y(1)
  do i=2,N

```

```

c Paso de Runge-Kutta al siguiente punto de la malla
  call RK(right,xpred,ypred,h,xnext,ynext)
  x(i)=xnext
  y(i)=ynext
c Preparacion de los datos iniciales para siguiente paso
  xpred=xnext
  ypred=ynext
  end do
  return
  end
c-----
c Subrutina que realiza un paso de Runge Kutta
c para una ecuación diferencial de primera orden  $dy/dx=f(y,x)$ 
c Las funciones de la parte derecha deben ser definidas
c en una subrutina externa "subroutine right(x,y,f)"
c Parametros de entrada:
c   x0 -el punto inicial
c   h  - longitud del paso
c   y0-valor de la función al inicio del intervalo
c Parametros de salida:
c   yf-valor de la función al final del intervalo
c   xf-el punto final
c-----
  subroutine RK(right,x0,y0,h,xf,yf)
  implicit real*8(a-h,o-z)
c Valores iniciales de la función
  yt=y0
  xt=x0
c Cálculo del termino k1 en la formula de Runge Kutta
  call right (xt,yt,ak1)
c Preparación del valor de la función para el segundo
c paso Runge-Kutta
  yt=y0+h*ak1/2.0d0
  xt=x0+h/2.0
c Cálculo de los coefficients k2
  call right (xt,yt,ak2)
c Preparación del valor de la función para el tercer
c paso Runge-Kutta
  yt=y0+h*ak2/2.0d0
c   xt=x0+h/2.0
c Cálculo de los coefficients k3
  call right (xt,yt,ak3)
c Preparación del valor de la función para el cuarto
c paso Runge-Kutta
  yt=y0+h*ak3
  xt=x0+h

```

```

c C lculo de los cofficientes k4
    call right (xt,yt,ak4)
c C lculo del valor de la funciøn al final del intervalo
    yf=y0+h*(ak1+2*ak2+2*ak3+ak4)/6.0d0
    xf=xt
    return
    end
c-----

```

ANEXO B

Programa para calcular la densidad de estados de impurezas D^0 en un SQD sin núcleo repulsivo de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, Los subprogramas se encuentran en la librería denominada Libex.

```
$debug
  parameter(m=1)
  parameter(npos=28)
  parameter(np=800)
c-----
  implicit double precision(a-h,o-z)
  Character*12 name,name1
  real xp(np),yp(m,np)
c-----
  common /Spln1/ B1(npos),C1(npos),D1(npos),E1(npos)
c  common /Spln2/ B2(npos),C2(npos),D2(npos),E2(npos)
c  common /Spln3/ B3(npos),C3(npos),D3(npos),E3(npos)
c  common /Spln4/ B4(npos),C4(npos),D4(npos),E4(npos)
c  common /Spln5/ B5(npos),C5(npos),D5(npos),E5(npos)
  common /energy/ ro(npos), En1(npos)

c Definicion de los archivos para la salida
write(*,*) ' Teclee el titulo archivo para leer los datos'
read(*,'(a)') name
open(1,file=name,status='old')
write(*,*) ' Teclee el titulo archivo para salvar'
write(*,*) ' los resultados del calculo '
read(*,'(a)') name1
open(2,file=name1)
Emin=0.6
do i=1,npos
  kk=np-1+i
  read(1,*) ro(kk),En1(kk)
end do
```

```

close(1)
Emax=En1(npos)
Emax1=En1(npos)
c Emax2=En2(npos)
c Emax3=En3(npos)
c Emax4=En4(npos)
c Emax5=En5(npos)
c if(En2(npos).gt.Emax) Emax=En2(npos)
c if(En3(npos).gt.Emax) Emax=En3(npos)
c if(En4(npos).gt.Emax) Emax=En4(npos)
c if(En5(npos).gt.Emax) Emax=En5(npos)
Emin=0.6
c Splines para las curvas E(ro)
CALL SPLINE(npos,En1,ro,B1,C1,D1,E1,KPR,INT)

c CALL SPLINE(npos,En2,ro,B2,C2,D2,E2,KPR,INT)
c CALL SPLINE(npos,En3,ro,B3,C3,D3,E3,KPR,INT)
c CALL SPLINE(npos,En4,ro,B4,C4,D4,E4,KPR,INT)
c CALL SPLINE(npos,En5,ro,B5,C5,D5,E5,KPR,INT)
c Calculo de los densidades
h=(6.0-Emin)/(np-1)
s1=0.0
c s2=0.0
c s3=0.0
c s4=0.0
c s5=0.0
do i=1,np
E=Emin+h*(i-1)
xp(i)=E
yp(1,i)=0.0
if(E.lt.Emax1) then
KPR=0
r=SEVAL(KPR,npos,E,En1,ro,B1,C1,D1,E1)
KPR=1
de=SEVAL(KPR,npos,E,En1,ro,B1,C1,D1,E1)
yp(1,i)=r**2*dabs(de)
end if
s1=s1+yp(1,i)
c yp(2,i)=0.0
c if(E.lt.Emax2) then
c KPR=0
c r=SEVAL(KPR,npos,E,En2,ro,B2,C2,D2,E2)
c KPR=1
c de=SEVAL(KPR,npos,E,En2,ro,B2,C2,D2,E2)
c yp(2,i)=r**2*dabs(de)
c end if

```

```

c      s2=s2+yp(2,i)
c      yp(3,i)=0.0
c      if(E.lt.Emax3) then
c          KPR=0
c          r=SEVAL(KPR,npos,E,En3,ro,B3,C3,D3,E3)
c          KPR=1
c          de=SEVAL(KPR,npos,E,En3,ro,B3,C3,D3,E3)
c          yp(3,i)=r**2*dabs(de)
c          end if
c          s3=s3+yp(3,i)
c          yp(4,i)=0.0
c          if(E.lt.Emax4) then
c              KPR=0
c              r=SEVAL(KPR,npos,E,En4,ro,B4,C4,D4,E4)
c              KPR=1
c              de=SEVAL(KPR,npos,E,En4,ro,B4,C4,D4,E4)
c              yp(4,i)=r**2*dabs(de)
c              end if
c              s4=s4+yp(4,i)
c              yp(5,i)=0.0
c              if(E.lt.Emax5) then
c                  KPR=0
c                  r=SEVAL(KPR,npos,E,En5,ro,B5,C5,D5,E5)
c                  KPR=1
c                  de=SEVAL(KPR,npos,E,En5,ro,B5,C5,D5,E5)
c                  yp(5,i)=r**2*dabs(de)
c                  end if
c                  s5=s5+yp(5,i)
c      end do
c      s1=s1*h
c      s2=s2*h
c      s3=s3*h
c      s4=s4*h
c      s5=s5*h
c Normalizacion
c      do i=1,np
c          yp(1,i)=yp(1,i)/s1
c          yp(2,i)=yp(2,i)/s2
c          yp(3,i)=yp(3,i)/s3
c          yp(4,i)=yp(4,i)/s4
c          yp(5,i)=yp(5,i)/s5
c          write(2,77) xp(i),(yp(j,i),j=1,1)
c      end do
77  format(2x,f9.4,5e12.4)
c      close(2)
c      name='dens.pcx'

```

```

    call graphic(xp,yp,m,np,name)
    close(1)
    stop
end

```

ANEXO C

Programa para calcular la densidad de estados de impurezas D^0 en un SQD con la inclusión de núcleo repulsivo de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, Los subprogramas se encuentran en la librería denominada Libex.

```

parameter(mp=2)
parameter(npos=28)
parameter(np=400)
c-----
implicit double precision(a-h,o-z)
Character*10 name,name1
real xp(np),yp(mp,np)
c-----
common /Spln1/ B1(npos),C1(npos),D1(npos),E1(npos)
common /Spln2/ B2(npos),C2(npos),D2(npos),E2(npos)
common /energy/ ro(npos), En1(npos),En2(npos),r(np),E(np)
common /dens/ E11(np), r11(np),E21(np),r21(np)

common /Spln11/ B11(np),C11(np),D11(np),E11s(np)
common /Spln21/ B21(np),C21(np),D21(np),E21s(np)
c Definicion de los archivos para la salida
write(*,*) ' Teclee el titulo archivo para leer los datos'
read(*,'(a)') name
open(1,file=name,status='old')
write(*,*) ' Teclee el titulo archivo para salvar'
write(*,*) ' los resultados del calculo '
read(*,'(a)') name1
open(2,file=name1)
Emin=1.0
do kk=1,npos
read(1,*) ro(kk),En1(kk),En2(kk)

```

```

    end do
    close(1)
c Tratamiento de la primera curva
    m=1
c Construcción de spline para datos iniciales
    CALL SPLINE(npos,ro,En1,B1,C1,D1,E1,KPR,INT)
c Calculo de las energias en np puntos (multiplicar los datos iniciales)
    rmin=ro(1)
    rmax=ro(npos)
    h=(rmax-rmin)/(np-1)
    do i=1,np
        rr=rmin+h*(i-1)
        r(i)=rr
        KPR=0
        E(i)=SEVAL(KPR,npos,rr,ro,En1,B1,C1,D1,E1)
        write(*,*) i, r(i),E(i)
    end do
    read(*,*)
c Encontrar la posición del máximo
    i=1
    Emin=E(i)
    Emax=E(i)
10  i=i+1
    if(E(i).gt.Emax) then
        Emax=E(i)
        go to 10
    end if
    nmax=i
c Organizar el arreglo para la parte de la curva
c ante del máximo y encontrar spline
    nl=nmax
    do i=1,nl
        E11(i)=E(i)
        r11(i)=r(i)
    end do
    CALL SPLINE(nl,E11,r11,B11,C11,D11,E11s,KPR,INT)
c  write(*,*) ' 1'
c  read(*,*)
c Organizar el arreglo para la parte de la curva
c después del máximo y encontrar spline
    nr=np-nmax
    do i=1,nr
        E21(i)=E(np-i+1)
        r21(i)=r(np-i+1)
    end do
    CALL SPLINE(nr,E21,r21,B21,C21,D21,E21s,KPR,INT)

```

```

c   write(*,*) ' 2'
c   read(*,*)
c Definir las regiones de la energia uniforme
  Emin1=E(1)
  Emin2=E(np)
  Emax1=Emax
  Emax2=Emax
c Calcular la densidad en np puntos
  h=(Emax-Emin2)/(np-1)
  s=0.0
  do i=1,np
    Et=Emin2+h*(i-1)
    xp(i)=Et
    yp(m,i)=0.0
    if(Et.lt.Emax1.and.Et.gt.Emin1) then
      KPR=0
      r0=SEVAL(KPR,nr,Et,E11,r11,B11,C11,D11,E11s)
c   write(*,*) ' 3'
c   read(*,*)
      KPR=1
      de=SEVAL(KPR,nl,Et,E11,r11,B11,C11,D11,E11s)
c   write(*,*) ' 4'
c   read(*,*)
      yp(m,i)=yp(m,i)+r0**2*dabs(de)
    end if
    if(Et.lt.Emax2.and.Et.gt.Emin2) then
      KPR=0
      r0=SEVAL(KPR,nl,Et,E21,r21,B21,C21,D21,E21s)
      KPR=1
      de=SEVAL(KPR,nl,Et,E21,r21,B21,C21,D21,E21s)
      yp(m,i)=yp(m,i)+r0**2*dabs(de)
    end if
    s=s+yp(m,i)
  end do
  s=s*h
c Normalizar
  do i=1,np
    yp(m,i)=yp(m,i)/s
  end do
c Tratamiento de la segunda
  m=2
c Construcción de spline para datos iniciales
  CALL SPLINE(npos,ro,En2,B2,C2,D2,E2,KPR,INT)
c Calculo de las energias en np puntos (multiplicar los datos iniciales)
  rmin=ro(1)
  rmax=ro(npos)

```

```

h=(rmax-rmin)/(np-1)
do i=1,np
  rr=rmin+h*(i-1)
  r(i)=rr
  KPR=0
  E(i)=SEVAL(KPR,npos,rr,ro,En2,B2,C2,D2,E2)
end do
c Encontrar la posicion del maximo
i=1
Emin=E(i)
Emax=E(i)
20  i=i+1
   if(E(i).gt.Emax) then
     Emax=E(i)
     go to 20
   end if
nmax=i
c Organizar el arreglo para la parte de la curva
c ante del maximo y encontrar spline
nl=nmax
do i=1,nl
  E11(i)=E(i)
  r11(i)=r(i)
end do
CALL SPLINE(nl,E11,r11,B11,C11,D11,E11s,KPR,INT)
c Organizar el arreglo para la parte de la curva
c despues del maximo y encontrar spline
nr=np-nmax
do i=1,nr
  E21(i)=E(np-i+1)
  r21(i)=r(np-i+1)
end do
CALL SPLINE(nr,E21,r21,B21,C21,D21,E21s,KPR,INT)
c Definir las regiones de la energia uniforme
Emin1=E(1)
Emin2=E(np)
Emax1=Emax
Emax2=Emax
c Calcular la densidad en np puntos
h=(Emax-Emin2)/(np-1)
s=0.0
do i=1,np
  Et=Emin2+h*(i-1)
  xp(i)=Et
  yp(m,i)=0.0
  if(Et.lt.Emax1.and.Et.gt.Emin1) then

```

```

KPR=0
r0=SEVAL(KPR,nr,Et,E11,r11,B11,C11,D11,E11s)
KPR=1
de=SEVAL(KPR,nl,Et,E11,r11,B11,C11,D11,E11s)
yp(m,i)=yp(m,i)+r0**2*dabs(de)
end if
if(Et.lt.Emax2.and.Et.gt.Emin2) then
KPR=0
r0=SEVAL(KPR,nl,Et,E21,r21,B21,C21,D21,E21s)
KPR=1
de=SEVAL(KPR,nl,Et,E21,r21,B21,C21,D21,E21s)
yp(m,i)=yp(m,i)+r0**2*dabs(de)
end if
s=s+yp(m,i)
end do
s=s*h
c Normalizar
do i=1,np
yp(m,i)=yp(m,i)/s
end do
c
do i=1,np
write(2,77) xp(i),(yp(j,i),j=1,m)
end do
77 format(2x,f9.4,5e12.4)
close(2)
name='dens.pcx'
call graphic(xp,yp,mp,np,name)
close(1)
stop
end

```