

**EFFECTOS DE CAMPOS MAGNETICOS FUERTES SOBRE EL
ESTADO $2p$ DE UN D^0 EN POZOS, DOBLE POZO Y SUPERREDES
CUÁNTICAS DE GaAs/(Ga,Al)As**

JADER ENRIQUE GONZÁLEZ CUJIA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

POSGRADO EN FISICA

BUCARAMANGA,

ABRIL 2004

**EFECTOS DE CAMPOS MAGNETICOS FUERTES SOBRE EL
ESTADO $2p$ DE UN D^0 EN POZOS, DOBLE POZO Y SUPERREDES
CUÁNTICAS DE GaAs/(Ga,Al)As**

JADER ENRIQUE GONZÁLEZ CUJIA

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

Director

Dr. Javier Betancur Castaño

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

POSGRADO EN FISICA

BUCARAMANGA,

ABRIL 2004

A mi Dios y a la grandeza de mi madre Maria M.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a mi Dios por darme licencia para vivir y llevar a cabo este trabajo.

Agradezco al profesor Javier Betancur, por su apoyo y dirección de esta tesis.

Agradezco a la sapiencia del profesor Iliá Mikhailov y a su conocimiento en esta área de trabajo, por su aporte a mi formación y a sus valorados consejos de maestro.

Agradezco a mi madre, el saber esperar a su único hijo.

Agradezco a mi tía Yamile por sus diálogos y su confianza en mí.

Agradezco al respeto de toda mi familia.

Agradezco la ayuda de mis abuelos Hugues y Tirza, por considerarme su hijo.

Agradezco a mis compañeros de estudio Eduardo y Jesús D, por sus aportes en esta Tesis.

Agradezco a mis amigos y en especial a Taty por su compañía.

Agradezco a Andrea por su gran apoyo e impulso a seguir estudiando.

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCION.....	1
1. TOPICOS IMPORTANTES PARA EL DESARROLLO DE ESTE TRABAJO.....	6
1.1 PROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA.....	6
1.2 POZO CUÁNTICO.....	7
1.3 SUPERREDES.....	8
2. METODOS USADOS EN ESTA TÉSIS.....	9
2.1 PRINCIPIO VARIACIONAL DE SCHRÖDINGER.....	9
2.2 MÉTODO DE DIMENSION FRACTAL.....	10
2.3 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMETRICO.....	13
3. MODELO DE POTENCIAL DE CONFINAMIENTO.....	15
4. IMPUREZA D^0 EN QW, DQW Y SL.....	17
4.1 HAMILTONIANO PARA UNA D^0 EN UN QW, DQW Y UNA SL CON CAMPO MAGNÉTICO.....	17
4.2 ESPECTRÓ DEL ELECTRÓN LIBRE EN UN QW DE <i>GaAs-Ga_{1-x}AlAs</i>	18
4.3 ESPECTRO DEL ELECTRÓN LIBRE EN UN DQW Y UNA SL.....	20
4.4 FUNCION DE PRUEBA PARA ESTADOS EXCITADOS DE UN D^0 EN UN QW, DQW Y UNA SL.....	22
4.5 ESPECTRO DE UNA D^0 DESCENTRADA EN UN QW, DQW Y UNA SL.....	24
5. ISOMORFISMO DE LA DIMENSION FRACTAL CON EL MOMENTUMANGULAR.....	25
6. ANÁLISIS Y RESULTADOS.....	27
7. CONCLUSIONES Y PROYECCIONES.....	38

8. BIBLIOGRAFÍA.....	41
9. ANEXO.....	44

INDICE DE FIGURAS

	Pág.
Fig.1 Diagrama energético para la estructura de un pozo cuántico de GaAs-(Ga,Al)As.....	7
Fig. 2 Esquema de una superred periódica.....	8
Fig. 3. Representación de los potenciales de confinamiento.....	16
Fig.4 Variación de la energía de enlace, de los estados 1s (a) y 2p (b), para una donadora neutra descentrada en un pozo cuántico de Ga _{1-x} Al _x As en función del ancho del pozo.....	27
Fig.5 Energía de enlace del estado 1s en función del ancho de la barrera L_b de una impureza donadora D^0 para diferentes posiciones en un DQW.....	30
Fig.6 Energía de enlace del estado 2p en función del ancho de la barrera L_b , para una impureza donadora D^0 ubicada en el centro de la barrera en un DQW.....	32
Fig.7 Energía de enlace del estado 1s en función del ancho de la barrera L_b , para una impureza D^0 en un triple pozo (TQW) de Ga _{1-x} Al _x As.....	33
Fig.8 Dimensión fractal en función de la separación electrón-donadora para el estado 1s y estado 2p, de una donadora centrada, en un QW de GaAs/Ga _{0.7} Al _{0.3} As, de diferentes anchos.....	34
Fig. 9 Dimensión fractal de una donadora descentrada en un QW de GaAs/Ga _{0.7} Al _{0.3} As , en función de la separación electrón donadora, para el estado 1s (a) y el estado (2p).....	36

INDICE DE ANEXOS

Pág.

ANEXO Este Programa calcula la energía de enlace de un D^0 para el estado base ($1s$) y primer excitado ($2p$).....	44
---	----

ACRÓNIMOS

D^0 : Impureza donadora neutra, en mecánica cuántica equivale al átomo de H .

QW: Pozo cuántico.

DQW: Doble pozo cuántico.

SL: Superred cuántica.

AME: Aproximación de masa efectiva.

E_b : Energía de enlace.

TITULO: EFECTOS DE CAMPOS MAGNETICOS FUERTES SOBRE EL ESTADO $2p$ DE UN D^0 EN POZOS, DOBLE POZO Y SUPERREDES CUÁNTICAS DE GaAs/(Ga,Al)As

Autor: Jader E. González Cujia**

*Palabras claves: QW, DQW, SL, principio variacional, donadora neutra (D^0), Jacobiano

Dentro del marco de la teoría de aproximación de masa efectiva y usando el método de dimensión fractal, se estudian las energías de los estados base ($1s$) y primer excitado ($2p$) de una impureza D^0 descentrada en un pozo cuántico (QW), doble pozo cuántico (DQW) y una superred (SL) de GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs, en función de la intensidad del campo magnético, del ancho del pozo, del ancho de la barrera y la posición de la impureza, considerando diferentes formas de potencial de confinamiento: Rectangular, Suave y Parabólico.

Se encuentra una ecuación de onda para la función envolvente, la cual describe la correlación entre la posición del electrón y la donadora en el estado $1s$ y $2p$ a partir del principio variacional de Schrödinger. Esta ecuación es equivalente a la ecuación de Schrödinger para un átomo hidrogenoide en un espacio efectivo con dimensión fractal variable. Considerando la densidad de carga alrededor de la donadora como un objeto fractal autosimilar, se analiza la dependencia de esta dimensión fractal D^* con el ancho del pozo y la posición de la impureza, para el estado $1s$ y $2p$. Se encuentra que la D^* es isomórfica con el momentum angular $l \rightarrow l+1$, correspondiente a un aumento de la $D^* : D^* \rightarrow D^* + 2$. Además se muestra que la D^* sufre una transformación similar, cuando la donadora es desplazada desde el centro del pozo a la barrera. Los cálculos de las energías de enlace del D^0 se comparan con los resultados teóricos existentes en la literatura.

*Trabajo de grado

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

TITLE: EFFECTS OF STRONG MAGNETICS FIELDS ON THE $2p$ STATE OF A D^0 IN SINGLE QUANTUM WELL, DOUBLE QUANTUM WELLS AND QUANTUM SUPERLATTICES GaAs/(Ga,Al)As

Author: Jader E. González Cujia **

Keywords: QW, DQW, SL, variational principle, neutral donor (D^0), Jacobian

Within the framework of the effective-mass approximation, and using the Fractal Dimension Method, we study the binding energies of the ground ($1s$) and first excited ($2p$) states of a impurity D^0 off-center in a $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ quantum well (QW), double quantum well (DQW) and superlattices (SL), as a function of the strength field, the well wide and the impurity position considering forms different confinement potential: rectangular, soft and parabolic.

A wave equation for the envelope function which describes the electron correlation with donor position in the $1s$ and $2p$ states starting from variational principle is founded. This equation is similar to the Schrödinger equation for the hydrogenic atom in an effective space with the variable fractal dimension. Considering the density of charge around of the donor location as a self-similar fractal object we have analyzed the fractal dimension D^* as function of the well width and the position for the $1s$ and $2p$ states. We have found that D^* is isomorphic with angular momentum, $l \rightarrow l+1$ corresponds to the raise of the D^* : $D^* \rightarrow D^* + 2$. Besides, we have also showed that D^* undergoes a similar transformation as the donor is displaced from the center of the quantum well to the barrier. The calculations for the D^0 binding energies will be compared with the available theoretical results in literature.

* Grade Work

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

INTRODUCCION

Los avances tecnológicos en las dos últimas décadas han permitido el análisis y fabricación de una gran cantidad de sistemas semiconductores de baja dimensionalidad (BD) [1-5], tales como pozos (QW), hilos (QWW), puntos cuántico (QD) y superredes (SL). Por tener dimensiones características comparables a la longitud de onda de De Broglie asociada al electrón [6]. Estos sistemas operan en el régimen cuántico y son sensibles a las variaciones de escala (atómica), en geometría y composición.

Estos sistemas, también llamados heteroestructuras, se construyen mediante la deposición alternada de capas de materiales semiconductores con diferentes bandas prohibidas, colocadas de tal manera que se restringe el movimiento de los portadores de corriente, en una, dos, y tres dimensiones dando origen así, al confinamiento de partículas en dos, uno y cero dimensiones, respectivamente. Debido al confinamiento cuántico, el cual cambia la dimensionalidad del espacio, se modifican las propiedades electrónicas y vibracionales de estos sistemas, exhibiendo propiedades físicas diferentes.

Cuando los estados ligados de los portadores de carga (impurezas aceptoras, donadoras neutras y cargadas, excitones, etc.) se hacen más estables, las líneas en el espectro de absorción se hacen mucho más finas y bien definidas, ampliando el rango de posibilidades para diseñar y construir dispositivos ópticos y electrónicos [7,8]. El análisis de las energías de enlace de los portadores de carga y sus variaciones con el tamaño de las heterojunturas en presencia de campos externos, requieren de cálculos cuidadosos que deben tener en cuenta tanto los efectos de correlación electrónica como la no homogeneidad de los parámetros del sistema (potencial de confinamiento, masa

efectiva, constante dieléctrica, etc.). La descripción cuantitativa de estos efectos es bastante complicada ya que esto sugiere hallar la solución de la ecuación de Schrödinger en un espacio no homogéneo, anisotrópico y multidimensional. Por esta razón, para analizar los espectros electrónicos de sistemas de pocas partículas confinadas en heterojunturas semiconductoras se han utilizado principalmente el método variacional [9-19].

Bastard [9] fue el primero en estudiar teóricamente una impureza (poco profunda) donadora neutra (D^0) en un QW de $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$, a través de cálculos variacionales. Él propuso una función de prueba hidrogenoide para analizar el espectro electrónico con barrera infinita, en la aproximación de masa efectiva de un D^0 en un QW. Usando este modelo, demostró que con el aumento del confinamiento la energía de enlace crece y ésta es mayor cuando la impureza está centrada. Bastard y colaboradores [14] extendieron este modelo para analizar los efectos de un campo eléctrico sobre el estado base de un D^0 en un QW aislado.

Una función que involucra tres parámetros no-lineales para calcular la energía del estado base y primer estado excitado de un D^0 a través de cálculos variacionales se puede ver en la Ref. [15]. Green-Bajaj [16] con el objetivo de analizar los efectos de campos magnéticos sobre los estados 1s y 2p de un D^0 , usaron una función de la forma $\Psi = f(z)G(\rho, z, \phi)$, donde $G(\rho, z, \phi)$ es una combinación de funciones gaussianas con un parámetro variacional no lineal y hasta 11 parámetros variacionales lineales. Un análisis comparativo de diferentes cálculos variacionales con diferentes tipos de funciones de prueba (hasta 20 parámetros variacionales) pueden ser encontradas en la tesis doctoral de F. J Betancur [17]. Cen-K.K.Bajaj [18] calcularon la energía de enlace de un D^0 en un doble pozo cuántico con campo magnético, tanto para el estado base como estados excitados con campo magnético. Chaudhuri [19] reportó los cálculos de energía de enlace para el estado base de una impureza donadora en

un triple pozo cuántico (TQW). Esaki y colaboradores [20], analizaron las propiedades de una superred periódica, fabricada a partir de dos semiconductores base (A y B) dispuestos en forma de emparedado (ABABABA...). Nguyen y colaboradores [21-22] estudiaron la energía del estado base y primeros estados excitados de una donadora hidrogenoide localizada en diferentes posiciones en un doble pozo cuántico (DQW) y hasta 15 pozos cuánticos (QW) aplicando campo magnético; Pacheco y colaboradores [23], presentaron un estudio teórico de los estados de una impureza donadora en un triple pozo cuántico (TQW) bajo el efecto de campos eléctricos y magnéticos con perfiles de potenciales diferentes.

La eficiencia del método variacional depende de la flexibilidad de la función de prueba para describir entre otros, los cambios de simetría del sistema y el comportamiento de la impureza dentro del pozo. Este método da una estimación aproximada de la energía y conlleva por lo general a la realización de cálculos voluminosos con un gran incremento de tiempo computacional con el aumento del número de partículas.

Otros métodos que también han sido utilizados en estos mismos sistemas son: expansión en series [24], dimensional scaling [25], método numérico como el barrido trigonométrico [26], Monte Carlo [27] y teoría de perturbaciones [28]. Estos métodos pierden su eficiencia, cuando se rompe la simetría del espacio por ejemplo, en un pozo cuántico las partículas se encuentran confinadas en una de sus direcciones por lo cual, las propiedades del medio varían con la dirección. Por eso, en una serie de publicaciones sobre impurezas donadoras confinadas en pozos cuánticos fue propuesto utilizar un método llamado Dimensión Fraccionaria [29-34], en el cual el espacio real se reemplaza por un espacio efectivo, homogéneo e isotrópico, con una dimensión reducida. Esta dimensión fraccionaria se considera como un parámetro de la teoría, la cual depende de la altura de la barrera y ancho del pozo. El método de Dimensión Fraccionaria permite en muchos casos encontrar la solución del

problema de pocas partículas en heterojunturas semiconductoras en una forma mucho más compacta que a través de otros métodos, también ha sido utilizado para analizar problemas de estado sólido [36]. Empleando este método se estudió el espectro electrónico de donadoras en pozos cuánticos, espectros de absorción, e interacción fonón-excitón [30-32]. Oliveira y coinvestigadores [33-34], en este mismo marco, propusieron un procedimiento matemático para determinar el valor de la dimensión fraccionaria, en QWs, QWWs, QDs y SLs ajustando la energía del estado base de un modelo de átomo de hidrógeno, en un espacio isotrópico con la dimensión fraccionaria y el valor correspondiente para el sistema real tridimensional a través de la expresión, $E_b = -E_{1s} = 4/(D-1)R^*$. No obstante, como lo anotaron los autores [33-34], este método pierde su validez bajo condiciones de confinamiento fuerte. Particularmente, los resultados obtenidos para campos magnéticos intermedios y fuertes difieren mucho de los cálculos variacionales y Monte Carlo. Además, el método no es eficiente para hilos y puntos cuánticos donde el confinamiento es más fuerte que en pozos cuánticos y superredes. En esta teoría el cambio de dimensionalidad se considera como un cambio *en promedio* y se asume igual en todas partes, lo cual no es completamente cierto cuando la impureza se desplazada en la heterojuntura.

Nuestro grupo ha extendido la teoría de dimensión fraccionaria para que se aplique a cualquier heterojuntura en presencia de campos magnéticos medianos y fuertes. En este sentido el grupo [37-38], partiendo del principio variacional de Schrödinger, elige la mejor función de correlación, entre todas las funciones posibles para describir el comportamiento del D^0 en el QW. Esta función de correlación es adecuada para describir el confinamiento en las regiones cerca de las interfases y en la barrera, donde los efectos de tunelamiento son predominantes. Esto también permite considerar la dimensión del espacio no *en promedio*, sino como una característica local. A esta

dimensión se le llama Dimensión Fractal [37-38], la cual se puede obtener a través de la definición de fractales dada por Mandelbrot [35]. De esta manera, los resultados de la teoría de dimensión fraccionaria se obtienen de manera particular, sustituyendo en cada punto del espacio, la dimensión fractal por el valor promedio dado por la Dimensión Fraccionaria.

El contexto de este trabajo, está soportado por la aplicación del método de dimensión Fractal, el cual permite obtener resultados con mayor rapidez y alta precisión en comparación con otros métodos para resolver problemas similares. En nuestros cálculos utilizaremos diferentes formas de potencial (rectangular, de borde suave, de piso parabólico) modelados por una función de paso suavizada y diferentes posiciones de un D^0 para analizar la energía de enlace del estado $1s$ y $2p$ en función de su posición y de la intensidad del campo magnético externo en las heterojunturas. Además, se analizará el cambio de la dimensión Fractal, con el desplazamiento de la impureza en QW. Los resultados se comparan con los referencias [16,18-19].

1. TOPICOS IMPORTANTES PARA EL DESARROLLO DE ESTE TRABAJO

1.1 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

Un electrón en un semiconductor se encuentra sometido a un potencial periódico, cuya periodicidad es la misma de la red cristalina. Este potencial corresponde a la distribución periódica de carga asociada con los núcleos iónicos, más el potencial aportado por todos los demás electrones libres del cristal, de tal forma que solo se tiene en cuenta la interacción promedio de un solo electrón con todos los demás. Sin embargo, cuando se analiza el electrón donador de una D° en un semiconductor, además del potencial periódico, este se encuentra afectado por el potencial de interacción entre el electrón y el ión donador. Para impurezas poco profundas este potencial, en buena aproximación puede aproximarse como un potencial coulombiano apantallado por la constante dieléctrica estática del cristal; es decir:

$$V_s = + \frac{|e|}{\epsilon r}.$$

Por lo tanto, la ecuación de Schrödinger del electrón donador puede ser expresada como:

$$(H_0 + U)\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

Donde H_0 es el Hamiltoniano del electrón en el cristal y U es la energía potencial del electrón en el potencial apantallado.

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

y $\Psi(\mathbf{r})$ es la función de onda para el electrón.

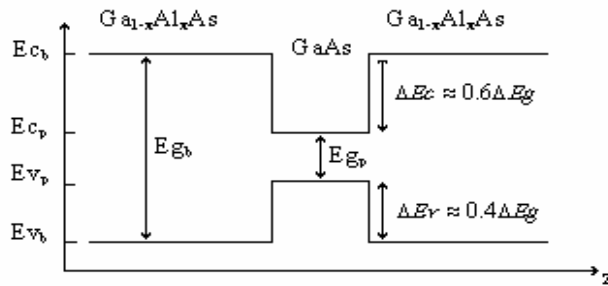
En esta aproximación se asume que el efecto del potencial periódico de la red, se manifiesta en la masa efectiva del electrón, de tal forma que este se comporta como una partícula libre de carga e y masa efectiva m^* . Entonces, nuestro problema se reduce a resolver la ecuación (1.1) con:

$$H_0 = \frac{\mathbf{P}^2}{2m^*} \quad (1.3)$$

Esta aproximación también puede extenderse para analizar un electrón en presencia de perturbaciones externas que varíen tan suavemente que puedan considerarse constante en una celda unitaria.

1.2 POZO CUANTICO

Fig.1 Diagrama energético para la estructura de un pozo cuántico de GaAs-(Ga,Al)As.

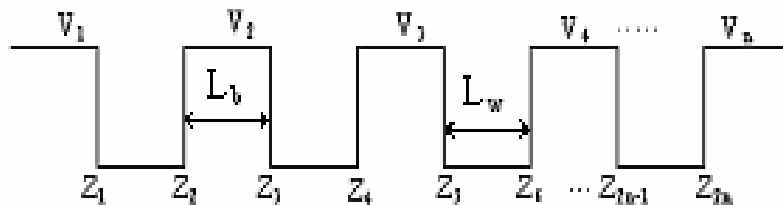


Cuando una capa de un material semiconductor, como GaAs, se encuentra entre dos capas de otro material semiconductor con una mayor gap de energía, como Ga_{1-x}Al_xAs ocasiona una discontinuidad ΔE_g tanto en la banda de valencia como en la banda de conducción. Dicha discontinuidad se distribuye aproximadamente en un 60% entre las bandas de conducción y un 40% entre las bandas de valencia de ambos materiales, tal como se muestra en la figura 1, en

donde E_{c_b} y E_{c_p} representan las energías de los pisos de la banda de conducción de cada semiconductor; mientras que E_{v_b} y E_{v_p} representan los techos de las bandas de valencia respectivamente. La primera discontinuidad, $\Delta E_c = 0.6\Delta E_g$, es la causante del confinamiento electrónico, y la segunda se utiliza para confinar huecos. El valor de ΔE_g depende de la concentración de aluminio y experimentalmente se ha encontrado que dicha discontinuidad puede aproximarse muy bien por la relación $\Delta E_g = 1.155x + 0.37x^2$ [eV].

1.3 SUPERREDES

Fig. 2 Esquema de una superred periódica, donde se muestran las diferentes barreras de potencial y los respectivos anchos de los pozos.



Una superred periódica es fabricada a partir de dos semiconductores base (A y B) dispuestos en forma de emparedado (ABABABA...); y al igual que en los pozos cuánticos, los materiales que participan en esta heteroestructura se caracterizan por tener diferentes anchos de banda prohibida y parámetros de red muy parecidos, garantizando de esta manera que el nuevo material tenga propiedades electrónicas novedosas con el mínimo de deformaciones posibles en las interfases. De esta manera se produce una sucesión de pozos cuánticos cuyas características de confinamiento son completamente similares a las del pozo simple. Este tipo de heteroestructura

puede únicamente contener un número finito de pozos cuánticos. las superredes infinitas no existen en la actualidad.

2. METODOS USADOS EN ESTA TESIS

2.1 PRINCIPIO VARIACIONAL DE SCHRÖDINGER

El Hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger $\hat{H}\Psi_{D^0}(\mathbf{r})=E\Psi_{D^0}(\mathbf{r})$, correspondiente al problema de una D^0 en un QW en presencia de campo magnético no es separable. Entonces se hace necesario utilizar algunos métodos como teoría de perturbaciones, principio variacional de Schrödinger, método variacional, etc.; que permiten obtener muy buenas aproximaciones del problema en cuestión. Puesto que el *MDF* se fundamenta en el principio variacional de Schrödinger, se hará una descripción de este principio. Para ello, consideremos el siguiente problema variacional:

$$F[\Psi_{D^0}(\mathbf{r})]=\langle\Psi_{D^0}(\mathbf{r})|\hat{H}-E|\Psi_{D^0}(\mathbf{r})\rangle\rightarrow\min$$

(2.1)

lo anterior implica que $\delta F[\Psi_{D^0}]=0$, por lo cual:

$$\langle\delta\Psi_{D^0}|\hat{H}-E|\Psi_{D^0}\rangle+\langle\Psi_{D^0}|\hat{H}-E|\delta\Psi_{D^0}\rangle=0. \quad \text{Debido a que } \hat{H}-E \text{ es}$$

autoadjunto se cumple la propiedad: $\langle\Psi_{D^0}|\hat{H}-E|\delta\Psi_{D^0}\rangle=\langle\delta\Psi_{D^0}|\hat{H}-E|\Psi_{D^0}\rangle$,

Entonces se puede escribir $2\langle\delta\Psi_{D^0}|\hat{H}-E|\Psi_{D^0}\rangle=0$, y considerando que esta

expresión debe ser válida para $\forall\delta\Psi_{D^0}^*$, debe cumplirse que:

$$\left(\hat{H}-E\right)\Psi_{D^0}=0 \quad (2.2)$$

Es decir; los problemas (2.1) y (2.2) son completamente equivalentes.

Este método nos permite hacer uso de funciones de prueba más generales que las utilizadas en el método variacional de Ritz, puesto que pueden no usarse parámetros variacionales.

2.2. METODO DE DIMENSION FRACTAL

El método de dimensión fractal es un método simple y eficiente que se ha venido utilizando para estudiar los espectros de sistemas de pocas partículas confinadas en sistemas de baja dimensionalidad. Este método permite obtener resultados con mayor rapidez y alta precisión respecto a otros utilizados para resolver el mismo problema. El formalismo que se sigue en este método para encontrar la energía de enlace $E(D^0)$ de una donadora descentrada en un QW es el siguiente:

Para encontrar la energía $E(D^0)$, se procede a resolver el problema de valores propios

$$\hat{H}\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = E(D^0)\Psi_{D^0}(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

donde \hat{H} es el Hamiltoniano del electrón ligado a una D^0 descentrada en un QW. Eligiendo el origen en la posición ζ de la impureza, se utiliza la siguiente función de prueba:

$$\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(\mathbf{z} + \zeta)\Phi_{D^0}(r) \quad (2.4)$$

donde $f_0(z)$ es la función de onda del electrón desacoplado (libre) en la heteroestructura correspondiente al estado de más baja energía E_0 . Esta energía puede ser encontrada solucionando el problema de valores propios.

$$\hat{H}_0 f_0(\mathbf{z}) = E_0 f_0(\mathbf{z}) \quad (2.5)$$

en la cual \hat{H}_0 es el Hamiltoniano del electrón desacoplado.

Nótese que en la función de prueba utilizada, $\Phi_{D^0}(r)$ es una función variacional aún desconocida que depende únicamente de la distancia de separación ion-electrón y está relacionada con la parte hidrogenoide del problema; razón por lo cual a esta función se le denomina función de correlación. Usando el principio variacional de Schrödinger:

$$F[\Phi_{D^0}] = \left\langle f_0 \Phi_{D^0} \left| \hat{H}_0(\mathbf{r}) - E(D^0) \right| f_0 \Phi_{D^0} \right\rangle \rightarrow \min, \text{ y después de algunos cálculos}$$

se obtiene la siguiente ecuación de Euler-Lagrange para $\Phi_{D^0}(r)$:

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} \right] - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = [E(D^0) - E_0] \Phi_{D^0}(r), \quad (2.6)$$

con

$$J_m(r) = 4\pi r^2 P_m(r); \quad P_m(r) = \frac{1}{2} \int_0^\pi f_z^2(r \cos \theta + \zeta) \sin \theta d\theta \quad (2.7)$$

$P_m(r)$ en la ecuación (2.7) representa la distribución radial de probabilidad, para el electrón desacoplado en la heteroestructura. La forma explícita de la función f_0 depende del problema particular; es decir si en lugar de un pozo se tiene una superred, presencia de campos magnéticos, etc. Para este último $P_m(r)$ adopta la siguiente forma:

$$P_m(r) = \frac{r^{2m}}{2} \int_0^\pi f_z^2(r \cos \theta + \zeta) e^{-r^2 \sin^2 \theta / 2} \sin^{2|m|+1} \theta d\theta \quad (2.8)$$

Por otra parte la ecuación (2.6) puede ser interpretada como la parte radial de la ecuación de Schrödinger de un átomo de hidrógeno en un estado S en un espacio isotrópico y no homogéneo con dimensión variable $D^*(r)$, que depende de la distancia de separación entre el electrón y el ión. Cabe destacar que la solución de la ecuación (2.6) proporciona solo un valor aproximado de

$E(D^0)$ y la correspondiente función de onda, porque la función $\Phi_{D^0}(r)$ no es exacta; sin embargo esta última permite determinar la mejor aproximación entre las funciones de prueba del tipo (2.4). Para obtener una mejor descripción de la dimensión de este espacio efectivo se utiliza la definición de Mandelbrot [35] para objetos fractales, considerando la distribución de carga electrónica como un objeto fractal. Según Mandelbrot, para fractales exactos la dimensión D (Dimensión de Mandelbrot) del espacio está simplemente determinada por una ley de potencias que relaciona la masa M y el tamaño L del objeto a través de la expresión $M = CL^D$. Los fractales no exactos, como la distribución de carga electrónica, no obedecen a esta ley de potencias, por lo cual dicha dimensión solo puede determinarse de manera local. Para definirla procedemos a usar un conjunto de cajas cuya forma y medidas reproducen el contorno del objeto y cuyo tamaño se aproxima cada vez más a cero. Debido a la simetría de los estados S , las cajas naturalmente serán esféricas con centro en la posición del la donadora.

Postulando que la dimensión D del objeto en análisis se determina a través de la dependencia de la carga Q , encerrada dentro de una esfera de radio r , por medio de la relación $Q = Cr^D$, donde C y D son constantes para fractales exactos. Para fractales no exactos varían mas suavemente que cualquier potencia de r . Permítase considerar un diferencial de carga dQ dentro de un cascarón esférico cuyo radio interior y exterior son r y $r+dr$.

Para un electrón libre en la heteroestructura, la carga puede ser relacionada con la densidad radial de probabilidad $P(r)$, con la parte radial del elemento de volumen Jacobiano $J(r)$ a partir de la expresión: $dQ = r^2 P(r) dr = J(r) dr$. Asumiendo que la densidad de carga pueda ser considerada como un fractal esférico, con dimensión $D^*(r)$, entonces la carga dQ encerrada dentro del cascarón esférico de radio r , se relaciona a través de

una cuasi ley potencia dada por $dQ = C(r)r^{D^*(r)-1}dr$. Definiendo la dimensión fractal como:

$$D^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J(r)}{dr} = 3 + r \frac{d \ln P(r)}{dr} \quad (2.9)$$

Con la condición inicial

$$\frac{d \ln C(r)}{dr} + \ln r \frac{d D^*(r)}{dr} = 0, \quad (2.10)$$

ambas expresiones para dQ coinciden, entonces:

$$J(r) = C(r)r^{D^*(r)-1}, \quad (2.11)$$

Vemos que esta definición incluye el caso para fractales exactos, en los cuales $C(r)$ y $D^*(r)$ son constantes.

Es por esto que al método para calcular la energía de enlace basado en la solución directa de la ecuación (2.6) se le ha denominado método de dimensión fractal.

2.3 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO

El método de barrido trigonométrico es un método que sirve para solucionar ecuaciones de la forma:

$$-\frac{1}{S_0(x)} \frac{d}{dx} \left[S_0(x) \frac{d\psi(x)}{dx} \right] + V(x)\psi(x) = E\psi(x); 0 < x < \infty; \psi(0) < \infty; \psi(x)_{x \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (2.12)$$

Esta ecuación diferencial de segundo orden puede ser reducida a otra ecuación de primer orden por medio del siguiente cambio de variables:

$$\psi(x) = A(x) \cos \theta(x); \quad S_0(x) \frac{d\psi(x)}{dx} = A(x) \operatorname{sen} \theta(x). \quad (2.13)$$

Si derivamos $\frac{d\psi}{dx}$ y la reemplazamos en la segunda relación de (2.13) se obtiene:

$$A'(x) = A(x) \frac{\operatorname{sen} \theta(x)}{\cos \theta(x)} \left[\theta'(x) + \frac{1}{S_0(x)} \right] \quad (2.14)$$

Luego podemos encontrar la respectiva ecuación diferencial para la función $\theta(x)$, y la forma de $A(x)$:

$$\theta'(x) = - \left[\frac{\operatorname{sen}^2 \theta(x)}{S_0(x)} + (E - V(x)) S_0(x) \cos^2 \theta(x) \right], \quad (2.15)$$

$$A(x) = \exp \left\{ \int_0^x \operatorname{sen} \theta(x) \cos \theta(x) \left[\frac{1}{S_0(x)} - (E - V(x)) S_0(x) \right] dx \right\}, \quad (2.16)$$

con la condición inicial

$$\theta(0) = k\pi; \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.17)$$

La ecuación (2.15) puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro E dado y esta solución puede considerarse como una función de dos variables $\theta = (x, E)$. Si $\theta = (x, E)$ es solución del problema de Cauchy (2.15) y

(2.16), entonces cualquiera de estas soluciones que se obtengan conducen al mismo valor propio E y a la misma función propia $\psi(x)$.

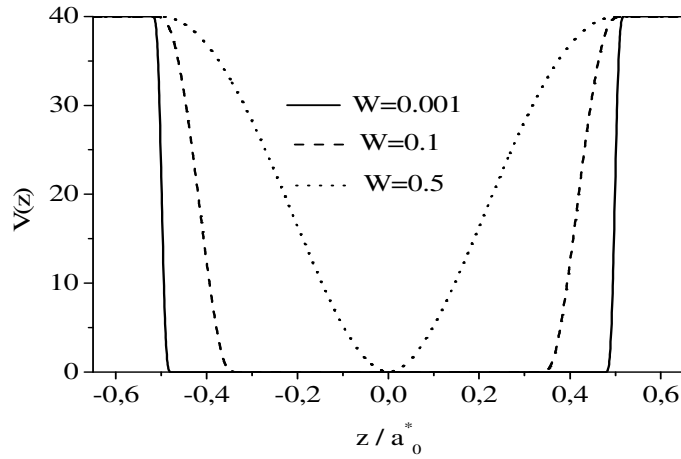
3. MODELO DE POTENCIAL DE CONFINAMIENTO.

El perfil del potencial de confinamiento en estas heterojunturas semiconductoras es considerado con una altura de barrera finita y se encuentra determinado por la concentración de Al variando paulatinamente, ello hace que las regiones de transición entre los componente de un QW, DQW y SL ($GaAs$ $Ga_{1-x}Al_xAs$) cambien suavemente. Para describir el potencial de confinamiento en el QW de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, asumimos que la variación de la concentración x de Al a lo largo del eje z se determina por una función que varíe suavemente, $x(z)$ y el potencial de confinamiento es dado por:

$$V(z) = V_1\theta(z_1 - z, W) + \sum_{i=1}^{n-1} V_i [\theta(z - z_{2i}, W) - \theta(z - z_{2i+1}, W)] + V_n\theta(z - z_{2n}, W) \quad (3.1)$$

Esta expresión corresponde al potencial de confinamiento para un QW, DQW y SL. Donde $\theta(z_1 - z, W)$ corresponde a la función escalón a la izquierda y $V_i [\theta(z - z_{2i}, W) - \theta(z - z_{2i+1}, W)]$ es la descripción de una barrera de altura V_i , con saltos de potencial en los puntos z_{2i} y z_{2i+1} , n corresponde al número de pozos para la heteroestructura. W puede ser asociado con el espesor de las regiones de transición en la juntura. El potencial (3.1) es representado en la Fig.2.

Fig. 3. Esquema de los potenciales utilizados en este trabajo para diferentes anchos de la región de transición, se muestran los potenciales rectangular ($W=0.001$) línea sólida continua, suave ($W=0.1$) línea a rayas y parabólico ($W=0.5$) línea punteada



Sin embargo, también introduciremos la versión no abrupta de la función paso (3. 2) o función de Heaviside modificada con el fin de describir adecuadamente los potenciales utilizados en QW , DQW y SL definida como: 1

$$\theta(z, z_0, W) = \begin{cases} 0; & z < (z_0 - W) \\ \left[\frac{(z - z_0)^2}{W^2} - 1 \right]^2; & (z_0 - W) \leq z < z_0 \\ 1; & z \geq z_0 \end{cases} \quad (3.2)$$

Se puede analizar diferentes formas de potencial variando en (3.1) la altura de la barrera determinada por las V_i y el ancho W de la región de transición. Si escogemos $W \approx 0.001a_0^*$ la función θ (3.2) presentará una forma casi rectangular; de esta manera, si queremos obtener otras formas de potencial, debemos variar W . El ancho W de la región de transición depende de

la variación gradual de la concentración de Al , variando desde un valor mínimo en el centro del pozo hasta un valor máximo en la barrera.

4. IMPUREZA D^0 EN QW, DQW Y SL.

4.1 HAMILTONIANO PARA UN D^0 EN UN QW, DQW Y UNA SL CON CAMPO MAGNÉTICO.

Consideraremos el problema de una D^0 descentrada y centrada, en diversas heteroestructuras semiconductoras de $GaAs-(Ga,As)As$ en presencia de un campo magnético uniforme aplicado en la dirección de crecimiento de la heteroestructura. Dentro de la aproximación de masa efectiva, el Hamiltoniano para una donadora, en un QW, DQW y en una SL, se puede escribir como:

$$\hat{H} = -\nabla^2 + \gamma \mathcal{L}_z + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - \frac{2}{|\mathbf{r} - \zeta|} + V(z) \quad (4.1)$$

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{2}{|\mathbf{r} - \zeta|}; \quad (4.1a)$$

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_z + \hat{H}_\perp; \quad (4.1b)$$

$$\hat{H}_z = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z); \quad (4.1c)$$

$$\hat{H}_\perp = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} \quad (4.1d)$$

El Hamiltoniano utilizado para los cálculos de masas efectivas diferentes del electrón en los compuestos está dado por.

$$\hat{H} = \frac{m^*}{m_e} \left(-\nabla^2 + \gamma \mathcal{L}_z + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} \right) - \frac{2}{|\mathbf{r} - \zeta|} + V(z) \quad (4.1e)$$

donde \hat{H}_0 representa el Hamiltoniano del electrón desacoplado. Cabe anotar que estas expresiones han sido representadas adimensionalmente. La unidad de longitud elegida es el radio de Bohr efectivo: $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2 \approx 98.7 \text{ \AA}$, las energías en Rydberg efectivo: $R_y^* = e^2 / 2a_0^* \approx 5.83 \text{ meV}$, mientras que $\gamma = e \hbar B / 2m^* c R_y^*$ representa el coeficiente adimensional para medir el campo magnético. Por otra parte \mathbf{r} y $\zeta = (0, 0, Z_i)$ son los vectores posición del electrón y la impureza, respectivamente; $L_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}$ es la componente z del momentum angular, $V(z)$ es el potencial de confinamiento, y $\frac{2}{|\mathbf{r} - \zeta|}$ es la interacción coulombiana entre el electrón y la impureza.

4.2 ESPECTRO DEL ELECTRÓN LIBRE EN UN QW DE $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$.

En este caso los parámetros del material m^* (masa efectiva del electrón $m^* = 0.067 m_0$) son asumidas de tal forma que sean uniformes a través de la heteroestructura.

La forma del Hamiltoniano que describe el electrón desacoplado, se encuentra representado por (4.1.b), el cual incluye el potencial de confinamiento $V(z)$, con un campo magnético aplicado en la dirección paralela al eje z , su forma corresponde a:

$$\hat{H}_0 = -\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} \quad (4.1)$$

La ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano (4.1) para el electrón libre es separable y se reduce a una ecuación de onda unidimensional.

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right] f_m(z) = E_m f_m(z) \quad (4.2)$$

$m=0$ para el estado $1s$ y $m=1$ para el estado $2p$. Donde $f_m(z)$ es la función de onda del electrón desacoplado en el QW con campo magnético aplicado y E_0 la energía del electrón libre.

Para solucionar esta ecuación se usó el método de barrido trigonométrico, debido a que no puede resolverse analíticamente al hacer uso de los potenciales no convencionales descritos en la Fig. 3.

El potencial en la barrera del QW es constante $V(z) = V_0$ y en ellas la ecuación (4.2) si presenta solución analítica:

$$\begin{aligned} f_m(z) &= A \exp(\kappa z), \quad \text{para } z \leq -L_w/2, \text{ donde } \kappa = \sqrt{V_0 - E_m}; \\ f_m(z) &= A \exp(-\kappa z), \quad \text{para } z \geq L_w/2, \text{ donde } \kappa = \sqrt{V_0 - E_m} \end{aligned} \quad (4.3)$$

Por esta razón en las fronteras del pozo tenemos las condiciones:

$$f_m'(-L_w/2)/f_m(-L_w/2) = \kappa; \quad f_m'(L_w/2)/f_m(L_w/2) = -\kappa; \quad (4.4)$$

Ahora, únicamente falta encontrar el valor propio E_m y la función de onda $f_m(z)$ dentro del intervalo $-L_w/2 \leq z \leq L_w/2$. Estas se encuentran como soluciones del siguiente problema de contorno:

$$f_m'(-L_w/2)/f_m(-L_w/2) = \sqrt{V_0 - E_m}; \quad f_m'(L_w/2)/f_m(L_w/2) = -\sqrt{V_0 - E_m} \quad (4.5)$$

Para resolver el problema de contorno (4.5), se es utilizado el método de barrido trigonométrico en el cual, la ecuación diferencial (4.2) de segunda orden se reduce a otra ecuación de primer orden a través, del cambio de las variables:

$$f_m(z) = A(z) \cos \theta(z); \quad f_m'(z) = A(z) \sin \theta(z) \quad (4.6)$$

Derivando la primera relación y comparándola con la segunda ecuación se obtiene:

$$A'(z) = A(z) \frac{\sin \theta(z)}{\cos \theta(z)} [\theta'(z) + 1] \quad (4.7)$$

Por otro lado, sustituyendo las expresiones (4.6) en la ecuación (4.5) y utilizando la relación (4.7) se obtiene la ecuación diferencial para la función $\theta(x)$:

$$\theta'(z) = -[\sin^2 \theta(z) + (E_m - V_0(z)) \cos^2 \theta(z)] \quad \tan \theta(z) = \sqrt{V_0 - E_m} \quad (4.8)$$

Para encontrar la función $A(z)$ hay que sustituir la expresión (4.8) para la derivada en (4.7) y realizar la integración:

$$A(z) = \exp \left\{ \int_{-L_w/2}^z \sin \theta(x) \cos \theta(x) [1 - (E_m - V_0(x))] dx \right\}; \quad A(-L_w/2) = 1 \quad (4.9)$$

El problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden (4.8) puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro E_0 dado. Esta solución puede considerarse como una función de dos variables $\theta = \theta(z, E_0)$ y entonces la segunda condición de frontera en el problema (4.2):

$$\tan \theta(L_w/2, E_m) = -\sqrt{V_0 - E_m} \quad (4.10)$$

conduce a la ecuación trascendente para la energía E_0 . Entre todas las posibles soluciones se escoge solo una cuya energía satisface la ecuación (4.10).

4.3 ESPECTRO DEL ELECTRÓN LIBRE EN UN DQW Y UNA SL

Para caso del DQW utilizaremos masas efectivas diferentes en los compuestos del $GaAs$, $m^* = 0.067m_e$ y para el $Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, $m^* = 0.0919m_e$,

$\eta = \frac{m^*}{m_e}$, con el Hamiltoniano (4.1e). En las SL se tendrá en cuenta el uso de

masas efectivas uniformes en dichos compuestos y el Hamiltoniano (4.1a), para realizar los cálculos numéricos de las energías de enlace.

Como el potencial en la región externa de estas heterojunturas es constante $V(z)=V_0$ y en estas regiones las ecuaciones de la forma (4.2) tienen solución analítica.

$$f_m(z) = C_1 \exp\left(-z\sqrt{\eta(V_0 - E_m)}\right), \quad z > \frac{L_w}{2} \quad (4.11)$$

$$f_m(z) = C_1 \exp\left(z\sqrt{\eta(V_0 - E_m)}\right), \quad z < -\frac{L_w}{2} \quad (4.12)$$

Como las expresiones de la forma (4.2) para el DQW y la SL, pueden solucionarse solo numéricamente, procedemos a realizar la sustitución (4.6), permitiéndose de esta forma reducir el problema de contorno para la ecuación (4.2) de segundo orden, a un problema de Cauchy de primer orden

$$\theta'(z) + \text{sen}^2\theta(z) + \alpha(z)\cos^2\theta(z) = 0; \quad -L_w/2 < z < L_w/2; \quad \theta(-L_w/2) = \tan^{-1}\left(\sqrt{\eta(V_e - E_m)}\right) \quad (4.13)$$

donde $\alpha(z) = E_m - V(z)$

Al coser la solución (4.12) en la frontera de la región derecha del QW se obtiene la ecuación trascendente para diferentes estados y al coser las soluciones en la frontera de la región izquierda del QW se obtiene la condición inicial de (4.13):

$$\theta(L_w/2) = -\tan^{-1}\left(\sqrt{\eta(V_0 - E_m)}\right), \quad m = 0,1,2,\dots \quad (4.14)$$

donde la función $A(z)$ se da través de un procedimiento estándar y su forma es:

$$A(z) = A(0) \exp\left[\int_0^z \{[1 - \alpha(x)]\text{sen}\theta(x)\cos\theta(x)\} dx\right] \quad (4.15)$$

El problema de Cauchy (4.13) se resuelve numéricamente, encontrando el valor de la función en el punto $z = L_w/2$ para cada valor de la energía.

Seguidamente se escoge entre todas las soluciones una con energía que satisfaga la ecuación trascendente (4.14).

4.4 FUNCION DE PRUEBA PARA ESTADOS EXCITADOS DE UNA D^0 EN UN QW, DQW Y UNA SL.

Resolviendo la ecuación de onda, con el Hamiltoniano de la forma (4.1)

$$\hat{H}(\mathbf{r})f_m(\mathbf{r}) = E_m f_m(\mathbf{r}), \quad f_m(\mathbf{r}) = f_m(z)R_m(\rho)\exp(im\varphi) \quad (4.16)$$

Al aplicar separación de variables se obtienen las ecuaciones de onda (4.17) y (4.18).

La ecuación para la función $R_m(\rho)$ la cual puede ser escrita como:

$$\left(-\nabla^2 + \frac{1}{4}\gamma^2\rho^2 - i\gamma\frac{\partial}{\partial\varphi} \right) f_m(\mathbf{r}) = E_m f_m(\mathbf{r}) \quad (4.17)$$

con $f_m(\mathbf{r}) = R_m(\rho)e^{iK_z z}e^{im\varphi}$. Posteriormente se obtiene la expresión para $R_m(\rho)$

$$-\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\frac{dR_m(\rho)}{d\rho} + \left(\frac{\gamma^2\rho^2}{4} + \frac{m^2}{\rho^2} \right) R_m(\rho) = E_m(E_m - E_z + \gamma m)R_m(\rho) \quad (4.18)$$

Esta ecuación coincide con la parte radial de la ecuación de Schrödinger para el oscilador circular, la cual es conocida y puede ser reducida a la ecuación de Kummer (4.20) sustituyendo (4.19) en (4.18):

$$R_m(\rho) = \rho^{|m|} e^{-\frac{\gamma\rho^2}{4}} u(\rho); \quad x = \frac{\gamma\rho^2}{2}; \quad E_m - E_z - \gamma m = k^2 \quad (4.19)$$

$$xu''(x) + (|m| + 1 - x)u'(x) - au(x) - bu(x) = 0; \quad a = \frac{1}{2}\left(|m| + 1 - \frac{k^2}{2\gamma}\right) \quad (4.20)$$

La solución de la ecuación (4.20) que no presenta singularidades para $x=0$ es:

$$u(x) = {}_1F_1(a, |m| + 1; x) \quad (4.21)$$

donde a es definida por la relación (4.20). Además, la solución tiende a 0 a medida que $x \rightarrow \infty$, si la serie hipergeométrica es truncada

$${}_1F_1(a, c; x) = 1 + \frac{a}{c} \frac{x}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{x^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{a(c+1)(c+2)} \frac{x^3}{3!} + \dots \text{ para cualquier}$$

término n_r , por ejemplo para cualquier entero n_r se cumple la condición:

$$a + n_r = 0, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (4.22)$$

donde n_r es el número cuántico radial. Sustituyendo (4.19) y (4.20) en (4.22) se obtienen los niveles de energía correspondiente a diferentes estados de la ecuación (4.18):

$$E_{n_r, m} = E_z + \gamma m + \gamma(|m| + 1 + 2n_r) \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (4.23)$$

Sustituyendo (4.21) y (4.22), se obtiene las funciones de onda del electrón desacoplado:

$$R_{n_r, m}(\rho) = \rho^{|m|} e^{-\frac{\gamma \rho^2}{4}} {}_1F_1(-n_r, |m| + 1; \gamma \rho^2) \quad (4.24)$$

donde la función de Kummer es el polinomio de orden n_r . El estado base corresponde a $n_r = 0, m = 0$, cuya función está dada por:

$$R_{0,0} = \exp(-\gamma \rho^2 / 4); \quad E_{0,0} = E_z + \gamma; \quad f_{0,0}(\mathbf{r}) = f_0(z) \exp(-\gamma \rho^2 / 4) \quad (4.25)$$

Para todos los estados excitados correspondientes a n_r , la función hipergeométrica ${}_1F_1(-n_r, |m| + 1; \gamma \rho^2) = 1$, por consiguiente

$$E_{0,m} = E_z + \gamma m + \gamma(|m| + 1); \quad f_{0m}(\mathbf{r}) = f_0(z) \rho^{|m|} \exp(-\gamma \rho^2 / 4) e^{im\varphi}; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (4.26)$$

El conjunto de funciones (4.26) es utilizado para construir la función de prueba para los estados excitados de un D^0 .

4.5 ESPECTRO DE UNA D^0 DESCENTRADA EN UN QW, DQW Y UNA SL.

Para encontrar las energías de enlace $E_m(D^0)$ de diferentes estados se procede a resolver numéricamente la ecuación (2.6), donde las energías de enlace están dadas por la expresión:

$$E_m^{(b)} = E_z + \gamma(m + |m| + 1) - E_m(D^0). \quad (4.27)$$

La expresión (2.6) puede ser escrita como:

$$-\Phi''(r) - W(r)\Phi'(r) + \alpha(r)\Phi(r) = 0; \quad W(r) = \frac{J'(r)}{J(r)}; \quad \alpha(r) = -\left(E_b - \frac{2}{r}\right) \quad (4.28)$$

Obteniéndose las siguientes condiciones de contorno $\frac{\Phi'(0)}{\Phi(0)} = -1$; $\Phi(\infty) = 0$

para el problema de la ecuación diferencial de segundo orden (4.28). Considerando el comportamiento del jacobiano en los casos límites $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$, para los cuales $J_{mm}(r) \approx r^2$ y $J_{mm}(r) \approx r$, respectivamente.

(4.28) se reduce a un problema de Cauchy de primer orden:

$$\theta'(r) = -[\text{sen}^2\theta(r) + \alpha(r)\cos\theta(r) + W(r)\text{sen}\theta(r)\cos\theta(r)] \quad \theta(0) = -\frac{\pi}{4} \quad (4.29)$$

efectuando las sustituciones:

$$\Phi(r) = A(r)\text{Cos}\theta(r) \quad \Phi'(r) = A(r)\text{Sen}\theta(r) \quad \tan\theta(r) = \frac{\Phi'(r)}{\Phi(r)} \quad (4.30)$$

La solución de esta ecuación depende de la energía como parámetro, es decir: 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.

$$\theta(R_{\max}, E) = -\tan^{-1} \sqrt{-E_b} \quad (4.31)$$

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

$$A(r) = A(0) \exp \left\{ \int_0^z \left[(1 - \alpha(x)) \text{Sen} \theta(x) \text{Cos}(x) - W(x) \text{Sen}^2 \theta(x) \right] dx \right\} \quad (4.32)$$

se resuelve numéricamente, encontrándose el valor de la función en R_{max} para cada valor de la energía, luego se procede a escoger la solución que satisfaga a (4.31)

5. ISOMORFISMO DE LA DIMENSION FRACTAL CON EL MOMENTUM ANGULAR

Para analizar la dependencia de la dimensión fractal con la separación electrón-donadora (r), retomamos la expresión (2.8):

$$J_m(r) = 4\pi r^2 P_m(r), \quad P_m(r) = \frac{1}{2r} \int_{-r}^r f_0^2(z + \zeta) e^{-\gamma(r^2 - z^2)/2} (r^2 - z^2)^{|m|} dz, \quad (5.1)$$

El isomorfismo entre la dimensión fractal y el momentum angular, se es analizado a partir de la ecuación (2.9), efectuando las siguientes aproximaciones:

Para pequeños valores de la separación electrón-donadora, cuando $r \rightarrow 0$ la integral (5.1) puede ser aproximadamente, $P_m \rightarrow f_m^2(\zeta) r^{2|m|}$, para $r \rightarrow 0$ por lo tanto, la dimensión fractal en la vecindad de la donadora es igual a:

$$D^*(r) \rightarrow 3 + 2|m|, \quad r \rightarrow 0 \quad (5.2)$$

si las separaciones entre el electrón y la donadora son grandes, el comportamiento de la dimensión fractal en presencia de campo magnético y a campo magnético cero son muy diferentes. En el caso de campo magnético cero ($\gamma = 0$) la integral (5.1), puede ser evaluada aproximadamente $P_m \rightarrow r^{2|m|-1}$, para $r \rightarrow \infty$ por lo tanto, la dimensión fractal para grandes separaciones del electrón-donadora es igual a:

$$D^*(r) \rightarrow 2 + 2|m|, \quad r \rightarrow \infty; \quad \gamma = 0 \quad (5.3)$$

En presencia de campo magnético la integral (5.1) puede ser aproximada como $P_m \rightarrow \frac{1}{2\gamma} r^{2|m|-2}$, $r \rightarrow \infty$ luego, la dimensión fractal en la vecindad de la donadora es igual a:

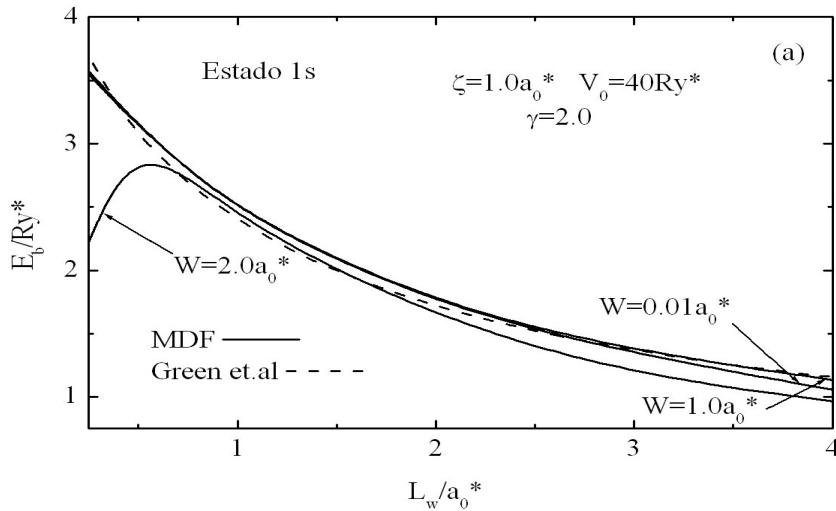
$$D^*(r) \rightarrow 1 + 2|m|, \quad r \rightarrow \infty; \quad \gamma \neq 0 \quad (5.4)$$

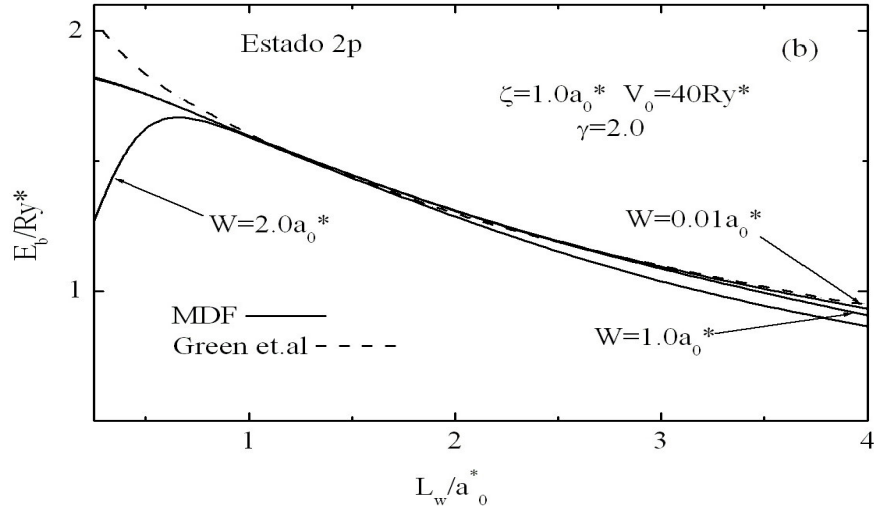
Analizando el caso particular cuando $\gamma = 0$ y la expresión (5.2) con $r \rightarrow 0$, se presenta un isomorfismo entre el momentum angular y la Dimensión Fractal. Es decir, un orbital m en un espacio con $D^*(r)$ es equivalente a un orbital $m+k$ en un espacio con dimensión $D^*(r) + 2k$; por ejemplo, si $k=1$ un orbital s ($m=0$) en un espacio con dimensión 3 es equivalente a un orbital p ($m=1$), en un espacio con dimensión 5. Análogamente uno puede ver el isomorfismo para los otros casos. Se encuentra que la D^* es isomórfica con el momentum angular $l \rightarrow l+1$, correspondiente a un aumento de la D^* : $D^* \rightarrow D^* + 2$.

6. ANALISIS Y RESULTADOS

En esta sección se incluyen los resultados de la aplicación del método de Dimensión Fractal (*MDF*) y las comparaciones con las referencias [16], [18,19].

Fig.4 Variación de la energía de enlace, de los estados *1s* (a) y *2p* (b), para una donadora neutra descentrada en un pozo cuántico de $Ga_{1-x}Al_xAs$ en función del ancho del pozo, para $\gamma = 2.0$, posición de la impureza $\zeta = 1.0a_0^*$, altura de la barrera $V_0 = 40R_y^*$ y diferentes formas de potencial: rectangular ($W=0.01a_0^*$), suave ($W=1.0a_0^*$) y parabólico ($W=2.0a_0^*$). La línea a trazos son los resultados de la Ref. [16] con una concentración de aluminio $x = 0.3$ y potencial rectangular $W=0.01a_0^*$.





En la Fig.4 (a) y (b) se muestran energías de enlace de los estados 1s y 2p en función del ancho del pozo L_w , para una impureza descentrada en el pozo de $GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, y en presencia de campo magnético $\gamma = 2$. En estos cálculos se desprecian las diferencias de masas efectivas del electrón en el pozo y en la barrera. Se usaron diferentes formas de potencial, tales como rectangular ($W=0.01a_0^*$), suave ($W=1.0a_0^*$) y parabólico ($W=2.0a_0^*$). Se puede ver que nuestros cálculos de la energía de la D^0 (líneas sólidas) en general se encuentran en buena concordancia con los resultados obtenidos en la Ref. [16] (líneas a trazos), en la cual usaron potencial rectangular. Las pequeñas diferencias donde los cálculos están ligeramente por encima de los nuestros se deben a lo siguiente:

- a) Ellos consideran la diferencia de masas efectivas del electrón en el $GaAs$ y $Ga_{1-x}Al_xAs$.
- b) Los efectos de los potenciales sobre los estados 1s y 2p son más notorios cuando el ancho del pozo $L_w \rightarrow 0$. En esta región el electrón no

diferencia entre un potencial u otro, para este caso la región de transición, comparada con el ancho del pozo es muy delgada, tendiendo a cero. Caso diferente es cuando el ancho de la barrera (W) es del orden del ancho del pozo, aquí la diferencia entre los perfiles de confinamiento es manifiesta, de otro lado la función de onda es más localizada en el pozo y esto conduce a un aumento de la energía de enlace debido a que la distancia promedio entre el electrón y la impureza disminuye.

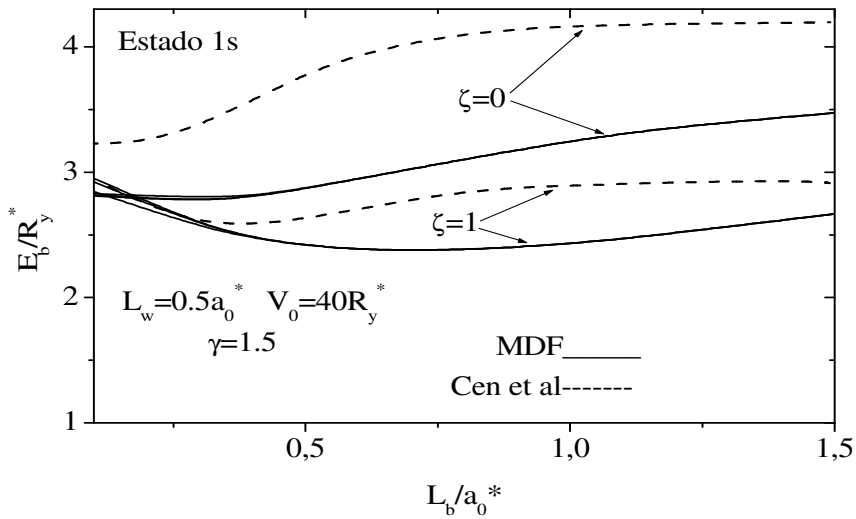
c) Para el caso de potenciales rectangular y de borde suave, vemos que estos presentan un comportamiento similar en la energía de enlace, con un valor máximo que da a entender que la función de onda está más confinada en el centro del pozo que en el borde de éste es decir, la impureza se encuentra más cerca al electrón.

d) Para el caso de potencial parabólico el valor máximo de la energía de enlace, al igual que los potenciales rectangular y de borde suave se manifiestan más cuando la impureza se encuentra centrada, pero este valor máximo decae más rápido que el de los otros potenciales a medida que el ancho del pozo se reduce, esto se debe a que la función de onda tiende a desbordarse más rápidamente que cuando se aplican potenciales rectangular y de borde suave, debido a que los efectos de confinamiento son mucho mayores al aplicar un campo magnético fuerte. Cuando el ancho del pozo es muy grande, la energía de la donadora tiende a un $1R_y^*$, correspondiente al caso de una impureza en el volumen debido a que para estos casos el confinamiento no produce ningún efecto; por el contrario, para pequeños valores de L_w , la energía de enlace de la D^0 tiende a $4R_y^*$, correspondiente a la energía de la D^0 en un espacio bidimensional. Al considerar el potencial parabólico el electrón se encuentra más cerca del ión donadora, originándose un máximo más rápido, queriendo decir esto que la función de onda está mas confinada en pozo, de hecho

entonces el desbordamiento de esta se acentúa mas, que para los casos de potenciales rectangular y de borde suave.

En el estado $2p$ Fig 4 (b), para anchos del pozo pequeños la función de onda en el plano x - y es reducida y esto disminuye la contribución del termino magnético en las ecuaciones (4.1) y (4.1e) las cuales son proporcionales a ρ^2 . Luego una reducción de este termino positivo conduce a un incremento en la energía de enlace. Tanto para el estado $1s$ y $2p$, el potencial parabólico presenta menos energía debido a que la impureza se encuentra descentrada.

Fig. 5 Energía de enlace del estado $1s$ en función del ancho de la barrera L_b de una impureza donadora D^0 para diferentes posiciones, centrada en un DQW y en el borde de la barrera de un DQW, con un campo magnético $\gamma = 1.5$, un ancho de pozo fijo $L_w = 0.5a_0^*$ y una altura de barrera $V_0 = 40R_y^*$. Las líneas a trazos y sólida son los resultados de la Ref. [18] y del MDF respectivamente.

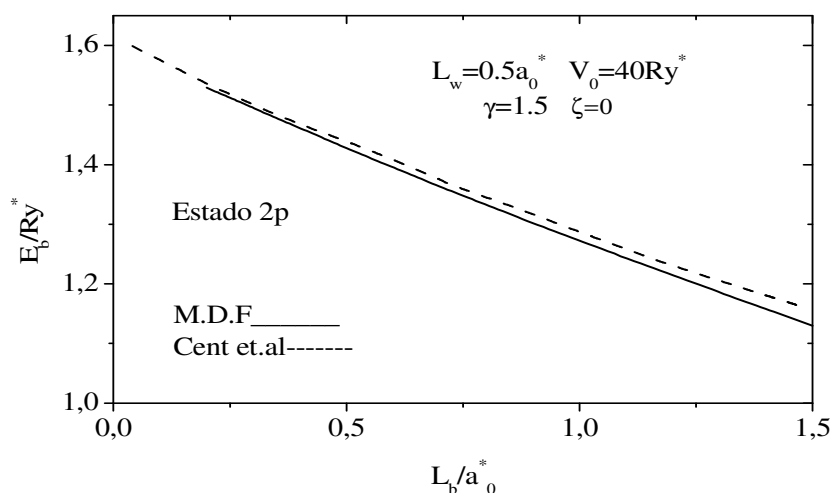


En la *Fig. 5*, se muestran las energías de enlace del estado $1s$ de un D^0 en un DQW , en función del ancho de la barrera L_b , para un ancho de pozo fijo $L_w = 0.5a_0^*$ y diferentes formas de potencial; rectangular ($W=0.01 a_0^*$), de borde suave ($W=0.1 a_0^*$) y parabólico ($W=1.0 a_0^*$), utilizando un campo magnético $\gamma = 1.5$ y una altura de barrera $V_0 = 40R_y^*$.

Las líneas a trazos corresponden a los resultados de la referencias [18], para una impureza ubicada en el centro ($\zeta = 0$) y en el borde de la barrera ($\zeta = 1$) de un DQW , usando mezcla de subbandas, es decir consideraron un modelo más realista. Las líneas sólidas corresponden a nuestros resultados sin considerar mezcla de subbandas.

La mezcla de subbandas hace que la energía de enlace se aumente e influya sobre la solución del potencial de confinamiento cuando se procede a coser las funciones de onda en los diferentes materiales. Se ve que la energía de enlace decrece cuando el ancho de la barrera es aumentado, hasta alcanzar un valor mínimo y entonces empieza a subir. La formación de estas curvas depende fuertemente de la penetración de la función de onda en el pozo adyacente. A medida que se aumenta el ancho de la barrera dentro de la heterojuntura se presentan dos efectos muy importantes, uno relaciona con la extensión de la función en toda la estructura y cuyo efecto es reducir la energía de enlace de la donadora. El otro efecto está relacionado con la probabilidad de encontrar el electrón en el pozo adyacente, el cual se reduce con el incremento del ancho de la barrera y consecuentemente la energía aumenta. El mínimo en la energía es alcanzado cuando estos dos efectos se anulan, el tunelamiento en la región central del pozo aumenta. Para anchos de barrera grandes, el efecto de acoplamiento entre electrón y la impureza son cada más reducidos, la función se extiende dentro de la barrera y en el pozo adyacente, de esta manera la energía de enlace empieza a subir.

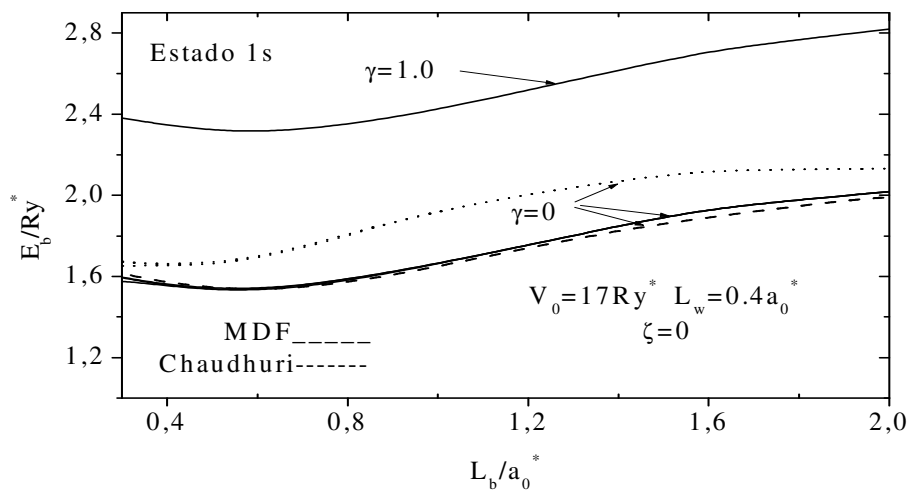
Fig.6 Energía de enlace del estado $2p$ en función del ancho de la barrera L_b , para una impureza donadora D^0 ubicada en el centro de la barrera en un DQW , con un campo magnético $\gamma = 1.5$ y un ancho de pozo fijo $L_w = 0.5 a_0^*$. Las líneas punteada y sólida son los resultados de la Ref. [18] y del MDF con una concentración $x = 0.3$.



La Fig. 6 muestra la energía de enlace del estado $2p$ en función del ancho de la barrera en un DQW . A medida que se incrementa el ancho de la barrera L_b la función de onda, diferente al caso de un solo pozo, se hace más extendida y la probabilidad de encontrar un electrón en la vecindad de la distribución de la donadora es casi independiente de la localización de ésta. Nuestros resultados, línea sólida se encuentran en acuerdo con los de la Ref. [18] (Línea a trazos). Para anchos de barrera $L_b \approx 0$, la energía de enlace decrece monótonamente desde un valor máximo, en este caso la impureza se encuentra más cerca al electrón. A medida que se incrementa el ancho de la

barrera, la distancia promedio de separación entre el electrón y la impureza se reduce, disminuyendo de esta forma la energía de enlace. En el estado 2p del *DQW*, la función tiende a ocupar el ancho proporcionado por el aumento de la barrera más el ancho de los dos pozos. Esto hace que la función se separe en funciones de un solo pozo y la probabilidad de encontrar el electrón cerca de la impureza se reduzca, las energías en este caso son vistas como las de un solo pozo.

Fig.7 Energía de enlace del estado 1s en función del ancho de la barrera L_b , para una impureza D^0 en un triple pozo (TQW) de $Ga_{1-x}Al_xAs$ con una concentración $x=0.1$, un ancho de pozo fijo $L_w=0.4a_0^*$, una altura de barrera $V_0=17R_y^*$, para una impureza centrada en el pozo, con $\gamma=0$ y $\gamma=1.0$. La línea a rayas y sólida son los resultados de la Ref. [19] y del MDF respectivamente.

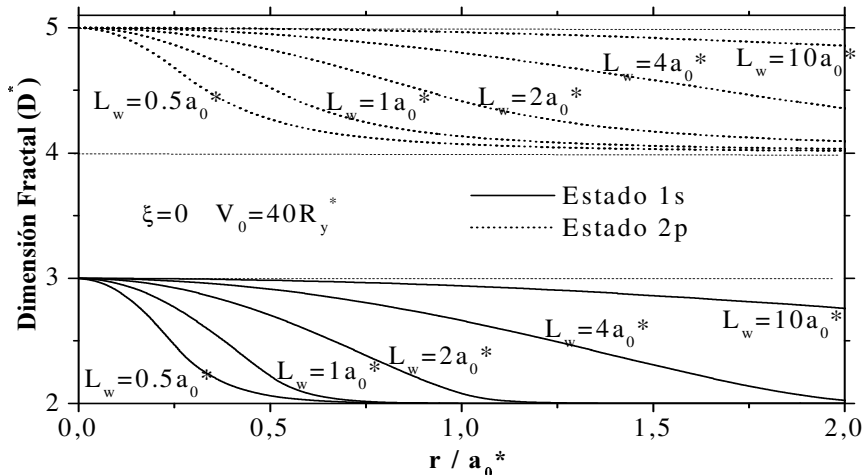


La Fig. 7, muestra los cálculos de la energía de enlace E_b para el estado base de un D^0 en un TQW de $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ en función del ancho de la barrera.

La línea punteada y sólida superior se obtuvieron para masas efectivas diferentes del electrón en los compuestos con $\gamma = 0$ y $\gamma = 1.0$ respectivamente. Las líneas inferiores sólida y a rayas correspondiente se obtuvieron para masas efectivas iguales del electrón en los compuestos con $\gamma = 0$.

Se puede ver que la energía decrece monótonamente, ello se debe que a medida que se aumenta el ancho de la barrera la distancia de separación entre el electrón y la impureza se incrementa, disminuyéndose de esta forma la interacción coulombiana y la energía de enlace. El mínimo de las curvas es atribuido al hecho de que al aumentar el ancho de la barrera desde cero inicialmente, el tunelamiento en la región central del TQW es grande, aumentándose la distancia electrón-impureza, razón por la cual la energía de enlace disminuye. Cuando el ancho de la barrera aumenta el tunelamiento hacia la región central disminuye, localizándose el electrón en la vecindad de la impureza, así la energía de enlace empieza a aumentar.

Fig.8 Dimensión fractal en función de la separación electrón-donadora para el estado 1s (línea sólida) y estado 2p (línea punteada), de una donadora centrada, en un QW de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As, de diferentes anchos.



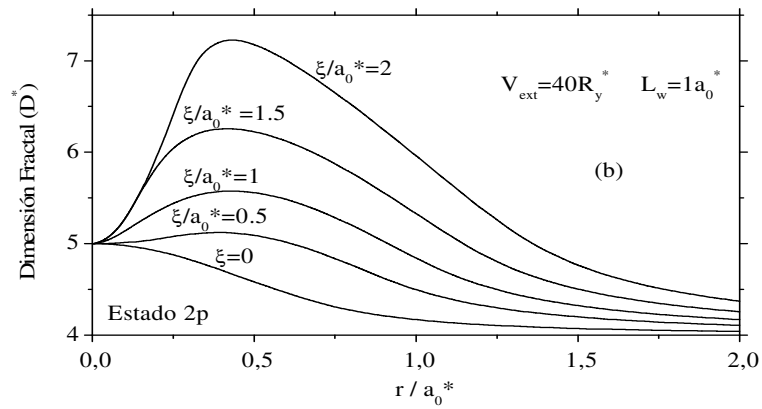
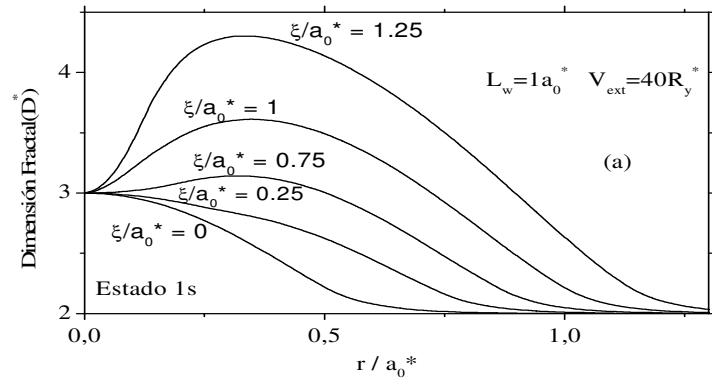
Se muestran los resultados de los cálculos para dimensión fractal $D^*(r)$ de una donadora D^0 centrada, para los estados $1s$ y $2p$ en un QW de GaAs-(Ga, Al) As con diferentes anchos de un pozo rectangular.

Vemos que la dimensión decrece monótonamente de 3 a 2 para los estados $1s$ Fig. 9 (línea sólida) y de 5 a 4 para los estados $2p$ (línea de puntos cortos), a medida que el ancho del pozo es mas largo el decrecimiento es mas suave, esto ha sido relacionado con la densidad del electrón libre en QW.

Para muy pequeñas separaciones del electrón-donadora (r), la interacción de Coulomb es dominante y la influencia del confinamiento es despreciable, así la distribución de carga en la vecindad de la donadora es similar a un átomo hidrogenoide; por ejemplo la carga dentro de la esfera de radio R se incrementa como R^3 para el estado $1s$ y como R^5 para el estado $2p$; siendo esto entonces objetos $3D$ y $5D$ dimensionales respectivamente.

Con el incremento de la separación electrón-impureza, el confinamiento gradualmente se incrementa, así la interacción de Coulomb va a ser despreciable y la distribución de carga llega a ser similar a la de un electrón libre en un QW. Por lo tanto, para muy largas separaciones entre el electrón-impureza, donde el radio R de la esfera llega a ser considerablemente mas grande que el ancho del pozo, la carga dentro de la esfera se incrementa como R^2 para el estado $1s$ y como R^4 para el estado $2p$, luego se tienen objetos $2D$ y $4D$.

Fig. 9 Dimensión fractal de una donadora descentrada en un QW de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As, en función de la separación electrón donadora, para el estado 1s (a) y el estado (2p).



Posteriormente se muestran los resultados para diferentes posiciones de una donadora en un QW de ancho $L_w = 1a_0^*$, estado $1s$ (Fig. 9 a) y $2p$ (Fig.9b).

Vemos que el comportamiento de $D^*(r)$, cambia esencialmente cuando la donadora es desplazada a la barrera, las curvas decrecen monótonamente, transformándose subsecuentemente en unas que inicialmente se incrementan pasando a través de un valor máximo, mas grande que 3, después este pico decrece monótonamente a 2. La ampliación de este desplazamiento desde el centro del QW es el valor más grande de la dimensión Fractal.

La razón del incremento de $D^*(r)$ en la parte inicial de las curvas Fig 9, es que el electrón tiende a ser localizado en el centro del QW , debido al fuerte confinamiento a largo del eje de crecimiento del pozo y la densidad de carga se incrementa a lo largo de esta dirección, desde la donadora al centro del QW .

Como la donadora es localizada cerca de la barrera, la distribución de carga para el estado $1s$ de la donadora llega a ser similar a un estado $2p_z$ y por lo tanto, la carga total dentro de la esfera de radio R se incrementa como R^5 , lo que corresponde a un estado $2p$. En esta dirección, la distribución de la densidad de carga y la dimensión fractal bajo se transforman cuando el numero magnético del estado es incrementado.

7. CONCLUSIONES Y PROYECCIONES

- Utilizando el MDF se determinó de una forma relativamente simple la energía de enlace del estado base y el primer estado excitado de una donadora neutra en un QW , DQW y SL . Con este método se pudo analizar, sin mayores complicaciones, el efecto de la forma del potencial de confinamiento sobre la energía de enlace, manifestándose un notable incremento de esta a medida que variamos el potencial desde rectangular a parabólico.
- A diferencia del método variacional de Ritz; con el MDF se pudo analizar el efecto de campos magnéticos fuertes sobre la energía de enlace de la D° en tales heteroestructuras sin modificar la función de prueba. Como puede notarse la información sobre dicho campo solo ha modificado el jacobiano del sistema (2.7) teniendo en cuenta (2.8), pero no altera la estructura del método.
- El efecto del campo magnético sobre la D° se manifiesta en el incremento paulatino de su energía de enlace, a medida que el campo aumenta, lo cual se manifiesta mucho más cuando la impureza se encuentra centrada. Es claro que este incremento se debe al confinamiento adicional que proporciona el campo. Esta es una de las razones por las cuales los campos magnéticos fuertes constituyen una buena herramienta para analizar otros tipos de donadoras que son muy inestables a temperatura ambiente, tales como las D° . Por esto se recurre a las bajas temperaturas o a los campos magnéticos fuertes para poder estudiarlas experimentalmente.
- La energía de enlace es muy susceptible a los cambios de dimensiones de la heteroestructura, aumentando a medida que el ancho del pozo disminuye. Este efecto es sumamente importante en la fabricación de Láseres de estado sólido,

en los cuales la longitud de onda de la luz emitida queda prácticamente determinada por el ancho del pozo.

- A medida que el ancho de la barrera aumenta, la función de onda de la donadora se hace más confinada dentro del pozo, aumentando así la probabilidad de encontrar el electrón cerca de la impureza cuando esta se encuentra centrada en el pozo. Razón por la cual se incrementa la energía de enlace.

- También se calculó la Dimensión Fractal de los orbitales electrónicos, la cual está relacionada con el crecimiento de la densidad de carga electrónica con respecto a la distancia de separación electrón-ión, en un espacio isotrópico.

- En los casos límite, $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$, con y en ausencia de campo se presentó un isomorfismo entre la Dimensión Fractal y el momento angular. Esta relación permite en estos casos límites, ver que el problema de una D° en un estado con momento angular m y dimensión Fractal D^* es completamente equivalente al de la D° en otro estado de momento angular y otra dimensión, según el caso. Tal como se indicó anteriormente en el ítem 5.

- En ausencia de campo magnético, la Dimensión Fractal decrece de 3 a 2 a medida que la distancia de separación electrón-ión aumenta desde cero hasta infinito. Lo cual evidencia que la barrera no tiene ningún efecto sobre la dimensionalidad cuando $r \rightarrow 0$, mientras que el carácter bidimensional solo se manifiesta si $r \rightarrow \infty$.

- A pesar de que en este trabajo no se consideró la mezcla de subbandas en el análisis de un DQW, el MDF se proyecta ser extendido para considerar tal efecto.

BIBLIOGRAFIA

- [1] J. Singh. *Physics of Semiconductor and their Heterostructures*. Singapore: McGraw-Hill, 1993.
- [2] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* New York: John Wiley and Sons, 1988.
- [3] D. K. Ferry, S. M. Goodnick, and M. Stephen. *Transport in noestructures*. New York: Cambridge University Press, 1999.
- [4] M. C. Roco, *Journal of Nanoparticle Research* 3, 5 (2001).
- [5] F. T. Vasco. and A.V. Kuznetsov. *Electronic States and Optical Transitions in Semiconductor Heterostructures*. New York: Springer-Verlag, 1999.
- [6] J. Sham, *Lecture to the Springe College onPhysics of Low-Dimensional Semiconductors*, Trieste (1990).
- [7] *Physics Today*, p. 26, 58, 74 (Febrero 1990).
- [8] P. Yu and M Cardona: *Fundamentals of Semiconductors* (Springer-Verlag, Cap.1Berlin, 1996).
- [9] G. Bastard, *Phys. Rev. B* 24, 4714 (1981).
- [10] R. L. Greene and K. K. Bajaj, *Solid State Commun.* 45, 825 (1983); *Phys. Rev. B* 31, 913 (1985).
- [11] S. V. Branis, G. Li and K. K. Bajaj, *Phys. Rev. B* 47, 1316 (1993).
- [12] A. Montes, C. A. Duque and N. Porrás-Montenegro, *J. Phys. : Condens. Matter* 10, 5351 (1998).
- [13] S. T. Pérez-Merchancano and G. E. Marques, *Phys. Status Solidi B* 212, 375 (1999); *Solid State Commun.* 110, 209 (1999).
- [14] G. Bastard, E, E. Méndez, L. L. Chang, and L. Esaki, *Phys. Rev. B* 28, 3241 (1982).
- [15] F. J. Betancur and I. D. Mikhailov, *Phys. Rev. B* 51, 4982 (1995).

- [16] R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **31**, 913 (1984).
- [17] F. J. Betancur, “*Modelación de espectros electrónicos para impurezas en heterojunturas de GaAs-(Ga,Al)As*”, tesis Doctoral, Cali, 1999.
- [18] J. Cen and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **46** 15280 (1992).
- [19] S. Chaudhuri, Phys. Rev. B **28** 4480 (1983).
- [20] E. Esaki, L. y Tsu R. IBM J. Res. Reo **14**, 61 (1969).
- [21] N. Nguyen, Ranganathan, B. D. McCombe, and M. L. Rustgi. Phys. Rev. B **44**, 3344 (1991).
- [22] N. Nguyen, J. X. Zang, Ranganathan, B. D. McCombe, and M. L. Rustgi. Phys. Rev. B **48**, 14226 (1993).
- [23] M. Pacheco, Z. Barticevic, A. Lagté. Physica B **302-303** (2001) 77-83
- [24] J. L. Zhu, J. H. Zhao and J. J. Xiong, Phys. Rev. B **50**, 1832 (1994).
- [25] M. El-Said, Physica B **202**, 202 (1994).
- [26] F. J. Betancur, I. D. Mikhailov and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. D **31**, 3391 (1998).
- [27] T. Pang and S.G. Louie, Phys. Rev. Lett. **65**, 1635 (1990); S.G. Louie and T. Pang, in *New Horizon in Low-Dimensional Electron Systems*, edited by H. Aoki (Kluwer Academic, Dordrecht, 1992), p.445.
- [28] A. González and I. Mikhailov, Int. J. of Mod. Phys. B **11**, 3469 (1997).
- [29] D. R. Herrick and F. H. Stillinger, Phys. Rev. A **11**, 42 (1975); F. H. Stillinger, J. Math. Phys. **18**, 1224 (1977).
- [30] P. Lefebvre, P. Christol and H. Mathieu, Phys. Rev. B **48**, 17308 (1993); **46**, 4092 (1992).
- [31] P. Lefebvre, P. Christol, H. Mathieu and S. Glutsch, Phys. Rev. B **52**, 5756 (1995).
- [32] A. Thilagam, Phys. Rev. B **55**, 7804 (1997); **56**, 4665 (1997); **56**, 9798 (1997).

- [33] M. de Dios-Leyva, A. Bruno Alfonso, A. Matos-Abiague and L. E. Oliveira, J. Phys: Condens. Matter **9**, 8477 (1997); A. Matos-Abiague, L. E. Oliveira and M. de Dios-Leyva, Phys. Rev. B **58**, 4072 (1998); E. Reyes-Gómez, L. E. Oliveira and M. de Dios-Leyva, J. Appl. Phys. **85**, 4045 (1999).
- [34] E. Reyes-Gómez, A. Matos-Abiague, C. A. Perdomo-Leiva, M. de Dios-Leyva and L. E. Oliveira, Phys. Rev. B **61**, 13104 (2000); E. Reyes-Gómez, A. Matos-Abiague, M. de Dios-Leyva and L. E. Oliveira, Phys. Status Solidi B **220**, 71 (2000); E. Reyes-Gómez, C. A. Perdomo-Leiva, L. E. Oliveira and M de Dios-Leyva, Physica E **8**, 239 (2000), L. E. Oliveira, C. A. Duque, N. Porrás-Montenegro and M. De Dios-Leyva, Physica B **302-303**, 72 (2001)
- [35] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature* (W. H. Freedman & Co., San Francisco, 1982).
- [36] X. F. He, Solid State Commun. **61**, 53 (1987); **75**, 111 (1990); Phys. Rev. B **42**, 11751(1990); **43**, 2063 (1991).
- [37] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, Phys.Stat.Sol. (b) **234**, No. 2, 590-610 (2002). **0**, 747 (2003).
- [38] I. D. Mikhailov, F. J. Betancur, R. A. Escorcía, and J. Sierra-Ortega, Phys.Rev. B **67** 115317 (2003).

8. ANEXO|

PROGRAMA UTILIZADO

```
c Este Programa calcula la energía de enlace de un  $D^0$  para el estado base ( $1s$ )
y primer excitado ( $2p$ ).
c excitado en función de ancho del pozo para diferentes:
c a) posiciones de impureza,
c b) campos magnéticos
c c) formas de potencial
c Off-center  $D^0$ 
c Estado  $1s$  para  $D^0$  en pozo
$large
$debug
c Impureza  $D^0$  en  $QW$ 
c MAIN PROGRAM
Parameter (NMM=1000)
Parameter (NM=400)
Parameter (m=3)
Parameter (m1=1)
Parameter (NP=100)
Parameter (nanch=1)
c parameter (ncamp=3)
Parameter (NBARR=8)
c-----
implicit double precision(a-h,o-z)
Character*10 name,name1
real xp(np),yp(m,np)
real xp1(nbarr),yp1(m1,nbarr)
c real tab1(ncamp,4)
c real tab1(nanch,4)
real tab1(NBARR,6)
dimension xondex(10000)
c dimension anch(nanch)
c dimension camp(ncamp)
dimension BARR(NBARR)
c-----
common /State/ Nr,mr
common /Pozo/ Wext, Vext, gam, Wbar, Rmax,AL,NPOZ,B
common /position/ Zi
common /onda/ fonde(NMM),xonde(NMM),Nmalle
common /Splne/ Be(NMM),Ce(NMM),De(NMM),Ee(NMM)
```

```

common
S0e(NM),rS0(NM),BS0(NM),CS0(NM),DS0(NM),ES0(NM)
common /front/ romax
common /Elibre/ E0
c-----
c external Veff,S0,Fright,Vpot,Fright1
external S0,Fright,Vpot,Fright1
c data anch/0.25,0.5,1.0,2.0,3.0,4.0/
c data anch/0.5/
data BARR/0.2,0.3,0.5,0.7,1.0,1.5,1.7,2.0/
c data camp/0.,1.,3./
c Definición de los archivos para la salida
write (*,*) ' Teclee el titulo archivo para salvar'
Write (*,*) ' los resultados del calculo '
read (*,'(a)') name1
c Si mr=0 estado es 1s, si mr=1 estado es 2p
write(*,*) ' estado base teclee 0, excitado -1 ?'
read (*,*) mr
open (1,file=name1)
pi=4.0d0*datan(1.0d0)
write(*,*) ' AL,Wbar,Vext,NPOZ -?'
read(*,*) AL,Wbar,Vext,NPOZ
write(*,*)'camp, posición de la impureza Zi..?'
c write(*,*) 'ancho, posición de la impureza Zi..?'
read(*,*) gam, Zi0
Write(1,*) ' Zi= ', Zi0,' NPOZ= ', NPOZ
Write(1,*) 'Vext= ',Vext,' Wbar= ', Wbar
Write(1,*) 'gam=', gam
do i=1,NBARR
Wbar=Wbar*aL/2.0
B=BARR(i)
xp1(i)=b
c B=2*AL
NBAR=NPOZ-1
WEXT=NPOZ*AL+NBAR*B
c Zi=Zi0*aL
c Centro de la barrera
Zi=Zi0
c do i=1,ncamp
c gam=camp(i)
c tab1(i,1)=gam
tab1(i,1)=BARR(I)
c Encontrar la energía y la función de onda del electrón libre

```

```

relerr=1.d-8
abserr=1.0d-8
ITMAX=200
Emin=0.0
Emax=Vext-0.1
Call Sweep1 (Fright1, Emin, Emax,
$ Energy, Fiout, Nmalle, xonde, fonde, Be, Ce, De, EE, ITMAX)
  E0=Energy
  write(*,*) 'E0= ', E0
  tab1(i,2)=E0
  write(*,*) 'DONORA NEUTRA'
c Graficar el potencial y función de onda del electrón libre
  zmin=-3*Wext/4.0
  zmax=-zmin
  h=(zmax-zmin)/(np-1)
  do ik=1,np
    z=zmin+h*(ik-1)
    xp(ik)=z
    yp(1,ik)=fz(z)
    yp(2,ik)=Vpot(z)/Vext
    yp(3,ik)=emas(z)
c    write(1,*) xp(ik), yp(1,ik),yp(2,ik)
  end do
  name='fun.pcx'
  call graphic(xp,yp,m,np,name)
c    Rmax=Zi+6*aL-2*gam
  Rmax=((npoz+1)*aL+(npoz-1)*b)/2.0
  if(Rmax.lt.3.0) Rmax=3.0
c Jacobiano
c Calculo de valores de logP0 (J0=r**2*P0)
  r0=0.0001
  r1=Rmax
  h=(r1-r0)/(nm-1)
  do ik=1,nm
    r=r0+h*(ik-1)
    rS0(ik)=r
    pp=s0(r)
    if (pp.lt.1.0d-8) pp=1.0d-8
    S0e (ik)=dlog (pp)
  end do
c Spline para la función J(r)
  CALL SPLINE (nm, rS0, S0e, BS0, CS0, DS0, ES0, KPR, INT)
c Impureza D0

```

```

        relerr=1.d-8
        abserr=1.0d-8
        ITMAX=200
        Emin=-5.0
        Emax=-0.001
c      rmax=8.0-gam-Wbar*aL
c      if(Rmax.lt.2.0) Rmax=2.0
c      write(*,*) 'DONORA NEUTRA'
c      read(*,*)
c-----
      Call Sweep(rmax,Fright,Emin,Emax,Relerr,Abserr,
$ Energy,Fiout,Nmalle,xondex,ITMAX)
      Eb=-Energy
      yp1(1,i)=Eb
      tab1(i,3)=Eb
      ED0=Energy+E0
      tab1(i,4)=ED0
      write(*,*) 'Eb= ',Eb
c      read(*,*)
      end do
c Llenar tablas en el archivo
      do j=1,NBARR
c      do j=1,ncamp
        write(1,44) (tab1(j,i),i=1,4)
        write(*,44) (tab1(j,i),i=1,4)
44      format(1x,f5.2,5f10.4)
      end do
      read(*,*)
      name='Eb.pcx'
      call graphic(xp1,yp1,m1,nbarr,name)
C      read(*,*)

C44      format(1x,f5.2,5f10.4)
        close(1)
        stop
        end
c TODO PARA POTENCIAL
c-----
c I. POTENCIAL DE CONFINAMIENTO
c-----
c función de paso suavizada
      function Step(r,R0,Wbar)
      implicit double precision(a-h,o-z)

```

```

if(r.le.R0-Wbar) then
  Step=0.0d0
else if(r.lt.R0) then
  y=(R0-r)/Wbar
  Step=(y*y-1.0d0)**2
else
  Step=1.0d0
end if
return
end

```

c-----

c Potencial de confinamiento con núcleo repulsivo

```

function Vpot(z)
implicit double precision(a-h,o-z)
  Vpot=Vmul(z)
return
end

```

c-----

C POTENCIAL DE CONFINAMIENTO PARA SUPERRED

C SUBROUTINA VMULTIPOZO(Z,ZF,NPOZ,VEXT,WBAR)

FUNCTION VMUL(Z)

implicit double precision(a-h,o-z)

common /Pozo/ Wext,Vext,gam,Wbar,Rmax,AL,NPOZ,B

common /Camp/ alfa

ZZ=DABS(Z)

C NPZ=2*NPOZ-2

C B=2*AL

NBAR=NPOZ-1

WEXT=NPOZ*AL+NBAR*B

W1=-WEXT/2.0

W2=WEXT/2.0

c write (*,*) wbar

VMUL=VEXT*STEP(Z,W2,WBAR)+VEXT*STEP(-Z,-W1,Wbar)

DO IL=1,NPOZ-1

C Z2N (PUNTOS PARES)

Z2N=W1+IL*AL+IL*B

C Z3N (PUNTOS IMPARES)

Z3N=W1+IL*AL+(IL-1)*B

if (z.lt.z2n) VMUL=VMUL+VEXT*STEP(Z,Z3N,WBAR)

if (z.gt.z2n.and.z.lt.(z2n+wbar))

\$ Vmul=Vmul+VEXT*STEP(-Z,-Z2N, WBAR)

c IF(ZZ.LT.WEXT/2) vMUL=VMUL+ALFA*ZZ

END DO

```

        RETURN
    END
c-----
C SUBROUTINA emas(z)
  FUNCTION emas(z)

    implicit double precision(a-h,o-z)
    common /Pozo/ Wext,Vext,gam,Wbar,Rmax,AL,NPOZ,B
        ZZ=DABS(Z)
    NBAR=NPOZ-1
    WEXT=NPOZ*AL+NBAR*B
    W1=-WEXT/2.0
    W2=WEXT/2.0
    emas=1.0
    de=-0.3
    emas=emas+de*STEP(Z,W2,WBAR)+de*STEP(-Z,-W1,Wbar)
    DO IL=1,NPOZ-1
C Z2N (PUNTOS PARES)
      Z2N=W1+IL*AL+IL*B
C Z3N (PUNTOS IMPARES)
      Z3N=W1+IL*AL+(IL-1)*B
      if (z.lt.z2n) emas=emas+de*STEP(Z,Z3N,WBAR)
      if (z.gt.z2n.and.z.lt.(z2n+wbar))
$      emas=emas+de*STEP(-Z,-Z2N,WBAR)
    END DO
    emas=1.0

    RETURN

```