

**EFFECTO DEL CAMPO ELECTRICO SOBRE EL ESTADO BASE DE UNA D^0 EN
POZOS CUANTICOS Y DOBLES POZOS CUANTICOS DE GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs**

MIGUEL ANGEL DURÁN ROA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

PREGRADO EN FÍSICA

BUCARAMANGA

2004

**EFFECTO DEL CAMPO ELECTRICO SOBRE EL ESTADO BASE DE UNA D^0 EN
POZOS CUANTICOS Y DOBLES POZOS CUANTICOS DE GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs**

MIGUEL ANGEL DURÁN ROA

Trabajo de grado para optar al título de Físico

**Director
Dr. Ilia Davidovich Mikhailov**

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

PREGRADO EN FÍSICA

BUCARAMANGA

2004

TABLA DE CONTENIDO

	Pag
INTRODUCCIÓN	1
1. HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS	4
1.1 Pozo cuántico (QW) de GaAs/Ga(Al)As.....	5
1.2 Doble pozo cuántico (DQW) de GaAs/Ga(Al)As.....	6
1.3 Modelación de forma de potencial.....	6
2. MÉTODO DE DIMENSION FRACTAL PARA DONADORAS NEUTRAS EN QWs y DQWs	8
2.1 Hamiltoniano adimensional de una donadora en QW y en DQW en presencia de campo eléctrico.....	8
2.2 Método de barrido trigonométrico para electrón desacoplado	9
2.3 Método de Dimensión Fractal para una donadora confinada.....	10
2.4 Extensión del Método de Dimensión Fractal.....	12
3. RESULTADOS DE CALCULO Y DISCUSION	15
3.1 Efecto de Stark para D^0 en QW.....	15
3.2 Efecto de Stark para D^0 DQW.....	19
3.3 Aplicación del MDF extendido a QW y DQW.....	24
4. CONCLUSIONES	27
CITAS BIBLIOGRÁFICAS	28
BIBLIOGRAFÍA	29

INDICE DE FIGURAS

	Pag
FIG 1. Diagrama energético de un pozo cuántico de GaAl/Ga _{1-x} Al _x As.....	5
FIG 2. Estructura de capas de una superred periódica potencial de una superred	6
FIG 3. Perfil del potencial de confinamiento de una superred.....	18
FIG. 4 Energía de enlace como función del ancho del pozo para la D ⁰ en el borde del pozo a la derecha y la izquierda considerando diferentes alturas de la barrera con un campo eléctrico aplicado de $F = 50(KV / cm)$	15
FIG 5. Energía de enlace de una D ⁰ en un QW con tres diferentes formas de potencial de confinamiento como función del campo eléctrico aplicado para la donadora centrada y descentrada.....	16
FIG 6. Energía de enlace de una D ⁰ en función del campo eléctrico aplicado para diferentes anchos del pozo y posiciones de la impureza con potencial de confinamiento rectangular con $V_{ext} = 40R_y^*$	17
FIG 7. Energía de enlace de una D ⁰ en función de la posición de la impureza en dirección axial para tres campos eléctricos diferentes y considerando potenciales de confinamiento parabólico y rectangular.....	18
FIG 8. Energía de enlace de una D ⁰ en función del ancho de la barrera L_b para diferentes anchos del pozo L_w y posiciones de la impureza	19
FIG 9. Energía de enlace de una D ⁰ en un DQW como función del ancho del pozo ($L_b = 0.5L_w$) con la altura de la barrera como parámetro.....	20
FIG 10. Energía de enlace de una D ⁰ en un DQW como función del ancho del pozo cuando el ancho del pozo y de la barrera son iguales para dos posiciones de la D ⁰ centrada y descentrada.....	21
FIG 11. Energía de enlace de una D ⁰ como función de la intensidad del campo eléctrico para la D ⁰ centrada y el ancho del pozo igual al ancho de la barrera considerando el suavizado del potencial como parámetro.....	22

FIG 12. Energía de enlace de una D^0 como función de la intensidad del campo eléctrico con diferentes perfiles del potencial de confinamiento para la D^0 centrada en el pozo de la derecha y de la izquierda.....	23
FIG 13. Función de onda del electrón desacoplado para potenciales de confinamiento rectangular, suave y parabólico sin campo eléctrico aplicado	24
FIG 14. Función de onda para el electrón desacoplado para potencial de confinamiento rectangular, suave y parabólico con un campo eléctrico de 100(Kv/cm).....	24
FIG 15. Energía de enlace de una D^0 en función del ancho del pozo con el campo eléctrico como parámetro e incluyendo el parámetro variacional α en la función de prueba.....	25
FIG 16. Cálculo de la energía de enlace de una D^0 como función del ancho del pozo para un ancho de barrera fijo y una altura de barrera de $40R_y^*$, utilizando el Método de Dimensión Fractal Extendido	25

EFFECTO DEL CAMPO ELECTRICO SOBRE EL ESTADO BASE DE UNA D^0 EN
POZOS CUANTICOS Y SUPERREDES DE GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs*

Autor: Miguel Angel Durán Roa**

Palabras clave:

1. Campo eléctrico. 2. Potenciales suaves. 3. QW. 4. DQW. Donadora neutra.

Se estudia el efecto del campo eléctrico aplicado en la dirección de crecimiento del cristal sobre la energía de enlace del estado fundamental de una impureza donadora neutra en heteroestructuras de pozo cuántico (QW) y doble pozo cuántico (DQW) de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs, considerando diferentes formas del potencial de confinamiento. La función de onda para este estado se presenta en una forma de producto de la función de onda del electrón desacoplado con una función de correlación que corresponde a la interacción electrón – donadora. Para calcular la energía de enlace utilizamos el Método de Dimensión Fractal (MDF) con el cual partiendo del principio variacional de Schrödinger encontramos la función de correlación que minimiza el funcional. El análisis se realiza dentro del marco de la aproximación masa efectiva, suponiendo que los parámetros del material como la masa efectiva y la constante dieléctrica son uniformes en las capas de GaAs y Ga_{1-x}Al_xAs. Además proponemos una extensión del Método de Dimensión Fractal, que permite obtener mejores resultados para el cálculo de la energía de enlace E_b al incluir en la función de prueba la posibilidad de un confinamiento de la distribución electrónica en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento de cristal. Presentamos los resultados del cálculo de la energía de enlace de una donadora en heteroestructuras de pozo cuántico y doble pozo cuántico en función del ancho del pozo, la altura del potencial de confinamiento y la posición de la impureza dentro de la heteroestructura.

*Trabajo de grado

**Facultad de Ciencias, Pregrado en Física, Ph. D. MIKHAILOV DAVIDOVICH Ilia.

EFFECT OF AN ELECTRIC FIELD ON THE GROUND STATE OF A D^0 IN $\text{GaAs-Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ QUANTUM WELLS AND SUPERLATTICES*

Miguel Angel Durán Roa**

Key words

1. Electric field. 2. Soft potentials. 3. QW. 4. DQW. 5. Neutral donor.

The ground state binding energy of a neutral donor impurity in quantum well QW and double quantum well DQW heterostructures in presence of an external electric field applied parallel to the growth direction, and considering different confinement potentials is studied. Wave functions are expressed as the product of the decoupled electron wave function with a correlation function that corresponds to the electron – donor interaction. Calculating the binding energy the Fractal Dimension Method FDM is used, which starting from the Schrödinger's variational principle we find the Euler-Lagrange equation in order to get the correlation function which minimizes the functional. We work within the framework of the effective mass approximation considering material's parameters as effective mass and dielectric constant uniform throughout the layers of GaAs y $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$. Moreover, an extension of the Fractal Dimension Method FDM is included. This extension let us to get better results to the binding energy E_b because we include into the trial function the possibility of a confinement of the electronic distribution on the transversal plane to the crystal growth direction. We show the results to the binding energy E_b in a QW and DQW heterostructures varying the well width, barrier height of the confinement potential and the donor position inside the heterostructure, the variation of the interwell barrier width has been included.

* Grade work

** Science Faculty, Physics School, Ph. D MIKHAILOV DAVIDOVICH Ilia.

INTRODUCCION

Los recientes avances tecnológicos en telecomunicaciones y microelectrónica se han fundamentado en los estudios teóricos y experimentales de la Física del estado sólido, específicamente, en el área relacionada con los sistemas de baja dimensionalidad. Se considera que un sistema es de baja dimensionalidad (BD) si se disminuye el número de grados de libertad de las partículas (electrones, fonones o fotones), como sucede en el caso de pozos (QW), hilos (QWW) y puntos cuánticos (QD), en los cuales se reduce el movimiento de las partículas a dos, uno y cero dimensiones respectivamente¹.

Las aplicaciones de estas nanoestructuras en modernas tecnologías esta relacionada con la fabricación de nuevos dispositivos semiconductores que tienen mayor eficiencia y velocidad de respuesta, menor tamaño y consumo de energía debido a la mayor sensibilidad del espectro electrónico de los sistemas BD a las perturbaciones externas. Los sistemas BD han sido estudiados con gran interés durante los últimos 20 años por que las propiedades físicas mencionadas de estos materiales pueden ser utilizadas en la construcción de nuevos dispositivos semiconductores como: Pilas Solares, Microcircuitos integrados, Diodos Láser, Dispositivos Optoelectrónicos, etc.

Bastard² realizó el primer estudio teórico del espectro energético de impurezas donadoras hidrogenoides neutras (D^0) poco profundas en estructuras de pozo cuántico (QW) de $GaAs - GaAlAs$ en la aproximación de masa efectiva, considerando un modelo de potencial de confinamiento con una altura de barrera infinita y utilizando una función de prueba sencilla que incluía un orbital de Slater multiplicado por una función que tiene en cuenta la simetría del sistema. Bastard analizó la dependencia de la energía de enlace con el ancho del pozo y la posición de la impureza en la heteroestructura. Posteriormente Montes y coinvestigadores extendieron el método para calcular la energía de enlace del estado fundamental y la densidad de estados de una D^0 en una caja y un hilo cuántico (QWW) respectivamente³⁻⁴. Se ha encontrado que el campo eléctrico afecta la energía de enlace de la donadora⁵ y además rompe la simetría axial del estado fundamental para la D^0 centrada⁶. Duque et al⁷ extendieron el modelo de Bastard para calcular la energía de enlace de las impurezas en $QWWs$ cilíndricos, bajo la acción de un campo eléctrico aplicado axialmente. Betancur and Mikhailov⁸ utilizaron una función de prueba triparamétrica para estudiar el estado fundamental $1s$ y el primer estado excitado $2p$ de una D^0 descentrada en un QW , para campos magnéticos diferentes. Posteriormente el método ha sido extendido para calcular la

energía del estado fundamental de impurezas D^0 en estructuras de dos⁹ y tres pozos¹⁰ cuánticos acoplados, y el efecto de los campos eléctricos y magnéticos sobre este estado¹¹.

Empleando una aproximación variacional - perturbativa Han y Hsieh¹² calcularon la energía de enlace de una D^0 en un QW como función del campo eléctrico aplicado y la altura de la barrera de potencial. En el marco de este mismo método Nicolescu¹³ encontró que cuando se aplica a una heterojuntura un campo magnético en dirección axial y un campo eléctrico en dirección variable los estados de electrones y huecos dependen sensiblemente de las dimensiones de la heteroestructura y de la dirección relativa del campo eléctrico al campo magnético. Mailhiot, Chang and McGill¹⁴ estudiaron el espectro de energía de las impurezas D^0 en QWs de $(Ga,Al)As$ considerando la impureza descentrada y diferentes dimensiones del QW . Ranganathan et al¹⁵ encontraron evidencia experimental sobre la importancia de la mezcla de subbandas en el cálculo de la energía de enlace de las D^0 en sistemas de $(DQWs)$ y SL , para incluir este efecto se han considerado funciones de prueba con orbitales tipo Gaussiano y funciones de onda de paridad par e impar con parámetros de expansión determinados variacionalmente a fin de tener en cuenta la mezcla de las subbandas $1s$ y $2p$ sobre la energía de las D^0 en las heteroestructuras¹⁶⁻¹⁷⁻¹⁸⁻¹⁹⁻²⁰. Oliveira y coinvestigadores²¹ utilizaron un procedimiento Variacional para estudiar impurezas relacionadas con el espectro de absorción óptica para pozos cuánticos de $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$ bajo la acción de campos eléctricos aplicados axialmente. Yip and Kok²², utilizando una aproximación Variacional - Perturbativa calcularon la energía de enlace para algunos estados de donadoras en un pozo cuántico. Mikhailov et al²³ redujeron el problema de las D^0 y D^- centradas y descentradas en heteroestructuras semiconductoras a un problema Variacional utilizando el Método de Dimensión Fractal.

En este trabajo se utiliza el Método de Dimensión Fractal MDF para calcular la energía de enlace del estado fundamental $1s$ de una impureza D^0 centrada y descentra en estructuras de QW y doble pozo cuántico acoplado ($CDQW$ "coupled double quantum well") formadas por capas consecutivas de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, considerando potenciales de confinamiento rectangulares y suaves. En estos últimos se considera una variación gradual de la concentración de aluminio Al . Realmente el modelo en el que se considera potencial rectangular con variación abrupta de la concentración de Al (que se utiliza en la mayoría de los trabajos mencionados anteriormente) en las interfaces es una aproximación en la que no se tiene en cuenta la región amorfa que existe por la variación paulatina de la concentración

de aluminio. El método numérico que se utiliza en este trabajo permite resolver de la misma manera el problema tanto para confinamiento con potencial rectangular como para potenciales que varían gradualmente, y, analizar la dependencia de la energía de enlace en función de la intensidad del campo eléctrico aplicado en la dirección axial, las dimensiones de la heteroestructura y la posición de la D^0 tanto en el interior del pozo como en la barrera.

1. HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

La tecnología de fabricación de los sistemas cuánticos bidimensionales (*QW*, *DQW*, *SL*) es relativamente fácil y por eso estas estructuras sirven como base para construir la mayoría de los sistemas de baja dimensionalidad. Estas heteroestructuras tienen capas de dos o varios tipos de materiales semiconductores con diferentes brechas entre las bandas de valencia y de conducción que se superponen una sobre otra. Debido a la diferencia de las brechas de energía, los portadores de carga en estas estructuras quedan confinados en la dirección perpendicular a las capas y sus movimientos pueden considerarse como casi-bidimensionales y por eso las propiedades electrónicas de estos sistemas son muy diferentes de los semiconductores en bloque.

En todos los sistemas semiconductores en bloque los portadores de carga se mueven en presencia de tres campos: el potencial periódico producido por los átomos en el cristal, los campos externos aplicados y el potencial de interacción electrón – electrón¹. Para los electrones que están ubicados cerca del piso de la banda de conducción, o cerca del techo de la banda de valencia se puede utilizar la aproximación de masa efectiva, la cual permite reducir el problema original de un electrón sumergido en el campo eléctrico del potencial atómico, al problema de un electrón libre con una masa ‘renormalizada’ (que se llama masa efectiva, y para *GaAs* es igual a $m^* = 0.067m_0$, donde m_0 es la masa del electrón libre).

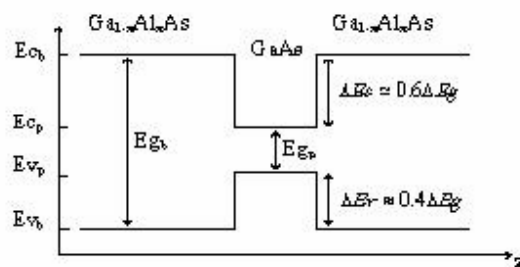
Un material semiconductor se puede dopar con átomos de impureza de tal manera que la corriente de conducción se deba predominantemente a electrones o huecos, como sucede en el caso de las impurezas donadoras D^0 o aceptadoras A^0 respectivamente. Las impurezas D^0 son átomos que tienen valencia química mas alta que el átomo sustituido, por lo tanto, uno de los electrones de la D^0 excesivo que no participa en la formación del enlace químico queda casi libre, ligado con la impureza mediante una fuerza electrostática muy débil producida por el potencial coulombiano $e/\epsilon r$ del ión impureza, siendo ($\epsilon = 12.8$ para $300^\circ K$) la constante dieléctrica del medio. El factor $1/\epsilon$ tiene en cuenta la reducción de la fuerza coulombiana entre las cargas debido al apantallamiento. Esta consideración es válida sólo para órbitas grandes en comparación con la distancia interatómica. En nuestro caso para el *GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs* la constante de la red ($a = 5.65 \text{ \AA}$ a $T = 298^\circ K$) es casi la misma en ambos materiales y es mucho más

pequeña en comparación con el radio de Bóhr efectivo ($a_0^* \cong 100 \text{ \AA}$). Las energías de ionización de las D^0 y A^0 ($\sim 5 - 10 \text{ meV}$) son menores que kT a temperatura ambiente (0.026 eV) y por eso se puede esperar que la ionización térmica de los átomos de impurezas D^0 y A^0 juegue un papel importante en la conductividad eléctrica del $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ a temperatura ambiente. Cuando se dopa la muestra de $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ con una impureza D^0 , se sustituye un átomo de Ga por un átomo del grupo IV (Si, Ge), de esta forma se crean estados permitidos cerca del piso de la banda de conducción. Estas donadoras se llaman poco profundas porque la energía de ionización del electrón ($E_g = 5.83 \text{ meV}$) es mucho menor que la brecha de energía del $GaAs$ ($E_g = 1521 \text{ meV}$ para $T = 294^\circ K$).

1.1. POZO CUANTICO DE $GaAs/(Ga,Al)As$

Una heteroestructura de pozo cuántico consiste en una capa de un material semiconductor $GaAs$ entre dos capas de otro material semiconductor, por ejemplo, $Ga_{1-x}Al_xAs$ con una brecha entre las bandas de valencia y de conducción mayor. Por esta razón el movimiento de los portadores estará restringido en la dirección perpendicular a las capas del material. Una capa de $Ga_{1-x}Al_xAs$ consiste en un arreglo periódico de átomos de arsénico junto con una fracción x de concentración de Al y $1-x$ de Ga . Los casos especiales de $x = 0$ y $x = 1$ corresponden a semiconductores cristalinos $GaAs$ y $AlAs$. En la Figura 1 se muestra el diagrama energético de la heteroestructura de $GaAs - Ga_{1-x}Al_xAs$.

Fig. 1. Diagrama energético de un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$



En la figura anterior E_{g_b} y E_{g_p} representan las brechas de energía para la barrera ($Ga_{1-x}Al_xAs$) y para el pozo ($GaAs$) respectivamente, el eje ' z ' corresponde a la dirección de crecimiento de la heteroestructura, E_{c_b} y E_{c_p} son las energías que corresponden a los pisos de la banda de

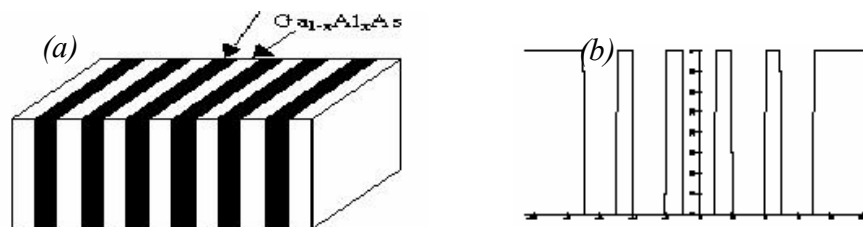
conducción de cada material, a su vez, E_{v_b} y E_{v_p} representan los techos de las bandas de valencia respectivas. Se ve de la figura que debido a la discontinuidad de la banda de conducción denotada como ΔE_c , se origina un pozo cuántico con barrera de potencial V_0 que depende de la concentración de Al . El valor utilizado en los trabajos experimentales para la altura de la barrera $V_0 = 0.60\Delta E_g$ y $V_0 = 0.40\Delta E_g$ para la banda de valencia²⁴, donde ΔE_g es la diferencia entre las brechas de energía de los dos semiconductores $\Delta E_g = E_{g_b} - E_{g_p}$ y depende de la concentración x de Al . Para su medición se utiliza la siguiente relación empírica:

$$\Delta E_g = 1.155x + 0.37x^2 \text{ [eV]}.$$

1.2. DOBLE POZO CUANTICO DE $GaAs/(Ga,Al)As$

Las superredes semiconductoras son sistemas compuestos por varias capas alternadas de dos materiales semiconductores diferentes. En estas estructuras la variación en la composición de los materiales produce a lo largo de la dirección de crecimiento del cristal unas discontinuidades periódicas en el piso de la banda de conducción. Las superredes que se han estudiado mas extensivamente son las que consisten de capas alternadas de $GaAs$ y $Ga_{1-x}Al_xAs$, donde las capas de $GaAs$ forman pozos cuánticos y las capas de $Ga_{1-x}Al_xAs$ forman barreras de potencial²⁵. En la figura 2a se muestra la composición de la superred por capas ultradelgadas de dos materiales semiconductores y en la figura 2b se grafica el perfil del potencial periódico que resulta por la diferencia entre las brechas de energía de $GaAs$ y $Ga_{1-x}Al_xAs$.

Fig. 2. (a) Estructura de capas de una superred. (b) Potencial de una superred



1.3. MODELACION DEL POTENCIAL

El potencial de confinamiento de las heteroestructuras que se estudian en este trabajo se puede modelar considerando un confinamiento con altura de barrera finita en la dirección axial, además de considerar que la región de transición entre el *GaAs* y el *Ga_{1-x}Al_xAs* es suave (debido a que la concentración de *Al* no varía bruscamente) utilizando la función de Heaviside modificada que tiene la forma que se muestra a continuación:

$$\theta(z-z_0, W) = \begin{cases} 0 & \text{si } z < z_0 - W \\ \left(\frac{(z-z_0)/W}{2} + 1 \right)^2 & \text{si } z_0 - W < z < z_0 \\ 1 & \text{si } z > z_0 \end{cases} \quad (1.1)$$

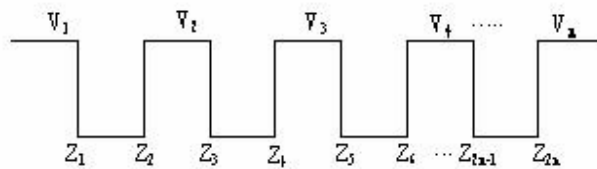
Esta expresión difiere de la función paso de Heaviside en que se ha introducido el parámetro adicional *W*, el cual controla la forma de la función paso y determina el ancho de la región de transición, donde, la concentración de aluminio '*x*' cambia suavemente. De esta manera, si *W* es cercano a cero (≈ 0.0001) la función θ tendrá la conocida forma rectangular. Si se aumenta el valor de *W* la función (1.1) tendrá una transición suave desde su valor mínimo hasta su valor máximo. Esta transición suave se utiliza para representar la variación gradual de la concentración de aluminio desde cero en el centro del pozo hasta un valor '*x*' en la barrera.

La formula que describe el potencial de confinamiento para *QW* y *DQW* se puede escribir como:

$$V(z) = V_1\theta(z_1-z, W) + \sum_{i=1}^{n-1} V_i [\theta(z-z_{2i}, W) - \theta(z-z_{2i+1}, W)] + V_n\theta(z-z_{2n}, W) \quad (1.2)$$

donde '*n*' es el número de pozos en la heterojuntura. En la figura 3 se gráfica el perfil del potencial que se describe en la ecuación (1.2).

Fig. 3. Perfil del potencial de confinamiento de una superred



Hay que tener en cuenta que la función escalón a la izquierda se da por la función $\theta(z_1-z, W)$. Además es evidente que la función $V_i [\theta(z-z_{2i}, W) - \theta(z-z_{2i+1}, W)]$

describe una barrera de altura V_i con saltos de potencial en los puntos z_{2i} y z_{2i+1} ; por esa razón una heteroestructura como la representada en la figura anterior se describe a través de la formula (1.2).

2. METODO DE DIMENSION FRACTAL PARA D^0 EN QW Y DQW

2.1 HAMILTONIANO ADIMENSIONAL DE UNA D^0 EN QW Y DQW EN PRESENCIA DE CAMPO ELECTRICO

El problema de una D^0 en QW o DQW con campo eléctrico aplicado en la dirección axial se describe por el siguiente Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{\xi}|}; \quad (2.1a)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\vec{P}^2}{2m^*} + V(z) + eFz; \quad (2.1b)$$

$$\hat{H}_0 f_0(z) = E_0 f_0(z) \quad (2.1c)$$

En (2.1a) el término H_0 representa el Hamiltoniano del electrón desacoplado, y el segundo término representa la interacción coulombiana entre el electrón y la donadora. En (2.1b) $V(z)$ es el potencial de confinamiento, ε ($\varepsilon = 12.8$ para $300^\circ K$) es la constante dieléctrica del material, F el campo eléctrico externo, ' e ' es la carga eléctrica del electrón y $\vec{\xi}$ el vector posición del ión, (2.1c) representa el problema de autovalores para el estado fundamental.

El problema de autovalores para la D^0 corresponde a

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}) \quad (2.2)$$

con el Hamiltoniano en (2.1), correspondiente al estado fundamental, se propone una función de prueba de la forma

$$\Psi(\vec{r}) = f_0(z) \Phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|) \quad (2.3)$$

donde, la función envolvente (o función de correlación) $\Phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|)$ describe la modificación de la distribución de probabilidad electrónica producida por la atracción de Coulomb, y, ésta depende solamente de la distancia electrón - ion $(|\vec{r} - \vec{\xi}|)$. Los vectores \vec{r} y $\vec{\xi}$ representan la posición del electrón y la donadora respectivamente, con la D^0 ubicada sobre el eje 'z'. El

primer factor en (2.3) es la función que se obtiene como solución para el problema del electrón desacoplado (2.1c).

Es conveniente, en adelante, utilizar las unidades adimensionales para disminuir el número de parámetros en el Hamiltoniano (2.1a), el cual en forma explícita se escribe como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) + eFz - \frac{e^2}{\varepsilon |\bar{\mathbf{r}} - \bar{\xi}|} \quad (2.4)$$

Con este fin utilizaremos como unidad de longitud el radio de Bóhr efectivo a_0^* , y, de energía el Rydberg efectivo R_y^* , definidos como:

$$a_0^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{m^* e^2} \approx 200 a_0 \approx 100 \text{ \AA}; R_y^* = \frac{e^2}{2 \varepsilon a_0^*} \approx 5.83 \text{ meV} \quad (2.5)$$

En estas unidades el Hamiltoniano (2.4) tiene la siguiente forma adimensional:

$$H = -\nabla^2 + V(z) + \alpha z - \frac{2}{|\bar{\mathbf{r}} - \bar{\xi}|}, \quad (2.6)$$

dónde

$$\alpha = \frac{eF a_0^*}{R_y^*} = \frac{eF * 10^{-6} \text{ cm}}{5.83 * 10^{-3} \text{ eV}} \cong 1.71 * 10^{-4} F \left[\frac{\text{cm}}{\text{V}} \right] \quad (2.7)$$

Teniendo en cuenta que el campo eléctrico F está dado en unidades de $[V/cm]$, α representa el coeficiente adimensional para medir la intensidad del campo eléctrico en la expresión (2.7).

2.2 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO PARA EL ELECTRÓN DESACOPLADO

El Hamiltoniano (2.1b) que describe el electrón no ligado, confinado en un potencial $V(z)$ con campo eléctrico aplicado axialmente en forma adimensional tiene la forma:

$$H_0 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(z) + \alpha z \quad (2.8)$$

La ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano (2.8) para el estado fundamental del electrón desacoplado es separable y se reduce a una ecuación de onda unidimensional.

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + \alpha z \right] f_0(z) = E_0 f_0(z) \quad (2.9)$$

donde $f_0(z)$ es la función de onda del electrón desacoplado en el QW con campo eléctrico aplicado.

La ecuación (2.9) no puede resolverse en forma exacta para potenciales de confinamiento no convencionales (potenciales suaves), y por eso utilizaremos un método numérico. En nuestros cálculos consideramos que el campo eléctrico está aplicado solo dentro de la región de la heterojuntura (los contactos de los electrodos están ubicados en las barreras y por eso el campo eléctrico no penetra en las barreras externas). Por lo anterior, el potencial en la región externa del pozo es constante $V(z)=V_0$ y en esta región la ecuación (2.9) tiene solución analítica:

$$f_0(z) = C_1 \exp\left(-z \sqrt{V_0 + \alpha \frac{L}{2} - E_0}\right); \quad z > \frac{L}{2} \quad (2.10a)$$

$$f_0(z) = C_1 \exp\left(z \sqrt{V_0 - \alpha \frac{L}{2} - E_0}\right); \quad z < -\frac{L}{2} \quad (2.10b)$$

Dentro de la heteroestructura, la ecuación (2.9) se resuelve numéricamente aplicando el método de barrido trigonométrico, el cual, por medio de la siguiente sustitución:

$$f_0(z) = A(z) \text{Cos} \theta(z); \quad f_0'(z) = A(z) \text{Sen} \theta(z). \quad (2.11)$$

permite reducir el problema de contorno para la ecuación (2.9) de segundo orden al siguiente problema de Cauchy de primer orden

$$\theta'(z) = -[\text{Sen}^2 \theta(z) + \alpha(z) \text{Cos}^2 \theta(z)]; \quad -\frac{L}{2} < z < \frac{L}{2}; \quad \theta\left(-\frac{L}{2}\right) = \text{Tan}^{-1}\left\{\sqrt{V_0 - \alpha \frac{L}{2} - E_0}\right\} \quad (2.12)$$

donde $\alpha(z) = (E_0 - \alpha z - V(z))$.

La condición inicial en la ecuación (2.12) se obtiene al cocer las soluciones en la frontera izquierda del QW . Al cocer la solución de (2.12) en la frontera derecha del pozo se obtiene la siguiente ecuación trascendente para el estado fundamental:

$$\theta\left(\frac{L}{2}\right) = -\text{Tan}^{-1}\left\{\sqrt{V_0 + \alpha \frac{L}{2} - E_0}\right\} \quad (2.13)$$

Un procedimiento estándar permite también encontrar la función $A(z)$:

$$A(z) = A(0) \exp\left\{\int_0^z \{(1 - \alpha(x)) \text{Sen} \theta(x) \text{Cos}(x)\} dx\right\} \quad (2.14)$$

El problema de Cauchy (2.12), se resuelve numéricamente utilizando el algoritmo de Runge -Kutta, y se encuentra el valor de la función en el punto $z = L/2$ para cada valor de energía. Posteriormente, entre todas las soluciones se escoge solo una cuya energía satisface la ecuación trascendente (2.13).

2.3 METODO DE DIMENSION FRACTAL PARA UNA D^0 CONFINADA

Para solucionar el problema de autovalores (2.2), se propone la función de onda para el estado fundamental de la D^0 de la forma (2.3).

Si ubicamos el origen de coordenadas sobre la posición de la impureza la función de prueba (2.3) queda de la siguiente manera:

$$\Psi(\vec{r}) = f_0(z + \xi) \Phi(|\vec{r}|) \quad (2.15)$$

Partiendo del principio variacional se deduce una ecuación diferencial para la función de correlación $\Phi(|\vec{r}|)$, según el principio variacional de Schrödinger el estado base de cualquier sistema cuántico debe corresponder al mínimo del siguiente funcional:

$$F[\Phi] = \langle \Psi | \hat{H} - E | \Psi \rangle = \langle f_0 \Phi | -\Delta + V(z) + \beta z - 2/r - E | f_0 \Phi \rangle \rightarrow \min \quad (2.16)$$

la ecuación (2.16) se puede escribir explícitamente como:

$$F[\Phi] = \int_0^\infty J(r) \left[(\nabla \Phi)^2 - \left(\frac{2}{r} + E - E_0 \right) \Phi^2 \right] dr \rightarrow \min; \quad \frac{\delta F[\Phi]}{\delta \Phi} = 0 \quad (2.17)$$

$$J(r) = 2\pi r \int_{-r}^r f_0^2(z + \xi) dz \quad (2.18)$$

donde $\frac{\delta}{\delta \Phi}$ denota la derivada funcional en (2.17) y $J(r)$ como se ve de la expresión (2.18),

esta relacionado con la distribución de probabilidad radial de carga (es la probabilidad de encontrar un electrón no ligado dentro de un cascarón esférico de radio r y $r + dr$).

Calculando la derivada funcional se puede obtener la ecuación de Euler – Lagrange para la función envolvente $\Phi(r)$ que minimiza el funcional (2.17).

$$\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} J(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} - \frac{2}{r} \Phi(r) = -E_b \Phi(r); \quad E_b = E_0 - E \quad (2.19)$$

La solución de la ecuación (2.19) define un valor aproximado de la energía de enlace de la donadora E_b , además, la función de onda no es exacta, pero es buena aproximación.

La ecuación (2.19) se puede escribir de la siguiente manera

$$-\Phi''(r) - W(r)\Phi'(r) + \alpha(r)\Phi(r) = 0; \quad W(r) = \frac{J'(r)}{J(r)}; \quad \alpha(r) = -\left(E_b - \frac{2}{r}\right); \quad 0 < r < \infty \quad (2.20)$$

El comportamiento del Jacobiano cuando $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$ es proporcional a r^2 y r respectivamente, según esto se obtienen las siguientes condiciones de contorno para el problema de segundo orden (2.20):

$$\Phi'(0)/\Phi(0) = -1; \quad \text{y} \quad \Phi(\infty) = 0$$

El problema de contorno (2.20) se reduce a un problema de Cauchy de primer orden

$$\theta'(r) = -[\text{Sen}^2\theta(r) + \alpha(r)\text{Cos}\theta(r) + W(r)\text{Sen}\theta(r)\text{Cos}\theta(r)]; \quad \theta(0) = -\frac{\pi}{4} \quad (2.21)$$

utilizando la sustitución:

$$\Phi(r) = A(r)\text{Cos}\theta(r) \quad \Phi'(r) = A(r)\text{Sen}\theta(r) \quad (2.22)$$

La solución de esta ecuación depende de la energía como parámetro, por tanto el problema de Cauchy será solucionado para cada valor de energía E ; utilizando la segunda condición de frontera se obtiene la ecuación trascendente para la energía.

$$\theta(R_{max}, E) = -\text{Tan}^{-1}\sqrt{E_b} \quad (2.23)$$

Con un procedimiento estándar se puede obtener la función $A(r)$ para solucionar la ecuación diferencial para la función de correlación $\Phi(r)$.

$$A(r) = A(0)\exp\left\{\int_0^z \left\{ (1 - \alpha(x))\text{Sen}\theta(x)\text{Cos}(x) - W(x)\text{Sen}^2\theta(x) \right\} dx\right\}.$$

El problema de Cauchy (2.21) se resuelve numéricamente utilizando el método de Runge-Kutta, y se encuentra el valor de la función en el R_{max} para cada valor de energía. Posteriormente entre todas las soluciones se escoge solo una cuya energía satisface la ecuación trascendente (2.23).

Vale la pena anotar que para solucionar el problema de la D^0 confinada en un QW y DQW bajo la acción del campo eléctrico dentro del formalismo del MDF , no se presentan cambios substanciales, mientras que la solución para el electrón desacoplado cambia sensiblemente cuando consideramos el campo eléctrico aplicado al sistema.

2.4 EXTENSION DEL METODO DE DIMENSION FRACTAL

Siguiendo el modelo de función de onda considerada por Bajaj²⁰, incluimos un factor adicional en la función de prueba considerada en nuestro modelo como se muestra a continuación:

$$\Psi(\vec{r}) = f_0(z)e^{-\alpha\rho^2} \Phi(|\vec{r} - \vec{r}_i|) \quad (2.24)$$

En la formula (2.24) se introdujo un parámetro variacional adicional α que describe el confinamiento transversal, utilizando el sistema de referencia con el origen ubicado en la posición de la impureza la función de onda (2.24) puede también ser escrita como:

$$\Psi(\vec{r}) = f_0(z + z_i) e^{-\alpha \rho^2} \Phi(|\vec{r}|) \quad (2.25)$$

En adelante extenderemos nuestro *MDF* considerando la función de prueba tipo (2.25) para una donadora localizada dentro de un *QW* y *DQW* en presencia de campo eléctrico orientado en dirección axial considerando α como un parámetro variacional que describe el confinamiento transversal en la heterojuntura. Partiendo del principio variacional deduciremos una ecuación diferencial para la función de correlación la cual para cada valor dado del parámetro variacional α describe el estado con la energía mínima $E(\alpha)$ y después analizando la dependencia de esta energía con el parámetro variacional se calculará la energía del estado base.

Con la función de prueba (2.25) que estamos considerando, la solución de la ecuación de Schrödinger para el electrón desacoplado es de la misma forma que la mostrada en la sección (2.2), mientras que para solucionar el problema electrón - donadora presenta algunos cambios en la forma del Jacobiano y el potencial efectivo en la ecuación de Euler -Lagrange como se muestra a continuación:

Utilizando el principio variacional de Schrödinger, y la función de prueba (2.26), el estado base de nuestro sistema corresponde al mínimo del siguiente funcional:

$$F[\Phi] = \left\langle f_0 e^{-\alpha \rho^2} \Phi \left| -\Delta + V - \frac{2}{r} - E \right| f_0 e^{-\alpha \rho^2} \Phi \right\rangle \quad (2.26)$$

La ecuación (2.26) se puede escribir explícitamente como:

$$F[\Phi] = \int_0^\infty \left\{ J(r) \left[\left(\frac{d\Phi}{dr} \right)^2 + \left(-\frac{2}{r} - E + E_0 + 4\alpha \right) \Phi^2 \right] + U(r) \Phi^2 \right\} dr \quad (2.27)$$

donde

$$J(r) = r^2 P(r); \quad P(r) = \frac{2\pi}{r} \int_{-r}^r e^{-2\alpha(r^2 - z^2)} f_0^2(z + z_i) dz; \quad (2.28)$$

$$U(r) = r^2 \tilde{E}(r); \quad \tilde{E}(r) = \frac{2\pi}{r} (-4\alpha^2) \int_{-r}^r e^{-2\alpha(r^2 - z^2)} (r^2 - z^2) f_0^2(z + z_i) dz;$$

La ecuación de Euler-Lagrange para la función de correlación que minimiza el funcional (2.27) tiene la forma:

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} J(r) \frac{d\Phi(r)}{dr} + V_{eff}(r) \Phi(r) = (E - E_0 - 4\alpha) E \Phi(r); \quad V_{eff}(r) = -\frac{2}{r} + \frac{\tilde{E}(r)}{P(r)} \quad (2.29)$$

La ecuación (2.31) se puede escribir de la siguiente forma:

$$\Phi'(r) + w(r)\Phi'(r) + \alpha(r)\Phi(r) = 0; \quad w(r) = 2/r + P'(r)/P(r); \quad \alpha(r) = E - E_0 - 4\alpha + 2/r - \tilde{E}(r)/P(r) \quad (2.30)$$

Como $P'(r)/P(r) \rightarrow 0$ para $r \rightarrow 0$ y $\Phi(\infty) \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$ se obtienen las dos siguientes condiciones de frontera:

$$\frac{\Phi'(0)}{\Phi(0)} = -1; \quad \Phi(\infty) = 0 \quad (2.31)$$

El problema de contorno (2.30) -(2.31) se reduce al siguiente problema de Cauchy de primer orden utilizando la sustitución (2.22):

$$\theta' + \text{sen}^2 \theta + \alpha \cos^2 \theta + w \text{sen} \theta \cos \theta = 0; \quad \theta(0) = a \tan(-1) = -\pi/4.$$

La solución de esta ecuación depende de la energía como parámetro $\theta = \theta(r, E)$. La ecuación trascendente para la energía E se obtiene de la segunda condición de contorno en (2.31):

$$\theta(R_{max}, E) = -\pi/2$$

Un procedimiento estándar permite también encontrar la función $A(r)$

$$A(r) = A(0) \exp \left[\int_0^r \left\{ [1 - \alpha(x)] \text{sen} \theta(x) \cos \theta(x) - w(x) \text{sen}^2 \theta(x) \right\} dx \right]$$

Para el procedimiento numérico es importante un cálculo preciso de la derivada de función $P(r)$. La expresión explícita de esta derivada es:

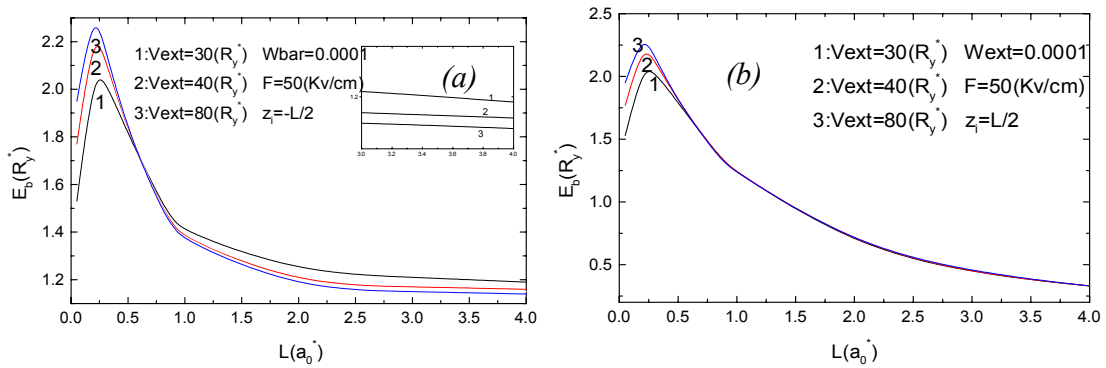
$$P'(r)/P(r) = -\frac{1}{r} - 4\alpha r + \frac{2\pi \left[f_0^2(z_0 + r) + f_0^2(z_0 - r) \right]}{rP(r)} \quad (2.32)$$

3. RESULTADOS DE CÁLCULO Y DISCUSION

3.1 EFECTO STARK PARA D^0 EN QW

En la *Fig. 4* se presentan los resultados del cálculo de la energía de enlace como función del ancho del pozo para el estado base de una donadora neutra localizada en los bordes izquierdo (*a*) y derecho (*b*) del pozo cuántico de forma rectangular con las alturas de la barrera de 30, 40 y 80 R_y^* , en presencia de campo eléctrico $F = 50(KV/cm)$. Claramente se ve, que para pequeños anchos de *QW* ($L \leq 1a_0^*$) cuando el efecto del campo eléctrico es débil, la energía de enlace es mas grande a medida que aumenta la altura de la barrera. En la figura se observa que cuando el *QW* se hace más estrecho, la energía de enlace aumenta hasta alcanzar un valor máximo y posteriormente empieza a caer bruscamente, esto se debe al desbordamiento de la función de onda del electrón en el volumen del material semiconductor y el correspondiente aumento de la separación electrón-ión. Para interpretar el orden de las tres curvas en esta parte, hay que tener en cuenta que al confinar la donadora en el *QW*, el desbordamiento sucede con mayor rapidez para la altura de barrera más pequeña, por eso, como se ve en la gráfica los picos mas altos corresponden a los *QWs* con mayor altura de barrera.

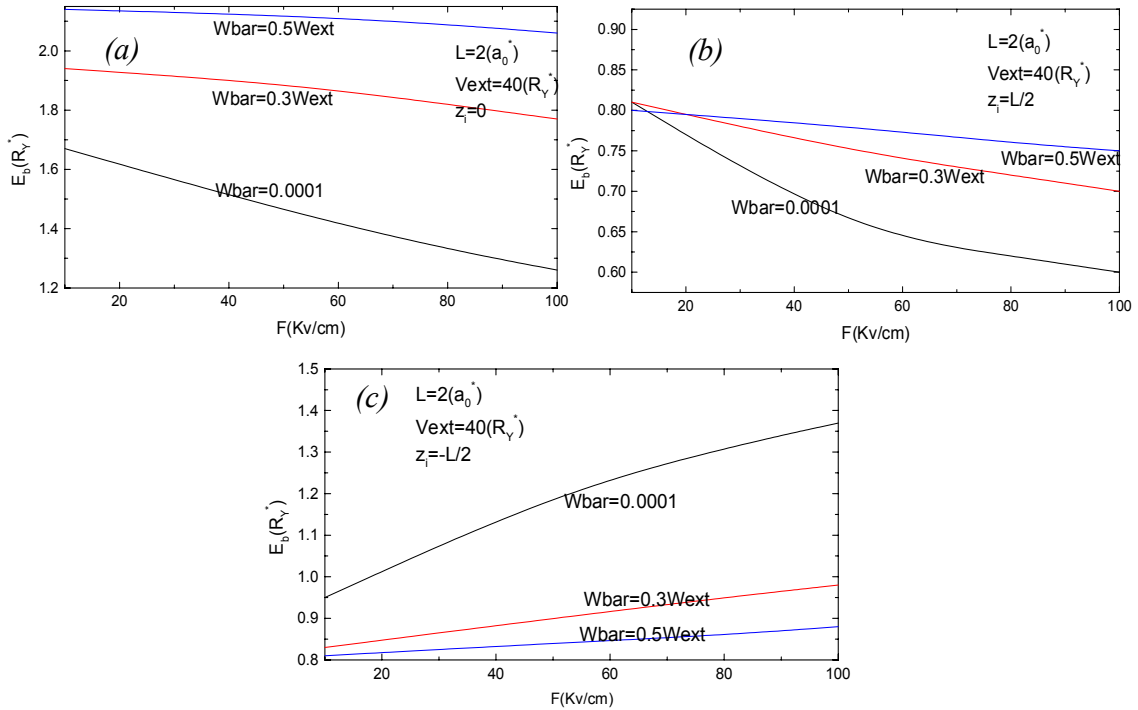
Fig 4. Energía de enlace como función del ancho del pozo para la D^0 en el borde del pozo, a la izquierda, y la derecha en las figuras (a) y (b) respectivamente, considerando tres alturas de la barrera de potencial con un campo eléctrico aplicado de $F = 50(Kv/cm)$.



Comparando las curvas en las Figuras 4a y 4b en la región de grandes anchos del pozo ($L > 1a_0^*$), se ve que el efecto del campo eléctrico es notable para la impureza ubicada en el borde izquierdo Fig. 4a, y que casi no se observa para la impureza localizada en el pozo de la derecha Fig. 4b. En el primer caso, el efecto de campo eléctrico es mas perceptible a medida que la altura de la barrera de potencial es menor, por eso para $L > 1a_0^*$ se observa la inversión de los niveles energéticos, y, la energía de enlace es mayor cuando $V_{ext} = 30R_y^*$ mientras que cuando $L \leq 1a_0^*$ para esta altura de barrera la energía es menor. Esto sucede por que la fuerza repulsiva de la barrera de potencial es proporcional a la altura de la misma, y, por esta razón para la D^0 sobre el borde izquierdo del pozo $z_i = -L/2$ la energía de enlace disminuirá en mayor medida para $V_{ext} = 80R_y^*$ por que la fuerza repulsiva es mayor y está dirigida en dirección contraria a la fuerza eléctrica.

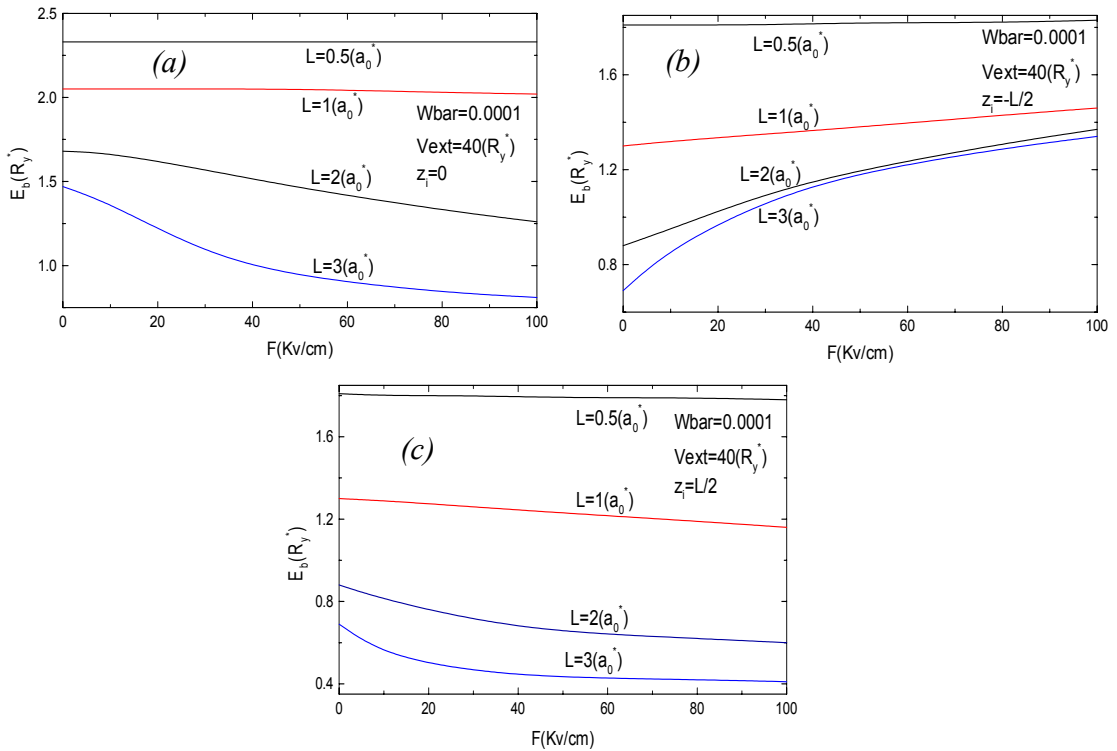
En la Figura 5 se presentan los resultados del cálculo de la energía de enlace de impurezas donadoras localizadas en tres diferentes posiciones, en el centro del pozo (a), en el borde derecho (b), y en el borde izquierdo (c) en función de la intensidad de campo eléctrico.

Fig. 5. Energía de enlace de una impureza hidrogenoide en QW con tres diferentes formas de potencial de confinamiento como función del campo eléctrico aplicado para la donadora centrada $z_i = 0$ y sobre el borde $z_i = \pm L/2$.



Las curvas presentadas corresponden al ancho del pozo $L=2a_0^*$, altura de la barrera $V_{ext}=40R_y^*$ y a tres diferentes formas del potencial de confinamiento, rectangular ($W_{bar}=0.0001$), suave ($W_{bar}=0.3$), y con el piso del pozo casi-parabólico ($W_{bar}=0.5$). Se ve que bajo la influencia del campo eléctrico la energía de enlace de la donadora centrada *Figura 5a* y en el borde derecho *Figura 5b* disminuye, mientras que para la impureza en el extremo izquierdo del pozo *Figura 5c* la energía de enlace aumenta. Esto se debe a que en el caso de la impureza centrada, se rompe la simetría del sistema disminuyendo la energía de enlace, pero, si la impureza está en el borde izquierdo, el campo eléctrico hace que el electrón se acerque a la impureza y para la impureza localizada en el borde derecho al contrario. Adicionalmente se puede notar que el efecto del campo eléctrico sobre la energía de enlace es menor a medida que se suaviza el potencial de confinamiento, por que el confinamiento del electrón es mayor para potenciales suaves, y por tanto, el electrón se encontrará mas localizado cerca de la impureza imposibilitando de esta forma la movilidad del electrón bajo influencia de campo eléctrico.

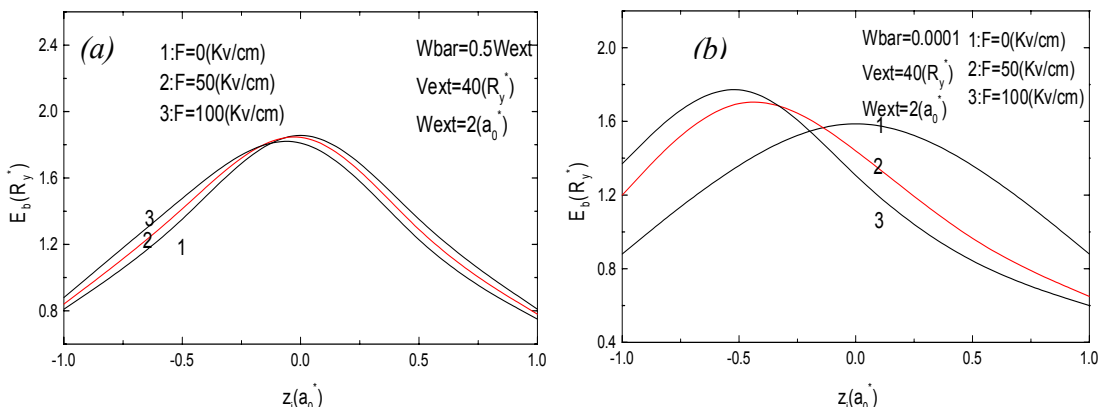
Fig. 6. Energía de enlace como función del campo eléctrico aplicado para diferentes anchos del pozo y posiciones de la impureza con potencial de confinamiento rectangular ($W_{bar} = 0.0001$) y con $V_{ext} = 40R_y^*$.



En la *Figura 6(a,b,c)* se presentan curvas similares a las de la *Figura 5*, pero en este caso, para diferentes anchos del *QW* con potencial rectangular ($W_{bar}=0.0001$). Se puede ver que para pozos cuánticos estrechos $L \leq 1a_0^*$, el efecto del campo eléctrico sobre la energía de enlace de la impureza es muy pequeño, debido al fuerte confinamiento de la función de onda que no permite al electrón ser afectado por el campo eléctrico. Al contrario, cuando ancho del pozo es grande $L > 1a_0^*$ la energía de enlace se hace sensible al campo eléctrico disminuyendo con el crecimiento de la intensidad del campo para la D^0 centrada y en el borde $z_i = L/2$ y al revés, aumentando para la impureza al borde $z_i = -L/2$. En este último caso la fuerza del campo eléctrico tiende a empujar el electrón hacia la posición de la D^0 aumentando de esta manera la energía de enlace. Hay que anotar que las curvas, para esta posición de la impureza, no tienden a un valor de saturación como sucede en el caso del potencial de confinamiento con altura de barrera infinita¹². Esta diferencia en el comportamiento de las curvas en los dos casos se debe al hecho de que la barrera de una altura finita ejerce una fuerza repulsiva insuficiente para balancear la fuerza eléctrica y por tanto el efecto de penetración del electrón en la barrera en este caso juega un papel importante cuando la D^0 está localizada en la posición $z_i = -L/2$.

En la *Figura 7* se presenta el cálculo de la energía de enlace en función de la posición de la impureza para diferentes intensidades de campo eléctrico y dos diferentes formas de potencial de confinamiento, parabólico ($W_{bar}=0.5$) en la *Figura 7a* y con el piso del pozo rectangular ($W_{bar}=0.0001$) en la *Figura 7b*.

Fig. 7. Energía de enlace como función de la posición de la D^0 a lo largo de la dirección de confinamiento para tres campos eléctricos diferentes y considerando un potencial de confinamiento parabólico fig. (a) y rectangular fig. (b).

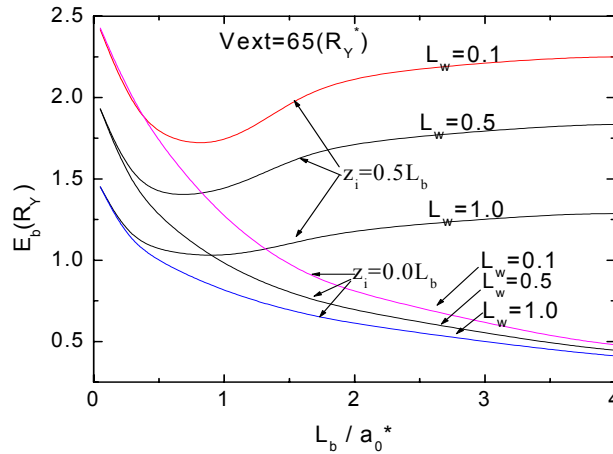


Como se ve de la figura, todas las curvas tienen un máximo cuya posición coincide con el punto dentro del QW donde la densidad de carga es mayor. En ausencia del campo eléctrico, el máximo de la densidad está en el centro del pozo, y a esta posición de la impureza corresponde la mayor energía de enlace. Este máximo se desplaza hacia la izquierda cuando se aplica el campo eléctrico en la dirección axial y esto produce la modificación de las curvas presentadas en la *Figura 7*. Este efecto es más notable para potencial rectangular que para un potencial suave.

3.2 EFECTO STARK PARA D^0 EN DQW

Un análisis similar se ha realizado para la energía de enlace de una D^0 localizada dentro de un doble pozo de $GaAs / Ga_{1-x}Al_xAs$ cuyos parámetros geométricos están dados por el ancho de los pozos L_w y el ancho L_b de la barrera que separa estos dos pozos. En la *Figura 8* se muestra la energía de enlace en función del ancho de la barrera interna L_b , para diferentes anchos del pozo L_w , y dos posiciones de la impureza.

Fig. 8 Energía de enlace de una D^0 en función del ancho de la barrera L_b para diferentes anchos del pozo L_w y diferentes posiciones de la impureza.

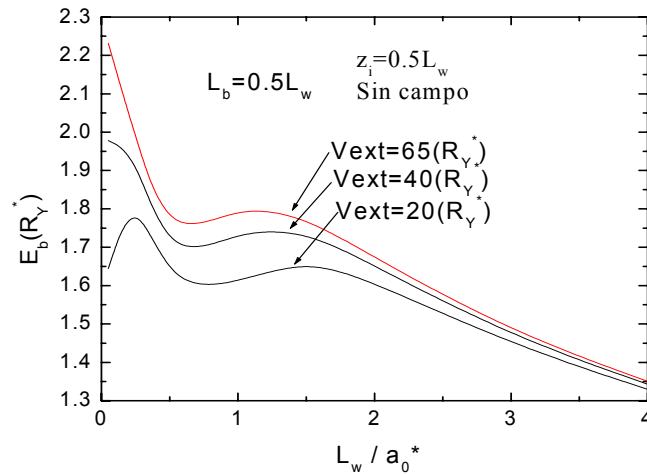


Estas dos posiciones corresponden, una, al centro de la barrera interna $z_i = 0$ y otra al borde de esta barrera $z_i = 0.5L_b$. Como se ve de la *Figura 8*, para la D^0 en el centro de la barrera la energía de enlace decrece monótonamente. Esto se debe a que a medida que aumenta el ancho de la barrera también aumenta la distancia promedio electrón-ión, disminuyendo la interacción coulombiana y la energía de enlace. Cuando la D^0 se encuentra

sobre el borde de la barrera, la energía de enlace muestra un mínimo. Esto se atribuye a que cuando el ancho de la barrera aumenta desde cero inicialmente, el tunelamiento hacia la región izquierda es grande, y, la distancia electrón-ión aumenta, por eso, E_b disminuye. Posteriormente para mayores anchos de la barrera E_b , el tunelamiento hacia la izquierda disminuye, y por tanto el electrón se localiza en la vecindad de la D^0 , y la energía de enlace empieza a crecer.

En la *Figura 9* se muestra la energía de enlace como función del ancho del pozo y el ancho de la barrera igual a la mitad del ancho del QW , considerando la altura del potencial de confinamiento como parámetro, en este caso la donadora se encuentra en el centro del pozo de la derecha.

Fig. 9. Energía de enlace como función del ancho del pozo ($L_b = 0.5L_w$) con la altura de la barrera como parámetro.



En la *Figura 9* se observa que la energía de enlace aumenta cuando el ancho del pozo disminuye, esto sucede porque para esos anchos el tunelamiento de la función de onda a través de la barrera es pequeño, y entonces el electrón se localiza cerca de la donadora.

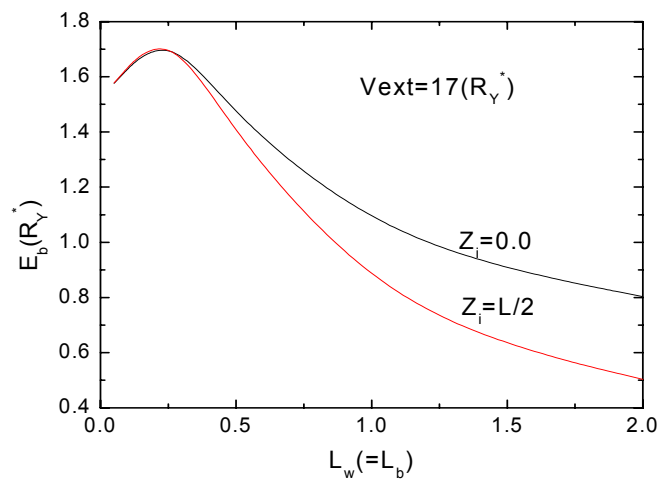
Teniendo en cuenta que el ancho de la barrera es la mitad del ancho del pozo, podemos atribuir al tunelamiento de la función de onda hacia el pozo de la izquierda el posterior decrecimiento en la energía de enlace E_b . Para pozos más estrechos el confinamiento aumenta, y por tanto la energía de enlace crece nuevamente. El último máximo que se observa en la energía de enlace corresponde al desbordamiento de la función de onda, que se espera dentro de nuestro modelo de confinamiento con altura de barrera finita.

En la figura se ve que a mayor altura de la barrera, la energía de enlace aumenta, esto sucede porque la repulsión del electrón por las paredes del potencial de confinamiento aumenta, debido a esto el electrón se localiza en la vecindad de la D^0 aumentando de esta manera energía de enlace.

Lo expuesto en el párrafo anterior justifica el desplazamiento hacia la izquierda de los puntos críticos en la curva de energía de enlace en la medida que aumenta la altura de la barrera.

En la *Figura 10* se muestra la energía de enlace E_b como función del ancho del pozo L_w , cuando el ancho del pozo y de la barrera son iguales para una altura de barrera de $17R_y^*$ y con la impureza en el centro y en el borde de la barrera.

Fig. 10. Energía de enlace como función del ancho del pozo cuando los anchos del pozo y de la barrera son iguales para dos posiciones de la D^0 centrada y descentrada en la barrera



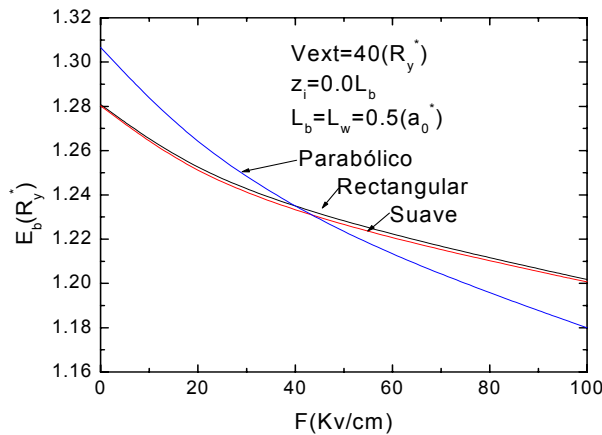
La energía de enlace E_b se comporta de la misma forma para la D^0 en el centro y en el borde de la barrera, en ambos casos decrece monótonamente, esto se atribuye a que para anchos de pozo grande la función de onda se extiende más en el interior del pozo, disminuyendo de esta manera la interacción electrón-ión y por tanto la energía de enlace E_b .

En la *Figura 10* se aprecia que la energía de enlace para la D^0 en el centro de la barrera disminuye más rápido que para la D^0 sobre el borde de la barrera, esto sucede porque en el primer caso la probabilidad de encontrar el electrón cerca de la donadora es menor debido a la repulsión de la barrera central. Para anchos del QW más pequeños la energía de enlace de la D^0 en el centro y en el borde de la barrera coinciden, esto corresponde a que la función de onda en este caso está distribuida en toda la heteroestructura del DQW y por tanto

la probabilidad de encontrar el electrón en la vecindad de la donadora no depende de la posición de la donadora en la heteroestructura.

En la *Figura 11* se muestran los resultados para la energía de enlace en función de la intensidad del campo eléctrico considerando la donadora centrada en la barrera, y, altura de barrera de $40R_y^*$, con el ancho del pozo igual al ancho de la barrera ($0.5 a_0^*$) y tres perfiles del potencial de confinamiento.

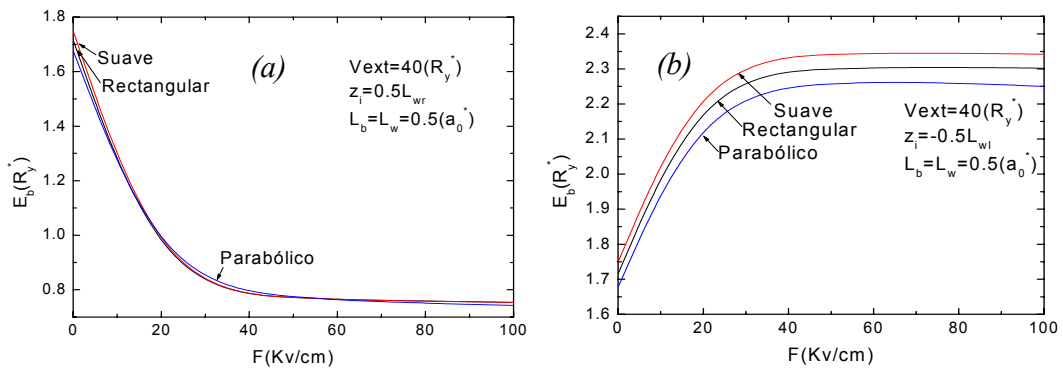
Fig. 11. Energía de enlace como función de la intensidad del campo eléctrico para la donadora centrada y el ancho del pozo igual al ancho de la barrera considerando el suavizado del potencial como parámetro.



Se ve de la *Figura 11* que la energía de enlace decrece monótonamente debido al desplazamiento de la distribución de probabilidad por efecto del campo eléctrico (como se muestra en la *Figura 14*). Para los potenciales de confinamiento rectangular y suave la energía de enlace E_b , se comporta de la misma manera, sin embargo la energía para el potencial de confinamiento suave es ligeramente menor que en el caso rectangular, esto sucede por que la separación electrón - D^0 en el caso de confinamiento suave es mayor (porque la función de onda está más localizada, *Figuras 14a* y *14b*) y por tanto la energía de enlace E_b disminuye. Cuando el potencial de confinamiento es parabólico, la energía de enlace decrece monótonamente como en el caso de los otros dos potenciales pero la energía es inicialmente mayor por que el tunelamiento de la función de onda es mas fuerte (*Figura 13c* y *14c*), y por tanto la probabilidad de encontrar el electrón en la región central del *DQW* será más alta. En este caso, la energía de enlace E_b decrece con más rapidez debido a lo mencionado anteriormente.

En la *Figura 12* se muestran cálculos similares al anterior, pero en este caso, la donadora está localizada en el centro del pozo de la derecha y de la izquierda como se muestra en las *Figuras 12(a)* y *12(b)* respectivamente.

Fig. 12. Energía de enlace como función del campo eléctrico con diferentes perfiles del potencial de confinamiento para la donadora centrada en el pozo de la derecha y de la izquierda.



Cuando la donadora se encuentra en el centro del pozo de la derecha *Figura 12a*, la energía de enlace se comporta de la misma forma para los tres potenciales de confinamiento, el decrecimiento monótono de la energía se atribuye al desplazamiento de la probabilidad electrónica hacia el pozo de la izquierda por efecto del campo eléctrico *Figura 14*. Se puede ver que sin campo eléctrico la menor energía de enlace corresponde al perfil de confinamiento parabólico, esto se atribuye a que en este caso el tunelamiento de la función de onda en la región de la barrera es mayor que en los otros dos casos (*Figura 13c* y *14c*). En la *Figura 12b* se muestra la energía de enlace para la donadora en el centro del pozo de la izquierda, en este caso la energía aumenta hasta tomar un valor constante, el aumento en la energía se da porque la función de onda electrónica tiende a localizarse en la vecindad de la donadora por efecto del campo eléctrico. El valor de saturación que toma la energía de enlace se da porque el campo eléctrico provoca el desbordamiento de la función de onda (*Figura 14(a,b* y *c*)) en el volumen del material semiconductor, produciendo de este modo el mismo valor de la energía de enlace para campos eléctricos desde aproximadamente 40kv/cm .

En las *Figuras 13* y *14* se muestra el comportamiento de la función de onda del electrón desacoplado con y sin campo eléctrico aplicado a la heteroestructura como se ve en las *Figuras 14* y *13* respectivamente para tres perfiles del potencial de confinamiento: rectangular *13a* y *14a*, suave *13b* y *14b*, y parabólico *13c* y *14c*.

Fig. 13. Función de onda para el electrón desacoplado para potenciales de confinamiento rectangular, suave y parabólico sin campo eléctrico aplicado.

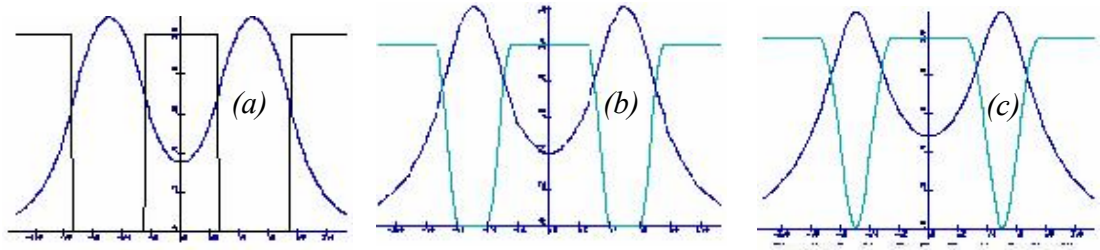
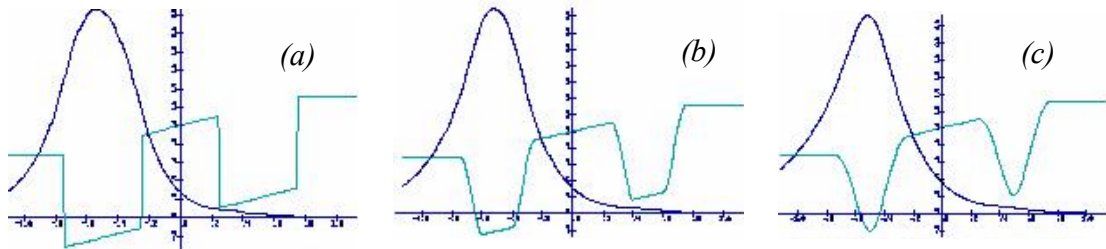


Fig. 14. Función de onda para el electrón desacoplado para potencial de confinamiento rectangular, suave y parabólico con un campo eléctrico de 100(Kv/cm).

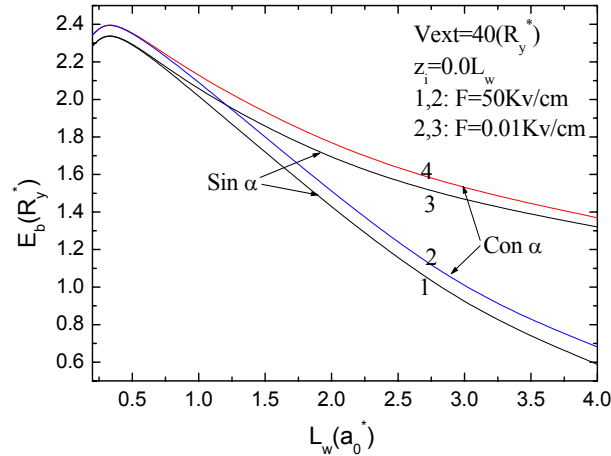


3.3 APLICACIÓN DEL *MDF* EXTENDIDO PARA *QW* Y *DQW*

A continuación se muestran los resultados obtenidos para el cálculo de la energía de enlace de una D^0 en un *QW* y *DQW* aplicando el Método de Dimensión Fractal Extendido *MDFE* en el que se considera una función de prueba que tiene en cuenta el posible confinamiento de la función de onda electrónica en la sección perpendicular a la dirección de crecimiento de la heterojuntura.

En la *Figura 15* se muestran la energía de enlace E_b de una D^0 en un *QW* como función del ancho del pozo para una concentración de *Al* del 30% ($GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$), es decir una altura de barrera de $40R_y^*$, con la donadora centrada en el *QW* y considerando la situación con y sin campo eléctrico aplicado, es decir ($F = 50Kv/cm$) y ($F = 0.01Kv/cm$) para potencial de confinamiento rectangular. Las curvas en las que se señala la inclusión del parámetro variacional α son las correspondientes a los resultados con el *MDFE*.

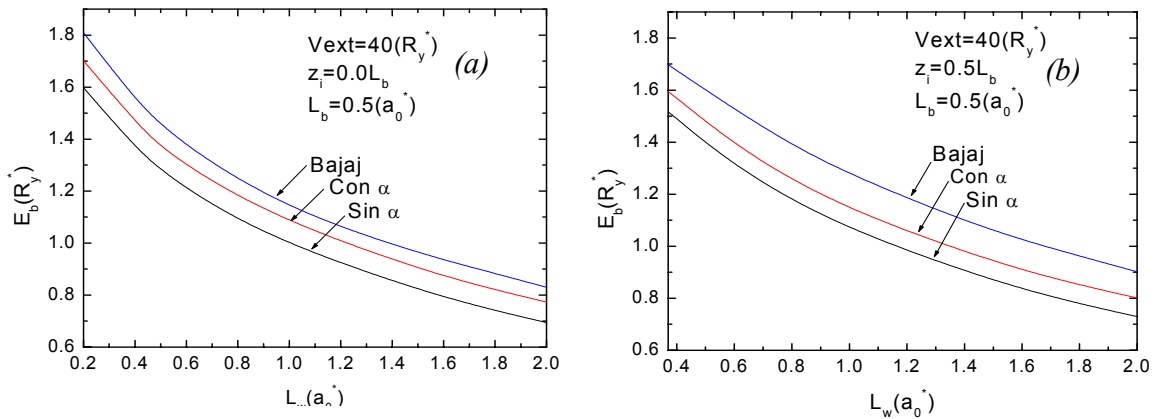
Fig. 15. Energía de enlace en función del ancho del pozo con el campo eléctrico como parámetro e incluyendo el parámetro variacional α en la función de prueba.



En la *Figura 15* se ve que los cálculos realizados con el *MDFE* arrojan mejores resultados para la energía de enlace E_b . Hay tener en cuenta que la energía tiende al mismo valor para anchos pequeños del *QW*, porque en este caso no hay efecto del campo eléctrico sobre la función de onda del electrón debido al fuerte confinamiento, tal y como se ha mostrado en los resultados anteriores.

La *Figura 16* muestra cálculos similares al anterior, pero en este caso para *DQW* en el que se fija el ancho de la barrera como $L_b = 0.5a_0^*$, y, sin campo eléctrico aplicado a la heterojuntura, y con la altura de la barrera interna y externa iguales a $40R_y^*$ para la D^0 centrada y sobre el borde de la barrera en las *Figuras 16a* y *16b* respectivamente.

Fig. 16. Energía de enlace como función del ancho del pozo para un ancho de barrera fijo y una altura de barrera de $40R_y^*$, e incluyendo el parámetro variacional α .



En la figura anterior se ve que la energía de enlace aumenta cuando se incluye en la función de prueba el parámetro variacional α . Los resultados que obtenemos con nuestro método son inferiores a los de Bajaj para la D^0 centrada y descentrada por que en el cálculo para doble pozo cuántico realizado por Bajaj se considera la diferencia de las masas efectivas en las capas de $GaAs$ y $Ga_{70}Al_{30}As$, además, de tener en cuenta el efecto de la mezcla de subbandas entre el estado fundamental y el primer estado excitado debido a la similitud entre estos dos estados por la reducción del tunelamiento de la función de onda en la barrera interior del DQW .

El efecto de la combinación de las subbandas es mas importante a medida que se aumenta el ancho de la barrera y se toman posiciones de la D^0 alejadas de centro de la heteroestructura, por esta razón, nuestros resultados para la donadora sobre el borde de la barrera muestran energías de enlace aún mas pequeñas comparadas con los resultados obtenidos por Bajaj en la *Figura 16b*.

CONCLUSIONES

1. La energía de enlace E_b de una D^0 en un pozo QW y DQW aumenta en la medida que se aumenta la altura de la barrera del potencial de confinamiento debido a que la repulsión del electrón por las barreras es proporcional a la altura de las mismas.
2. La energía de enlace de la D^0 depende de la posición de la donadora en la heteroestructura, sin embargo, cuando el confinamiento es muy fuerte la energía es aproximadamente la misma para cualquier posición de la donadora dentro de la heteroestructura.
3. El efecto del campo eléctrico sobre la energía de enlace de la D^0 es despreciable cuando el confinamiento es fuerte, es decir, $L_w \leq l a_0^*$ en este caso, no es posible desplazar la distribución de probabilidad electrónica dentro del pozo debido al confinamiento; se ha encontrado también que el efecto del campo eléctrico sobre la energía también disminuye en la medida que se suaviza el perfil del potencial de confinamiento.
4. En la heterojuntura de doble pozo cuántico (DQW) se encuentra que el tunelamiento de la función de onda a través de la barrera central con perfil de confinamiento parabólico es mayor que para los confinamientos rectangular y suave, donde la función de onda está más extendida y localizada respectivamente en los pozos del DQW , por esta razón, encontramos que el campo eléctrico sobre el potencial de confinamiento parabólico hace que la energía de enlace de la D^0 cambie mas rápido para la donadora centrada en la barrera.
5. El cálculo de la energía de enlace con el $MDFE$ arroja mejores resultados para el cálculo de la energía de enlace de la donadora en heterojunturas de QW y DQW , sin embargo, se debe tener en cuenta que en el DQW aparece el efecto de mezcla de las subbandas 1s y 2p que es relevante en el cálculo de la energía, y por esta razón, nuestros resultados para la energía E_b están por debajo de los mostrados en la referencias¹⁶⁻²⁰.

CITAS BIBLIOGRÁFICAS

1. GELLER, Michael R *Quantum Phenomena In Low Dimensional System*, university of Georgia, ATENAS. En: <<http://web.mit.edu/redingtn/www/netadv/Xindex.html>> (2001)
2. BASTARD G., Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981)
3. MONTES A., DUQUE A. and PORRAS-MONTENEGRO N., Phys. Stat. Sol. (b) **220**, 181 (2000)
4. DUQUE A., MONTES A. and MORALES A. L., Physica B **302**, 84 (2001)
5. BASTARD G. et al, Phys. Rev. B **28**, 3241 (1983)
6. DUQUE A., MONTES A. and MORALES A. L., Phys. Rev. B **55**, 10721 (1997)
7. DUQUE C. A. et al, J Phys. Condens. Matter **9**, 5977 (1997)
8. BETANCUR F. J. y MIKHAILOV I. D., Phys. Rev. B **51**, 4982 (1995)
9. HAO CHEN and SHIXUN ZHOU, Phys. Rev. B **36**, 9581 (1987)
10. CHAUDHURI S.. Phys. Rev. B **28**, 4480 (1983)
11. SARI H., KASAPOGLU E., SOKMEN I., Physica B, 325 (2003)
12. HAN C. S. and HSIEH Y. C., Physica B **179**, 355 (1992)
13. NICOLESCU E. C., Phys. Stat. Sol. (b) **226**, 385 (2001)
14. MAILHIOT C., YIA-CHUNG CHANG and MCGILL T. C., Phys. Rev B **26**, 4449 (1982)
15. RANGANATHAN R. et al, Phys. Rev. B **44**, 11166 (1991)
16. CEN J. and BAJAJ K. K., Phys. Rev. B **46**, 15280 (1992)
17. NGUYEN N. et al, Phys. Rev. B **44**, 14226 (1993)
18. NGUYEN N. et al, Phys. Rev. B **45**, 11166 (1991)
19. PAT LANE and GREENE RONALD L., Phys. Rev. B **33**, 5871 (1986)
20. CEN J., LEE S.M. y BAJAJ K.K., J. Appl. Phys. **73**, 2848 (1993)
21. SANTIAGO R. B., OLIVEIRA L. E., D'ALBUQUERQUE e CASTRO J., Phys. Rev. B **46**, 4041 (1992)
22. YIP Y.T. y KOK W.C., Phys. Rev. B **59**, 15825 (1999)
23. MIKHAILOV I.D., et al Phys. Stat. Sol (b) **234**, 590 (2002)
24. MILLER C., KLEINMAN D. A., and GOSSARD A. C., Phys. Rev B **29**, 7085 (1984)
25. JIANG H. X. and LIN J. Y., Phys. Rev. B **33**, 5851 (1986)

BIBLIOGRAFÍA

- BASTARD G., Phys. Rev. B **24**, 4714 (1981)
- BASTARD G. et al, Phys. Rev. B **28**, 3241 (1983)
- BETANCUR F. J. y MIKHAILOV I. D., Phys. Rev. B **51**, 4982 (1995)
- CEN J. and BAJAJ K. K., Phys. Rev. B **46**, 15280 (1992)
- CEN J., LEE S.M. y BAJAJ K.K., J. Appl. Phys. **73**, 2848 (1993)
- CHAUDHURI S. Phys. Rev. B **28**, 4480 (1983)
- DUQUE A., MONTES A. and MORALES A. L., Phys. Rev. B **55**, 10721 (1997)
- DUQUE C. A. et al, J Phys. Condens. Matter **9**, 5977 (1997)
- DUQUE A., MONTES A. and MORALES A. L., Physica B **302**, 84 (2001)
- GELLER, MICHAEL R *Quantum Phenomena In Low Dimensional System*, university of Georgia, ATENAS. En: <<http://web.mit.edu/redingtn/www/netadv/Xindex.html>> (2001)
- HAN C. S. and HSIEH Y. C., Physica B **179**, 355 (1992)
- HAO CHEN and SHIXUN ZHOU, Phys. Rev. B **36**, 9581 (1987)
- JIANG H. X. and LIN J. Y., Phys. Rev. B **33**, 5851 (1986)
- MAILHIOT C., YIA-CHUNG CHANG and MCGILL T. C., Phys. Rev B **26**, 4449 (1982)

- MIKHAILOV I.D., et al Phys. Stat. Sol (b) **234**, 590 (2002)
- MILLER C., KLEINMAN D. A., and GOSSARD A. C., Phys. Rev B **29**, 7085 (1984)
- MONTES A., DUQUE A. and PORRAS-MONTENEGRO N., Phys. Stat. Sol. (b) **220**, 181 (2000)
- NGUYEN N. et al, Phys. Rev. B **45**, 11166 (1991)
- NGUYEN N. et al, Phys. Rev. B **44**, 14226 (1993)
- NICOLESCU E. C., Phys. Stat. Sol. (b) **226**, 385 (2001)
- PAT LANE and GREENE RONALD L., Phys. Rev. B **33**, 5871 (1986)
- RANGANATHAN R. et al, Phys. Rev. B **44**, 11166 (1991)
- SANTIAGO R. B., OLIVEIRA L. E., D'ALBUQUERQUE e CASTRO J., Phys. Rev. B **46**, 4041 (1992)
- SARI H., KASAPOGLU E., SOKMEN I., Physica B, 325 (2003)
- YIP Y.T. y KOK W.C., Phys. Rev. B **59**, 15825 (1999)