

**ESPECTRO ELECTRÓNICO DE IMPUREZAS D^0 Y D^- CONFINADAS
EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS DE $GaAs-(Ga,Al)As$**

JOSÉ SIERRA ORTEGA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2004

**ESPECTRO ELECTRÓNICO DE IMPUREZAS D^0 Y D^- CONFINADAS
EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS DE $GaAs-(Ga,Al)As$**

Por

JOSÉ SIERRA ORTEGA

**Requisito Parcial Para Optar el Título de
Doctor en Física**

Director

Ph.D. ILIA MIKHAILOV

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2004

A mis adorados hijos:

Karen Vanessa

Keiny Tatiana

Edgar Jose

A mi esposa

Any Barros

A mi hermana

Johana Milena

AGRADECIMIENTOS

Quiero expresar mis sinceros agradecimientos

A la Universidad del Magdalena por haberme otorgado la comisión para adelantar mis estudios de Doctorado y por el apoyo que me brindaron durante el desarrollo de este trabajo.

Al Doctor Ilia Davidovich Mikhailov, director de esta tesis, mi profesor durante toda esta investigación, por su valiosa ayuda y por su permanente disposición para enseñarme y formarme en esta área de la física. Sin su apoyo hubiera sido imposible conseguir esta meta. A usted, mi gran e inolvidable maestro, amigo y colaborador incondicional mil y mil gracias.

Al Doctor Sergio Ulloa, Director del grupo de materia condensada de la universidad de Ohio, por sus valiosas discusiones a cerca de nuestro metodo, y tambien por su hospitalidad y apoyo para mi y mi familia durante mi pasantia en Athens, Ohio, USA.

Al M.Sc. Hernando Altamar, mi compadre, gran compañero y amigo, por su compañía y apoyo en los momentos difíciles.

Al los profesores Francisco Javier Betancur y Francisco García por sus consejos, colaboración y muestra de amistad.

A mis compañeros de Postgrado, por el apoyo y la colaboración que me brindaron durante el desarrollo de este proyecto.

A Dolcely Amador por estar siempre dispuesto a colaborar incondicionalmente en Santa Marta, pero sobre todo por su gran amistad.

A mi familia por su comprensión, compañía y apoyo

A todos los demás que son muchos...

TABLA DE CONTENIDO

	Pág.
RESUMEN	15
ABSTRACT	15
INTRODUCCIÓN	16
1. FUNDAMENTOS BÁSICOS	20
1.1 Heterojuntas semiconductoras	20
1.2 Aproximación de masa efectiva y el Modelo de Bastard	21
1.3 Impurezas D^0 y D^- en heterojuntas semiconductoras	22
1.3.1 Impurezas D^0	23
1.3.2 Impurezas D^-	24
1.4 Métodos utilizados para el estudio de impurezas D^0 y D^- en heterojuntas semiconductoras	25
1.4.1 Cálculos variacionales	25
1.4.2 Método de dimensión fraccionaria	27
1.4.3 Métodos exactos	28
2. MODELO TEÓRICO	29
2.1 Teoría de dimensión fractal	29
2.1.1 Método de dimensión fractal para un D^0 en una heterojunta semiconductoras	30
2.1.1.1 Renormalización de la ecuación de onda para el estado base de un D^0	31
2.1.2 Método de dimensión fractal para un D^- en heterojuntas semiconductoras	33
2.1.2.1 Renormalización de la ecuación de onda para el estado base de un D^-	33

2.1.3	Jacobianos y Dimensión fractal	34
2.1.3.1	Interpretación del Jacobiano y la dimensión fractal	35
2.1.4	Dimensión fractal para un D^0 en QWs, QWWs, y QDs	37
2.1.5	Comparación entre el método de dimensión fraccionaria y nuestro método de dimensión fractal	41
2.2	Método de barrido trigonométrico	43
2.3	Modelos de potencial	45
3.	CÁLCULOS Y RESULTADOS	47
3.1	ENERGÍA DE ENLACE DEL ESTADO BASE DE IMPUREZAS D^0 Y D^- EN DIFERENTES HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS	47
3.1.1	Pozos cuánticos (QWs)	48
3.1.1.1	Un D^0 y un D^- centrado en QWs	49
3.1.1.2	Un D^0 descentrado en un QW	52
3.1.1.3	Un D^- descentrado en un QW	58
3.1.2	Hilos cuánticos (QWWs)	59
3.1.2.1	Un D^0 y un D^- centrado en QWWs	62
3.1.2.2	Un D^0 y un D^- descentrados en un QWWs	66
3.1.3	Puntos cuánticos (QDs)	70
3.1.3.1	Un D^0 y un D^- centrado en QDs	71
3.1.3.2	Un D^0 y un D^- descentrados en un QDs	73
3.2	DENSIDAD DE ESTADO DE IMPUREZAS D^0 Y D^- EN DIFERENTES HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS	76
3.2.1	Densidad de estado de impurezas D^0 y D^- en un hilo cuántico cilíndrico	77
3.2.2	Densidad de estado de impurezas D^0 y D^- en un punto cuántico esférico	80
3.3	VARIACIÓN DE PARÁMETROS ESTRUCTURALES	82
3.3.1	Modelo de confinamiento con parámetros variables y banda de conducción no-parabólica	83
3.3.2	Método de teoría de perturbaciones	85
3.3.3	Solución de la ecuación de Poisson en un medio no homogéneo con una variación de la constante dieléctrica	92

3.3.4 Cálculo directo para un modelo con parámetros variable y banda de conducción no-parabólica	97
3.4 ESTADOS EXCITADOS DE IMPUREZAS D^0 Y D^- EN DIFERENTES HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS	105
3.4.1 Cálculo de estados excitados de un D^0 en heterojunturas semiconductoras con simetría axial	106
3.4.2 Cálculo de estados excitados de un D^0 en un punto cuántico esférico	112
3.4.3 Cálculo de estados excitados de un D^- en diferentes heterojunturas semiconductoras	113
4. CONCLUSIONES	117
BIBLIOGRAFÍA	118
ANEXOS	126

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Comparación de la energía (en Ry*) de enlace de un D^0 y D^- en un pozo cuántico de GaAs/Ga _{0.75} Al _{0.25} As, con resultados del método Monte Carlo [23] y el método variacional [29].	50
Tabla 2. Energías de enlace de un D^0 en un QW de ancho $2a_0^*$ y altura de barrera $80Ry^*$.	57
Tabla 3. Comparación entre nuestros resultados para la energía de enlace de un D^- en un QD esférico con potencial rectangular y los resultados del cálculo variacional [32]. Todas las energías están expresada en Ry*.	72
Tabla 4. Parámetros adimensionales del modelo.	84
Tabla 5. Energías de enlace de D^0 y D^- centradas en GaAs/Ga _{0.7} Al _{0.3} As de ancho 100Å para diferentes intensidades del campo magnético. En las primeras columnas son resultados de cálculo a través del método de Monte Carlo de la Ref. [23] y en las segundas columnas están nuestros resultados.	101

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Parte radial del Jacobiano $J(r)$, calculado en diferentes heterojunturas de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, como función de la separación electrón-ion r .	37
Figura 2. Dimensión fractal $D^*(r)$ como función de la separación electrón-ion r , para un donador en un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular, en el caso de campo magnético cero y para diferentes anchos W del pozo.	38
Figura 3. Dimensión fractal $D^*(r)$ como función de la separación electrón-ion r , para un donador en un QWW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular, en el caso de campo magnético cero y para diferentes radios R del hilo.	40
Figura 4. Dimensión fractal $D^*(r)$ como función de la separación electrón-ion r , para un donador en un QD de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular, en el caso de campo magnético cero y para diferentes radios R del punto.	40
Figura 5. Dimensión fraccionaria para un donador centrado en diferentes heterojunturas de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ como función del tamaño de la heterojuntura.	41
Figura 6. Dimensión fraccionarias como función del ancho de un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, para diferentes intensidades del campo magnético.	42
Figura 7. Energía de enlace de un D^0 centrado en un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, como función del ancho del pozo y para diferentes campos magnéticos.	43
Figura 8. Energía de enlace para el estado base de un D^- centrado en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Las líneas punteadas muestran los resultados del cálculo variacional tomados de la referencia [28] y los círculos abiertos representan los resultados con el método Monte Carlo[23] para un pozo de $GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As$, como función del ancho del pozo.	51
Figura 9. Energía de enlace como función del campo magnético para un D^- centrado en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Los círculos sólidos muestran los resultados de la referencia [33].	52
Figura 10. Sistema de coordenadas usado para el problema de una impureza donadora descentrada en un pozo cuántico.	53
Figura 11. Energía de enlace $E_b(D^0)$ como función del campo magnético, para	

un D^0 ubicado en las posiciones $\xi/a_0^* = 0.0, 0.25, 0.5$ y 0.75 dentro de un QW. Las líneas sólidas representan los resultados obtenidos minimizando la energía variacional con respecto al parámetro τ , y las líneas truncadas representan los resultados encontrados para el valor fijo $\tau = 0$. 55

Figura 12. Valor medio del desplazamiento del electrón desde el centro del QW, como función de la posición del ion, para diferentes intensidades del campo magnético. 56

Figura 13. Energía de enlace $E_b(D^0)$ como función del campo magnético, para un D^0 ubicado en las posiciones $\xi/a_0^* = 0.0, 0.5$ y 0.75 dentro de un QW. Las líneas sólidas representan los resultados obtenidos a partir de la ecuación (3.12), minimizando la energía variacional con respecto al parámetro τ . Las líneas punteadas representan los resultados encontrados a partir de la ecuación (3.10) para el valor fijo $\tau = 0$, mientras que las líneas truncadas representan resultados obtenidos a partir de la ecuación (3.10), pero minimizando el parámetro τ . 57

Figura 14. Energía de enlace del estado base de un D^- en QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de ancho 200\AA y altura de barrera 80 Ry^* , como función del campo magnético, y para diferentes posiciones del donador. Las curvas sólidas representan nuestros resultados, mientras que las curvas truncadas y punteadas y los puntos sólidos representan los resultados de la referencia [27]. 58

Figura 15. Diferentes modelos de potenciales de confinamiento en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$: (a) Potencial de doble escalón, (b) Potencial escalón y (c) potencial con núcleo repulsivo. 61

Figura 16. Energía de enlace de un D^0 como función del radio de un QWW de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ de longitud $L = 10a_0^*$ con potencial rectangular y para diferentes intensidades del campo magnético. 63

Figura 17. Energía de enlace para el estado base de un D^- como función del radio de un QWW de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ con potencial rectangular, para diferentes intensidades del campo magnético. 64

Figura 18. Energía de enlace de un D^0 como función del radio de un QWW coaxial de $GaAs/Ga_{0.8}Al_{0.2}As/Ga_{0.55}Al_{0.45}As$ (potencial doble escalón) de radio R , y para diferentes longitudes del hilo. 64

Figura 19. Energía de enlace de un D^0 como función del radio de un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ de radio R , para diferentes perfiles de la barrera de potencial. 65

Figura 20. Energía de enlace de un D^- como función del radio de un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ de radio R , para diferentes perfiles de la barrera de potencial. 66

Figura 21. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función de la posición

ξ_ρ del ion en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con potencial rectangular, para diferentes radios del hilo.	67
Figura 22. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función del radio de un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con dos diferentes modelos de potencial, rectangular (línea sólida) y suave (línea punteada).	68
Figura 23. Energía de enlace para el estado base de un D^0 y un D^- como función de la posición ξ_ρ del ion en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con los tres modelos de potencial, presentados en la figura 15(b).	68
Figura 24. Energía de enlace para el estado base de un D^0 y un D^- como función de la posición ξ_ρ del ion en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un núcleo repulsivo y para dos de los tres modelos de potencial, presentados en la figura 15(b).	69
Figura 25. Sistema de referencia usado para escoger una función de prueba tipo Bastard.	70
Figura 26. Energía de enlace de un D^0 centrado en un punto cuántico esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con potencial rectangular ($\lambda/R = 0.001$).	72
Figura 27. Energía de enlace para el estado base de un D^- centrado en un punto cuántico esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con dos diferentes formas de potencial: rectangular ($\lambda/R = 0.001$) y suave ($\lambda/R = 0.3$).	73
Figura 28. Energía de enlace como función de la posición ξ , de un D^0 confinado en un QD de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de radio $R = 3.0a_0^*$, y con tres diferentes modelos de potencial, correspondientes a $\lambda = 0.01, 1.0$ y $3.0 a_0^*$ (ver figura 15(b)).	74
Figura 29. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función de la posición del ion en QD esférico <u>strain-induced self-assembled</u> . Con potencial rectangular y para diferentes radios del núcleo repulsivo.	75
Figura 30. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función de la posición ξ , del ion en QD esférico con potencial rectangular y para diferentes radios del punto.	76
Figura 31. Densidad de estados de impurezas D^0 en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con los tres modelos de potencial presentados en la figura 15(b).	78
Figura 32. Densidad de estados de impurezas D^0 en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un núcleo repulsivo y para dos de los tres modelos de potencial presentados en la figura 15(c).	78

Figura 33. Densidad de estados de impurezas D^- en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con los tres modelos de potencial presentados en la figura 15(b).	79
Figura 34. Densidad de estados de impurezas D^- en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un núcleo repulsivo y para dos de los tres modelos de potencial, presentados en la figura 15(c).	79
Figura 35. Densidad de estados de impurezas D^0 en un QD esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un núcleo repulsivo y con un potencial rectangular.	80
Figura 36. Densidad de estados de impurezas D^- en un QD esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular.	81
Figura 37. Representación esquemática de los efectos de noparabolicidad de la banda de conducción y de la variación de masa efectiva en QW.	84
Figura 38. Energías de enlace de impurezas centradas D^0 como función del ancho de un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes modelos de confinamiento, rectangular, suave y parabólico con barrera finita.	86
Figura 39. Energías de enlace de un D^0 descentrado como función del ancho de un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes modelos de confinamiento: rectangular y parabólico con barrera finita.	87
Figura 40. Energías de enlace de impurezas D^0 localizadas sobre el eje de un QWWs cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes modelos de confinamiento: rectangular, suave y parabólico con barrera finita, como función del radio del QWW.	88
Figura 41. Energías de enlace de una impureza D^0 localizadas sobre el eje de un QWWs cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con potencial rectangular ($W=0.001R$), como función del radio del hilo, para tres intensidades del campo magnético.	89
Figura 42. Energías de enlace de un D^0 como función del radio externo de un nanotubo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ para el caso $R_{int} = 0.5 R_{ext}$ y para diferentes posiciones de la impureza.	90
Figura 43. Representación esquemática de cambio del perfil de función de onda del electrón en un nanotubo con la disminución del radio: a) radio grande, b) radio intermedio, y c) radio pequeño.	91
Figura 44. Energías de enlace de un D^0 en un nanotubo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, para diferentes razones de los radios interior y exterior en función de la distancia entre la impureza y eje de nanotubo.	91
Figura 45. Representación esquemática de una heterojuntura con la constante dieléctrica variable.	93

Figura 46. Coordenadas de tres puntos escogidas para calcular la integral (3.51).	95
Figura 47. Coordenadas de tres puntos escogidas para calcular la integral (3.53).	96
Figura 48. Energía de enlace de un D^0 centrado en un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función del ancho, calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva truncada) y con los parámetro variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).	102
Figura 49. Energía de enlace de un D^- centrado en un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función del ancho del pozo, calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva truncada) y con los parámetros variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).	103
Figura 50. Energía de enlace de un D^0 centrado en un QWW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función de la posición de impureza para dos diferentes radios de hilo cuántico, $0.5a_0$ * y $0.35a_0$ * calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva truncada) y con los parámetro variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).	104
Figura 51. Energía de enlace de un D^- centrado en un QWW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función de la posición de impureza para dos diferentes radios de hilo cuántico, $0.5a_0$ * y $0.35a_0$ * calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva truncada) y con los parámetro variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).	104
Figura 52. Dimensión fractal como función de la separación electrón-ion para los estados 1s y 2p de una impureza D^0 centrada en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QW con diferentes anchos.	108
Figura 53. Dimensión fractal como función de la separación electrón-ion para los estados (a) 1s y (b) 2p de una impureza D^0 descentrada en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QW y para diferentes posiciones del ion.	110
Figura 54. Energía de enlace como función de la distancia de la posición del ion hasta el centro de un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QW (a) para el estado 1s y (b) para el estado 2p.	111
Figura 55. Energía de enlace para el estado 2p de un D^0 centrado en un QWW en función del radio de este, para dos modelos de potencial: potencial rectangular (líneas sólidas) y doble escalón (líneas punteadas).	111
Figura 56. Dimensión Fractal como función de la separación electrón-ion en un QD con barrera infinita: (a) Para el estado base y algunos estados excitados de un D^0 ubicado en la posición $\xi = 0.5R$ y (b) para el estado base en diferentes posiciones.	113

TÍTULO: ESPECTRO ELECTRÓNICO DE IMPUREZAS D^0 Y D^- CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS DE $GaAs-(Ga,Al)As$ ¹

AUTOR: JOSE SIERRA ORTEGA²

Palabras claves: Sistemas de baja dimensionalidad, dimensión fractal, método variacional, energía de enlace, heterojunturas, puntos, hilos y pozos cuánticos.

Resumen

En este trabajo se desarrolla un nuevo método simple y eficiente el cual denominamos Método de Dimensión Fractal, para estudiar las energías de enlaces del estado base y algunos estados excitados de impurezas neutras (D^0) y negativamente cargadas (D^-), confinadas en heterojunturas semiconductoras de $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$. Se analizaron los efectos que sobre estos estados producen la forma del potencial, la variación de algunos parámetros estructurales, la no parabolicidad de la banda y la aplicación de un campo magnético. Partiendo del principio variacional, en este método los problemas originales de un D^0 y un D^- en una heterojuntura semiconductor, se reducen a unos similares en un espacio efectivo con dimensión fraccionaria y variable. La dimensión de este espacio se define como un parámetro de escalamiento que relaciona el radio de un conjunto de cajas esféricas con la densidad de carga dentro, la cual es inducida por el electrón libre en la heterojuntura. Usando esta definición encontramos expresiones explícitas para la dimensión espacial efectiva en un pozo (QW), hilo (QWW) y un punto cuántico (QD). Para resolver las ecuaciones de onda del electrón libre en la heterojuntura y para el átomo hidrogenoide en el espacio fraccionario efectivo, usamos el método de barrido trigonométrico. Además calculamos la densidad de estado de estas impurezas en diferentes heterojunturas.

¹ Tesis Doctoral.

² Facultad de Ciencias, Doctorado en Física, Director; Ph.D. Ilia Mikhailov.

TITLE: ESPECTRO ELECTRÓNICO DE IMPUREZAS D^0 Y D^- CONFINADAS EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS DE $GaAs-(Ga,Al)As$ ³

AUTHOR: JOSE SIERRA ORTEGA⁴.

Index words: Low dimensional systems, fractal dimension, variational method, binding energy, heterostructures, dots, wires and quantum wells.

Abstract

In this work is present a simple and efficient new method, which we call Fractal Dimension, for calculating the spectra of on- and off-center neutral (D^0), and negative (D^-) impurity, confined in a $GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs$ semiconductor heterostructure. Starting from the variational principle we reduce the problems of the on- and off-center D^0 and D^- in a semiconductor heterostructure to the similar ones in an isotropic effective space with variable fractional dimension. The dimension of this space is defined as a scaling parameter that relates the radii of a set of spherical boxes with the densities of charge within these boxes corresponding to the free electron ground state in heterostructure. Explicit expressions for the effective space dimensionality in a quantum well (QW), quantum-well wire (QWW) and a quantum dot (QD) are found by using this definition. To solve the wave equations for the free electron ground state in the heterostructure and for the hydrogen-like atom in the fractional-dimensional space we use the numerical trigonometric sweep method. The similar problem for a negative-hydrogen-like ion in the effective space is solved by using the three-parameter Hylleraas trial function. Our results are in a good agreement with ones from the variational and Monte Carlo methods. In addition, novel results for the D^- binding energy as a function of the cylindrical $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QWW radius and the magnetic field intensity are presented. We also calculate the density of the impurity states in a QWW and QD.

³ Doctorate Thesis.

⁴ Facultad de Ciencias, Doctorado en Física, Director; Ph.D. Iliia Mikhailov.

INTRODUCCIÓN

Estimulados por el interés de investigaciones fundamentales y aplicaciones tecnológicas, en las dos últimas décadas se han fabricado y analizado una gran variedad de sistemas semiconductores de baja dimensionalidad. Los semiconductores [1-3] tienen gran aplicación práctica debido al amplio rango de alteración de sus propiedades, cuando se les incorporan impurezas adecuadamente escogidas y en forma controlada. La escogencia de estas inhomogeneidades, se explotan en la actualidad para producir heterojunturas semiconductoras de baja dimensionalidad tales como, superredes, pozos (QW), hilos (QWW), y puntos cuánticos (QD). Estas heterojunturas se construyen mediante la deposición alternada de capas de materiales semiconductores con bandas prohibidas diferentes, colocadas de tal manera que se restringe el movimiento de los portadores de corriente, en una, dos y tres direcciones dando origen así, al confinamiento de partículas en dos, uno, y cero dimensiones.

Por tener dimensiones características comparables a la longitud de onda de De Broglie asociadas a los portadores de carga, estos materiales de la nueva generación (sistemas de baja dimensionalidad), operan en el régimen cuántico y son particularmente sensibles a las variaciones de escalas (atómicas) en geometría y composición. Debido al confinamiento cuántico, el cual cambia la dimensionalidad del espacio, se modifican las propiedades electrónicas y vibracionales de estos sistemas y por tanto exhiben propiedades físicas diferentes a la de los semiconductores en el volumen con cambios significativos en sus propiedades ópticas y de transporte [4-8]. Los estados ligados de los portadores de carga (impurezas aceptoras, donadoras neutras y cargadas, excitones etc.), en estas heterojunturas se hacen más estables y las líneas en el espectro de absorción se hacen mucho más finas y bien definidas lo que amplía el rango de posibilidades para el diseño y fabricación de dispositivos ópticos y electrónicos.

El análisis de las energías de los portadores de cargas y sus variaciones con el cambio de los tamaños de las heterojunturas y bajo la influencia de campos externos requieren unos 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.). Además las propiedades ópticas y de transporte de materiales semiconductores (tanto en el volumen como en sistemas de baja dimensionalidad) dependen fuertemente de la presencia de impurezas, por eso en las últimas décadas se ha incrementado el interés en el estudio de los efectos producidos por las impurezas donadoras neutras D^0 y negativamente cargadas, D^- en estos sistemas [9,10]. Bastard [11] fue el primero en estudiar teóricamente una impureza donadora neutra en un pozo cuántico usando la aproximación de masa efectiva. Después de esto, el modelo de

Bastard se ha extendido y se ha aplicado para analizar las propiedades de una impureza (D^-) que es el análogo del ión H^- , uno de los más simples sistemas de pocas partículas con un solo estado ligado [12]. Desde los primeros días de la mecánica cuántica se ha establecido que la correlación electrón-electrón juega un papel muy decisivo en el enlace de un segundo electrón [13,14]. En 1958, Lampert [15] fue el primero en sugerir la existencia de donadores negativamente cargados en semiconductores en el volumen, pero la evidencia experimental concerniente a este hecho llegó a estar disponible mucho tiempo después, debido a que como la energía de enlace del D^- es muy pequeña (corresponde a aproximadamente el 5.55% del correspondiente valor para una impureza D^0 [16]), este puede ser formado en semiconductores en el volumen solo bajo condiciones metaestables [17]. La situación cambia radicalmente en las heterojunturas semiconductoras, donde debido a un confinamiento fuerte, la energía de enlace del D^- se incrementa de manera que estos sistemas pueden observarse experimentalmente en condiciones de equilibrio, bajo la acción de un campo magnético hasta en temperatura ambiente [18-22].

Los efectos de confinamiento cuántico sobre la energía de enlace tanto de impurezas D^0 como D^- en diferentes heterojunturas semiconductoras han sido analizados en un considerable número de investigaciones teóricas [21-33]. Los métodos Monte Carlo y variacional se han usado para calcular la energía de enlace del estado base de un D^- en pozos y puntos cuánticos. En el cálculo variacional para D^- en QW y QD se ha usado función de prueba tipo Chandrasekhar y modificado. Por ejemplo, en los trabajos de las referencias [29,33] se usó una versión simplificada de la función de prueba tipo Chandrasekhar, la cual permitió reducir el orden de las integrales multidimensionales considerando la correlación electrón-electrón solo en el plano perpendicular al eje de crecimiento de la heterojuntura. Sin embargo, se sabe de la teoría de los sistemas atómicos con dos electrones que la mejor concordancia entre los resultados teóricos y experimentales ha sido obtenida usando una función de prueba tipo Hylleraas, con la cual el número de parámetros lineales se puede aumentar sin ninguna restricción [12,13]. Esta función de prueba fue usada también para calcular la energía del estado base de un D^- en semiconductores en el volumen, usando 35 parámetros lineales variacionales [16]. Pero desafortunadamente la ventaja de esta función de prueba desaparece para el D^- en heterojunturas semiconductoras con un potencial de confinamiento anisotrópico, debido al incremento en el número de integrales multidimensionales que se deben computar en cada paso del procedimiento variacional. Sin embargo uno puede aprovechar la ventaja de las funciones de Hylleraas usando un procedimiento matemático, el cual permite considerar un medio real anisotrópico como si este fuera isotrópico pero con una dimensión reducida no entera.

Este enfoque fue primero aplicado por He [34], para analizar problemas del estado sólido. He estudió las transiciones ópticas en semiconductores fuertemente anisotrópicos utilizando para el exciton, el Hamiltoniano hidrogenoide en un espacio efectivo de dimensión fraccionaria propuesto por Stillinger [35]. Esta idea de sustituir el espacio real anisotrópico, por otro isotrópico, pero de dimensión reducida fue más tarde aplicada por Lefebvre y co-investigadores [36-38] para analizar los estados de energías de un exciton y el espectro de absorción en QWs y QWWs. Ellos consideraron la dimensión fraccional como un parámetro fenomenológico relacionado con la geometría de la heterojuntura y usaron en

sus cálculos una simple dependencia exponencial de este parámetro sobre la distancia promedio entre electrón y el hueco en el estado libre. Recientemente Oliveira y co-investigadores [39-40] propusieron un método diferente para determinar la dimensión fraccionaria apropiada en QWs, QWWs, QDs y superredes (SLs), ajustando la energía del estado base de un modelo hidrogenoide isotropico en un espacio de dimensión fraccional, al valor correspondiente en un sistema tridimensional real. En la última década el modelo de espacio con dimensión fraccionaria, ha sido exitosamente usado para describir propiedades de donadoras poco profundas y excitones, espectro de absorción e interacción exciton-fonon en heterojunturas semiconductoras. Sin embargo, hasta ahora este simple método no ha sido aplicado para estudiar las propiedades de las donadoras negativamente cargadas. Esto debido tal vez, al hecho de que los efectos de correlación relacionados con la repulsión entre los dos electrones en este sistema sugieren la aplicación de métodos que no utilicen las aproximaciones auto consistentes, en las cuales la dimensión fraccionaria se toma como fija para todas las partes de la heterojuntura. El problema de un D^- requiere de una definición más rigurosa de la dimensión fraccional, la cual debe tomar en cuenta su variación local.

El concepto de dimensión fraccionaria fue introducido por Mandelbrot [41], quien fue el primero en estudiar objetos geométricos con estructura auto similar, dándoles a ellos el nombre de fractales. La dimensión fractal en la teoría de Mandelbrot se define como un parámetro de escalamiento, el cual relaciona la masa del objeto a medir, con su tamaño, por un conjunto de cajas cuya forma reproduce la geometría del objeto y cuyo tamaño se aproxima gradualmente a cero. La fórmula propuesta por Mandelbrot da el mismo valor de la dimensión fraccionaria para todas las partes de los fractales exactos. Para estos fractales en coordenadas esféricas, la dependencia del Jacobiano con el radio que describe el escalamiento, se define a través de una función potencial $J \sim r^n$ con n entero o fraccionario. En contraste la densidad de carga dentro de una heterojuntura no puede ser considerada como un objeto auto similar y por consiguiente su dimensión real puede ser definida solo localmente y no en todo el espacio y la dependencia del Jacobiano con r , no es una función potencial. Desde nuestro punto de vista, el método de dimensión fraccionaria que se ha usado hasta ahora solo se puede considerar como una aproximación donde la dimensión fraccionaria (definida solo como un promedio) se introduce para heterojunturas que no son objetos auto similares y por lo tanto se requiere un análisis adicional para aclarar los limites de aplicación de este método.

Según la teoría de Mandelbrot, la auto similitud de un objeto o de un proceso puede ser relacionada con la dependencia del Jacobiano con el tamaño del objeto: si esta dependencia se describe a través de una ley de potencia, donde el exponente de esta ley sea entero o fraccionario, el objeto puede considerarse como auto similar. Por ejemplo, si una ecuación diferencial que define alguna característica de un objeto, contiene el Laplaciano en coordenadas esféricas con el Jacobiano que depende del radio como r^{D-1} , entonces este objeto puede ser considerado como auto similar (fractal), con dimensión fraccionaria D siendo D entero o fraccionario. Con el objetivo de buscar la posibilidad de describir las impurezas como objetos con una dimensión fraccionaria, en este trabajo, presentamos un procedimiento variacional general, en el cual las ecuaciones de onda para un D^0 y un D^- centrados y descentrados en una heterojuntura semiconductoras con características

fuertemente anisotrópicas son reducidas a unas similares en un espacio efectivo isotrópico con un Jacobiano cuya dependencia con el tamaño de la heterojuntura, en general no es una función potencial. El Jacobiano de la ecuación de onda está dado por la distribución radial de la densidad de carga correspondiente al estado base del electrón libre en la heterojuntura. Para dar una interpretación geométrica a este resultado, consideramos la densidad de carga como un objeto fractal y analizamos un conjunto de cajas esféricas con el centro en la posición de la impureza. Siguiendo un procedimiento a partir de la definición de Mandelbrot, definimos la dimensión de este objeto como un parámetro de escalamiento que relaciona la carga de la caja con el radio de la misma. Como la dependencia del valor de la carga con el radio de la esfera en la heterojuntura no tiene la forma de una ley potencial, la dimensión fraccionaria en nuestro procedimiento solo puede definirse localmente. A pesar de que encontramos que este objeto puede considerarse como auto similar solo aproximadamente, llamamos a este procedimiento como el *método de dimensión fractal* ya que la dimensión la definimos partiendo de la teoría de Mandelbrot. Uno de los méritos de este método es que proporciona un algoritmo unificado para realizar los cálculos de la función de onda y la energía de sistemas de pocas partículas, el cual puede ser aplicado a diferentes heterojunturas con forma arbitraria.

1. FUNDAMENTOS BÁSICOS

1.1 HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

En las dos últimas décadas se han desarrollado un gran número de investigaciones teóricas y experimentales en nanoestructuras semiconductoras o sistemas de baja dimensionalidad QWs, QWWs, QDs, y SLs compuestos por más de un material semiconductor con propiedades diferentes en su composición. El inicio de esta nueva época de la nanotecnología, se dio con el trabajo de L. Esaki y R. Tsu, [42] quienes, analizaron las propiedades de una superred, fabricada a partir de dos semiconductores bases (A y B) con diferentes anchos de bandas prohibidas, dispuestos en forma de emparedado (ABABA...). Para formar una heterojuntura semiconductoras con interfaces perfectas, se requiere que los materiales utilizados para formarlas tengan una estructura cristalina similar y parámetros de red muy parecidos, de manera que para cumplir con este objetivo, frecuentemente se utilizan los compuestos de los grupos III-V, sustituyendo parcialmente uno de los componentes de estos compuestos por otro átomo del mismo grupo.

La diferencia de las bandas prohibidas produce un salto de potencial en las interfaces y de esta manera se forma un pozo de potencial en el cual se pueden confinar los portadores de corriente, tanto en estado libre como ligados. Estos confinamientos permiten variar en forma controlada las longitudes de ondas de De Broglie de los estados correspondientes y de esta manera modificar los espectros de absorción y de radiación, lo cual permite muchas aplicaciones de estos materiales en Optoelectrónica, donde se requieren particulares longitudes de ondas para hacer un mejor uso de medios tales como las fibras ópticas. Debido a que las regiones activas de las heterojunturas están en las interfaces o cerca de ellas, es necesario que estas no tengan imperfecciones que dispersen los portadores de carga cuando viajan a través de ellas. Por esto es importante y se prefiere que los dos materiales que se juntan tengan constantes de red iguales o aproximadamente iguales.

Un amplio rango de materiales III-V han sido investigados por sus propiedades semiconductoras, aunque solamente unos pocos son comúnmente usados en heterojunturas. Para aumentar el rango de propiedades y lograr los requerimientos necesarios, también se han utilizado aleaciones entre varios compuestos, de los cuales el más notablemente utilizado ha sido la aleación $Al_xGa_{1-x}As$, la cual no solo tiene interés en la investigación sino que también es de gran utilidad en la tecnología.

La dependencia de la constante de red de una aleación ternaria con la concentración x de una tercera componente de la aleación, esta usualmente dada por una fórmula de

interpolación lineal que relaciona las constantes de red de sus constituyentes binarias. Esta fórmula se conoce como ley de *Vegard*, la cual predice, por ejemplo que la constante de red del $Al_xGa_{1-x}As$ está dada por la fórmula $xa_{AlAs} + (1-x)a_{GaAs}$. Las redes cristalinas del $AlAs$ y el $GaAs$, tienen constante de red muy parecidas, en este caso la constante de red de la aleación ternaria, cambia en menos del 0.15% como función de la concentración x . Esta es una de las razones, por las cuales estos materiales son muy usados en dispositivos de altas velocidades.

Para la fabricación de nanoestructuras semiconductoras, se han desarrollado varias técnicas de crecimiento, con el objetivo de que el nuevo material tenga propiedades novedosas y con el menor número de deformaciones posibles en la interfase. Entre estas técnicas se destacan las técnicas de haces moleculares [43], la deposición metal-orgánica de vapor químico [44], litografía basada en rayos moleculares [45] y la epitaxia de fase líquida [46], entre otras. Con estas técnicas ha sido posible crecer diferentes sistemas de baja dimensionalidad tales como, pozos (QW), hilos (QWW), y puntos cuánticos (QD), en los cuales, como ya mencionamos en la introducción, el movimiento de los portadores es restringido en una, dos y tres direcciones respectivamente, por lo cual es común referirse a estos sistemas como bi- uni- y cero-dimensionales respectivamente.

Estos materiales de la nueva generación, se pueden utilizar en el diseño y construcción de nuevos dispositivos en: Optoelectrónica, Microelectrónica, Comunicaciones y la Metrología. Debido a la reducción de la dimensionalidad las estructuras con confinamiento cuántico, exhiben una amplia variedad de propiedades ópticas [4,5] con relación a los materiales semiconductores en el volumen y esto se debe a la reducción de la dimensionalidad, tales como el efecto Hall Cuántico, transiciones metal-aislante y localización de electrones, que están íntimamente relacionados con campos magnéticos intensos [6] y estados de impurezas centradas y descentradas en multipozos cuánticos [7,8]. Estos efectos han dado origen, entre otros, a: LED, Células Fotoeléctricas, Transistores, Chips, Pilas Solares, Detectores de rayos X, Láser Semiconductores, Moduladores, Receptores de Microondas (registran señales procedentes de las antenas de los satélites), Diodos Láser (la base del CD), etc.

1.2 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA Y EL MODELO DE BASTARD

Para analizar el movimiento de un portador de carga en un semiconductor, la principal herramienta utilizada, ha sido la llamada “aproximación de masa efectiva” (AME), en la cual se asume que la estructura de banda de los semiconductores cristalinos puede ser en gran parte ignorada y que las propiedades físicas de semiconductores depende solamente de los portadores de carga que se ubican en el extremo de cada banda. Lo que básicamente se hace en esta aproximación, es ignorar el potencial periódico de la red reemplazando la masa real de los portadores de carga por un tensor de masa cuyos elementos son determinados

por la estructura de banda no perturbada. Esta teoría inicialmente fue limitada casi enteramente a los casos donde la banda relevante es simple y tiene su punto más bajo en el centro de la primera zona de Brillouin, pero más tarde Kohn y Luttinger [47] la ampliaron para aplicarla en los casos donde un mínimo de la banda no está en el centro de la primera zona de Brillouin y también a las bandas degeneradas. Aun cuando la aproximación de masa efectiva tiene varias limitaciones entre las cuales, una de las más importantes está relacionada con la forma del potencial periódico, la cual no puede ser abrupta [48], afortunadamente las investigaciones han mostrado que la aproximación es eficiente y generalmente exitosa, aunque se debe tener particular cuidado cuando se calculan los elementos de matriz, en el caso de bandas degeneradas.

El pionero en la aplicación de la aproximación de masa efectiva para el estudio de los espectros de impurezas donadoras en heterojunturas semiconductoras fue Bastard [11], quien asumió que este método se podía aplicar en heterojunturas semiconductoras, a pesar de la presencia en el Hamiltoniano del sistema de un potencial de confinamiento que varía en forma abrupta en las interfaces de la nanoestructura. El problema de aplicabilidad de la AME a heterojunturas semiconductoras fue discutido posteriormente en una serie de publicaciones [49-50] donde fue demostrado que los saltos bruscos de potencial en las junturas no afectan esencialmente a los estados electrónicos cuya probabilidad de encontrarse en esta región es suficientemente pequeña. Para analizar el espectro de una impureza donadora confinada en QW Bastard en el marco AME aplicó el método variacional, y consideró un modelo de pozo cuántico con un potencial rectangular y barrera infinita. Como función de prueba el utilizó el producto de la solución exacta de la ecuación de Schrödinger $f_k(z)$ para un electrón en QW sin impureza con una función exponencial $e^{-\alpha r}$, donde α un parámetro variacional. Posteriormente el mismo Bastard y otros autores, generalizaron los resultados para barrera finita. Este modelo, conocido como el modelo de Bastard para el pozo cuántico con barrera infinita, a pesar de su sencillez, da resultados en concordancia con el experimento y ha dejado claro, hasta ahora, que la energía de enlace, E_b de una impureza depende fuertemente de la geometría de la estructura, la posición de la impureza, del número de pozos, del campo magnético, de la no parabolicidad en la banda de conducción, de las diferencias de masas efectivas, constantes dieléctricas de las heterojunturas y del tipo de potencial empleado. El modelo de Bastard también se puede extender al estudio de impurezas cargadas negativamente D^- y a una gran variedad de diferentes complejos formados por dos o más portadores de carga, tales como: triones, excitones, biexcitones, D_2^+ , D_2^0 , etc.

1.3 IMPUREZAS D^0 Y D^- EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

Como ya hemos dicho, la utilidad de los dispositivos semiconductores depende en gran parte de la habilidad para controlar las propiedades electrónicas que resultan al introducir impurezas dentro de un material base. Para las impurezas sustitucionales cuya valencia

difiere de la valencia del átomo sustituido (donadoras y aceptadoras) el potencial de perturbación que produce esta sustitución se puede dividir en dos partes: una parte es la interacción Coulombiana con apantallamiento la cual puede considerarse como potencial de largo alcance y otra parte es un potencial de corto alcance dentro de la celda central. Las impurezas se clasifican como poco profundas o profundas, dependiendo de si su enlace esta dominado por el potencial de largo alcance o por el potencial de corto alcance, respectivamente. En el primer caso los estados acoplados de portadores de carga tienen una energía de enlace muy pequeña comparable con kT , donde T es la temperatura ambiente y por eso estos estados son estables solo cuando la temperatura es baja. Los niveles energéticos de estos estados están ubicados en la brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción cerca de una de estas bandas de tal manera que la distancia hasta la banda respectiva es mucho menor que la brecha. En esta trabajo nosotros solo nos limitamos al estudio de impurezas poco profundas y específicamente a impurezas D^0 y D^- confinadas en heterojunturas semiconductoras y bajo la aplicación de un campo magnético. Por esta razón, en esta sección queremos hacer una breve descripción de los modelos que se utilizan para analizar los niveles energéticos de estas impurezas.

1.3.1 Impurezas D^0 . Una impureza donadora neutra (D^0), dentro de un cristal semiconductor (por ejemplo GaAs), se considera como un átomo hidrogenoide en el cual el electrón, se encuentra débilmente ligado a un ión fijo de carga $+e$, debido a que la distancia promedio entre el electrón y el ión ($\sim 100 \text{ \AA}$ en el GaAs) cubre un número considerable de átomos. Este aumento significativo de la separación entre electrón y el ión se debe a dos factores, por un lado al muy pequeño valor de la masa efectiva de los portadores de carga y al muy grande valor de la constante dieléctrica, por otro lado. Tanto el electrón como el ión en los semiconductores están apantallados y la interacción entre ellos es disminuida por el campo eléctrico de las cargas inducidas en la polarización de los átomos del cristal. Este apantallamiento en el modelo de Bastard se describe a través de la constante dieléctrica ϵ , del semiconductor y el potencial para la interacción Coulombiana se puede escribir como:

$$V_c = \frac{|e|}{\epsilon r} \quad (1.1)$$

Para analizar el movimiento del electrón en una heterojuntura semiconductor hay que tener en cuenta que el campo eléctrico está formado por el potencial periódico de la red, el potencial de confinamiento $V(\vec{r})$ que describe los saltos de potencial en las junturas, más el potencial (1.1) producido por el ión impureza. En AME el efecto del potencial periódico se manifiesta en la sustitución de la masa libre del electrón por una masa efectiva m^* y por eso la ecuación de Schrödinger para el electrón es:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + V(\vec{r}) \right) \Psi = E\Psi \quad (1.2)$$

Si consideramos el problema de una impureza D^0 , ubicada en cualquier lugar dentro de una heterojuntura semiconductor (tales como un QW, QWW, QD, o una SL), en presencia de

un campo magnético externo, se tiene que el Hamiltoniano para este problema en el marco de la AME para banda parabólica no degenerada, se escribe como:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{\xi}|} + V(\vec{r}) \quad (1.3)$$

donde $\vec{\xi}$, es la posición del ión y $V(\vec{r})$ es el potencial de confinamiento. El problema de valores y funciones propias para el Hamiltoniano (1.3) tiene solución exacta solo en algunos casos especiales, particularmente para una impureza en el bloque, donde $V(\vec{r}) = 0$. En este último caso la solución del problema esta dada por las funciones hidrogenoides. En la mayoría de los casos de interés el problema de valores propios para el Hamiltoniano (1.3) no puede ser resuelto en la forma exacta y deben ser utilizados uno de los métodos aproximados, tales como el método variacional, teoría de perturbaciones, series de Taylor, diagonalización, etc.

1.3.2 Impurezas D^- . Una impureza D^- se forma cuando un D^0 captura un segundo electrón. Lampert (1958), fue el primero en predecir la existencia de estados D^- en semiconductores, teniendo en cuenta la similitud entre el átomo de hidrógeno (H) que como se sabe, puede enlazar un segundo electrón para formar un H^- , con una energía de enlace 0.0555 veces menor que la del átomo de H , y de un D^0 en un semiconductor en el bloque que pudiera de manera similar captar un segundo electrón para formar un D^- cuya energía de enlace pudiera ser 0.0555 veces menor que la energía de enlace de un D^0 . Sin embargo, la evidencia experimental de esta hipótesis de Lampert solo se dio mucho mas tarde cuando Dean y colaboradores (1967) atribuyeron una característica en la fotoluminiscencia del Si a estados D^- . Los Complejos D^- tienen la energía de enlace muy pequeña y en un semiconductor en el bloque solo se pueden encontrar bajo condiciones metaestables. En heterojunturas semiconductoras la situación es bastante diferente, ya que las impurezas D^0 situadas en la barrera tienen energía de enlace mucho menor que las impurezas ubicadas en la región central del pozo, debido a que sus electrones se confinan prácticamente en el pozo. Como consecuencia es posible la formación de una población significativa de donadoras D^- en el centro del pozo a través de la transferencia de electrones débilmente ligados a donadoras que se encuentran en las barreras hacia donadoras ubicadas en la región central del pozo [51]. La primera evidencia de identificación de centro D^- en QWs fue reportada por Huan y co-investigadores [18] en 1990, después de esto, se han desarrollado numerosos estudios teóricos [25,27,52,53] y experimentales [54] de centros D^- confinados en pozos. Los campos magnéticos externos producen un confinamiento adicional y facilitan la formación de centros D^- , permitiendo observarlos tanto en el estado base como en uno de los estados excitados. La transición desde el estado base al estado excitado singlete de un D^- fue observado en los experimentos de magneto-fotoluminiscencia [18,22]. Los cálculos de la energía de enlace para los D^- confinados en heterojunturas semiconductoras son mucho más complicados que para los D^0 debido a los efectos de correlación electrón-electrón, y sugieren la utilización de funciones de prueba de tipo Hylleraas o Chandrasekhar con una gran cantidad de parámetros variacionales. Sin embargo, los resultados obtenidos en estos cálculos para impurezas D^- confinadas en pozos

cuánticos en presencia de campos magnéticos bajos ($B < 6T$), están en buena concordancia con los datos experimentales [22,23,25,55-58] a pesar de que se utilizó una variante de modelo de Bastard simplificado que no tiene en cuenta ni la anisotropía de la banda de conducción ni otros aspectos de la estructura cristalina real. Mientras tanto hace poco se demostró que los efectos de no parabolicidad de la banda de conducción y la interacción de los electrones con las oscilaciones de la red cristalina (efectos de polaron) son esenciales para D^- en pozos angostos y en presencia de campos magnéticos fuertes [59,60].

1.4 MÉTODOS UTILIZADOS PARA EL ESTUDIO DE IMPUREZAS D^0 Y D^- EN HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

Para calcular los espectros electrónicos de las impurezas confinadas en heterojunturas semiconductoras, fundamentalmente se ha utilizado el método variacional [61-72], y otros métodos mas sofisticados, tales como expansión en serie [73-75], “Dimensión Scaling” [76,77], teoría de perturbaciones [78,79], métodos de diferencias y elementos finitos [80], iteraciones inversas [81], barridos [82] y Monte Carlo [23,29]. A continuación haremos unos comentarios generales sobre los principales resultados y la utilización de algunos de estos métodos en el estudio del espectro energético de D^0 y D^- .

1.4.1 Cálculos variacionales. El análisis de la solución de la ecuación de Schrödinger para una impureza confinada en heterojunturas semiconductoras muestra que con la disminución del tamaño de la heterojuntura la energía de enlace de las impurezas aumenta debido a la disminución de la distancia entre el electrón y el ion y en algunos casos adicionalmente debido al cambio de la simetría del sistema, como por ejemplo en QW y QWW donde la simetría varía con el aumento del efecto de confinamiento desde esférica hasta axial. Para describir adecuadamente estos efectos en el marco del método variacional hay que escoger una función de prueba que tenga suficiente flexibilidad para reflejar los cambios de la escala y la simetría del sistema con el aumento del efecto de confinamiento. Como el método variacional solo permite estimar un límite superior para la energía del sistema, entonces entre mayor sea la flexibilidad de la función de prueba escogida, menor será la diferencia entre la energía estimada y su valor exacto. Por esa razón diferentes investigadores han considerado una amplia variedad de funciones de prueba, tipo hidrogenoides, Gaussianas, Kohn-Luttinger, Hylleraas, Chandrasekhar, polinomiales o diferentes combinaciones de estas funciones con unos pocos parámetros variacionales no lineales y a veces con muchos parámetros lineales.

El espectro de una donadora neutra D^0 confinada en un QW de $GaAs/Ga(Al)As$ fue analizado primero teóricamente por Bastard [11] en 1981, usando la aproximación de masa efectiva y una función de prueba tipo hidrogenoide. Posteriormente Greene y Bajaj [61]

para este sistema analizaron los efectos relacionados con el campo magnético, utilizando como función de prueba una combinación de funciones Gaussianas. Fraizzoli, Bassani y Buczko [83] consideraron efectos de discontinuidad en la masa efectiva y la constante dieléctrica en las interfases. El modelo de Bastard para las impurezas donadoras en QW fue aplicado también para el estudio de impurezas D^0 en hilos y puntos cuánticos de *GaAs/Ga(Al)As*. Spiros et al. analizaron el efecto de campo magnético [84]. Porras Montenegro et al. [69,85-87] en una serie de trabajos teóricos calcularon la energía de enlace y densidad de estados para donadoras y aceptadoras en QWW's cilíndricos. El espectro de absorción óptica y fotoluminiscencia asociadas con los primeros estados excitados de donadores hidrogenoides ubicados en el eje de hilos cilíndricos de *GaAs/Ga(Al)As* fue analizado por Pérez-Merchancano [71,88]. Además, se han estudiado la energía de enlace y densidad de estados de impurezas donadoras en hilos cuánticos con sección transversal rectangular bajo la influencia de campos magnéticos y eléctricos [89,90].

El aumento de la energía de enlace de un D^- producido por el confinamiento de las órbitas electrónicas en diferentes heterojunturas y en presencia de campo magnético también fue analizado en un número significativo de publicaciones [23,25,26,28-32,53]. La impureza D^- en el bloque en su espectro discreto tiene sólo un estado $1s^-$ con una energía de enlace muy pequeña $0.055Ry^*$ pero en heterojunturas semiconductoras debido al confinamiento esta energía crece y además pueden aparecer otros estados estables. Las curvas de dependencia de la energía del estado base en función del tamaño de las heterojunturas son similares a las curvas correspondientes para impureza donadora neutra. Igual como para las impurezas neutras, para D^- existe un umbral de confinamiento después del cual las órbitas de D^- desbordan en la barrera y recuperan su carácter tridimensional. Los cálculos realizados utilizando diferentes funciones de prueba [25,26,28-32,53] muestran un aumento de la energía de enlace de D^- hasta en 10 veces en QWs y hasta en 50 veces en QDs. En la mayoría de estos trabajos se analiza el problema de un D^- centrado en pozos y multipozos usando una función de prueba tipo Chandrasekhar, con varios parámetros variacionales no lineales (hasta 9 parámetros). El procedimiento variacional con esta función de prueba requiere un gran esfuerzo computacional, debido a la necesidad de hacer repetidos cálculos de integrales multidimensionales en el proceso de minimización de la energía. Para disminuir el orden de las integrales, varios autores propusieron unas versiones de la función de prueba tipo Chandrasekhar simplificada considerando la correlación electrón-electrón solo en el plano perpendicular al eje de crecimiento de la heterojuntura [25, 29,33]. Con esta función de prueba se analizó el efecto de campo magnético sobre el estado base y primeros estados excitados de un D^- centrado [25] y descentrado [33] en un pozo con potencial rectangular y gradual [29].

El problema de dos electrones en física atómica fue analizado desde 1930 y la mejor concordancia entre los resultados teóricos y experimentales ha sido obtenida usando coordenadas elípticas y una función de prueba tipo Hylleraas, con la cual el número de parámetros lineales puede ser crecido sin ninguna restricción [12,13]. Similarmente el mejor resultado para la energía del estado base de un D^- en semiconductores en el bloque, tridimensionales y bidimensionales, ha sido obtenido usando una función de prueba tipo Hylleraas con 35 parámetros lineales variacionales [16]. Pero desafortunadamente la

ventaja de esta función de prueba desaparece cuando se analizan heterojunturas semiconductoras con un potencial de confinamiento anisotrópico, debido a que en estos sistemas ya no existe la simetría central y por eso se incrementa el número de integrales multidimensionales que se deben computar en cada paso del procedimiento variacional.

1.4.2 Método de dimensión fraccionaria. Varios avances en la interpretación de resultados experimentales relacionados con los espectros de excitones y donadoras neutras se han logrado últimamente dentro del marco del método llamado dimensión fraccionaria [35-38,91-98], en el cual las interacciones anisotrópicas en un medio ambiente tridimensional, son tratadas como isotrópicas en un espacio con una dimensionalidad reducida asociada con el grado de anisotropía del sistema. En comparación con otras técnicas este método permite obtener una formulación del problema de espectros electrónicos de sistemas de pocas partículas ubicados dentro de un medio fuertemente anisotrópico mucho más compacta.

Lefebvre y co-investigadores [35-38] fueron los primeros en aplicar este método al problema de sistemas hidrogenoides en QWs y QWWs y calcularon las energías de los estados base y primeros excitados y además los espectros de absorción de excitones confinados en QWs y QWWs de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$. En la última década, el método de dimensión fraccionaria se ha usado exitosamente para describir propiedades de donadoras neutras y excitones, sus espectros de absorción y para analizar los efectos de interacción electrón-fonón, en heteroestructuras semiconductoras [92-98]. Recientemente en una serie de trabajos teóricos [95-98] se propuso un procedimiento sistemático para determinar la dimensionalidad apropiada de un espacio isotrópico que modele un sistema anisotrópico real. En estos trabajos la dimensionalidad fraccionaria del QWW se encontró directamente ajustando los valores propios del modelo en el espacio de dimensión fraccionaria a los niveles energéticos de un sistema real. Sin embargo, como fue anotado por los autores del método, este pierde su validez en las condiciones de confinamiento fuerte. Particularmente, las energías de enlace de donadoras neutras en QW en presencia de los campos magnéticos intermedios y fuertes calculadas a través de este método difieren notablemente de los resultados correspondientes obtenidos anteriormente usando los métodos variacional y Monte Carlo. Esta diferencia se hace mucho más significativa para impurezas en hilos y puntos cuánticos donde el confinamiento es más fuerte que en pozos cuánticos y superredes.

En nuestra opinión, las limitaciones para la aplicabilidad de esta teoría están relacionadas con la definición no adecuada de la Dimensión Fraccionaria, según la cual en las teorías anteriores se asume que esta dimensión es la misma en diferentes partes de la heterojuntura tanto en el centro como en la barrera. Por otro lado, según la teoría de Mandelbrot la dimensión fraccionaria se puede definir de esta manera solamente para los objetos auto similares llamados fractales, mientras que la densidad electrónica dentro de una heterojuntura puede ser considerada como fractal solo aproximadamente cuando el tamaño de esta es suficientemente grande. Cuanto menor es el tamaño de la heterojuntura menor se hace la auto similitud de la densidad electrónica dentro de esta y menos aplicable se hace la teoría en la cual la dimensión fraccionaria se considera como un valor “promedio”. Desde

este punto de vista es evidente que se necesita un análisis más riguroso de la definición de la dimensión fraccionaria y este tema es uno de los objetivos de esta tesis.

1.4.3 Métodos exactos. En algunos casos, cuando debido a la simetría, la ecuación de Schrödinger para sistemas de pocas partículas confinados en una heterojuntura en la aproximación de masa efectiva puede ser completamente separable, aparece la posibilidad de encontrar el espectro electrónico en una forma exacta. Uno de estos casos corresponde a una impureza hidrogenoide centrada en QD con un potencial de confinamiento con simetría esférica. Para este problema se encontró solución exacta utilizando diferentes técnicas numéricas [23,82,99]. Una de estas técnicas, el método de barrido trigonométrico [82] se propone utilizar para encontrar la función de onda de los electrones desacoplados en QWW. En una forma similar puede resolverse numéricamente el problema de dos electrones confinados en un punto cuántico con un potencial de confinamiento parabólico [32]. Entre otras técnicas exactas hay que mencionar el método Monte Carlo una herramienta muy general, pero que requiere un cálculo computacional bastante sofisticado y voluminoso. Usando este método se ha analizado el espectro de impurezas cargadas negativamente, D^- , confinadas en un pozo cuántico [23].

Cada uno de los métodos mencionados anteriormente tiene tanto ventajas como deficiencias cuando se comparan unos con otros. Sin embargo, existe una relación estrecha entre los métodos de dimensión fraccionaria y variacional. En ambos métodos se busca una mejor función de onda de tipo hidrogenoide, la cual a través de unos parámetros variacionales o fenomenológicos se ajusta a los cambios en la simetría del sistema, relacionados con el confinamiento o con influencia de campos externos. Por eso, en este trabajo, queremos modificar este método, de tal manera que podamos aprovechar sus ventajas y eliminar todas las dificultades que lo caracterizan. Con este fin, partiendo del principio variacional de Schrödinger, demostraremos que el formalismo de dimensión fraccionaria es una variante del procedimiento variacional más fino que los procedimientos anteriores, y que en nuestra versión generalizada este proporciona mejores posibilidades para la interpretación de resultados que el formalismo de dimensión fraccionaria propuesto previamente [35-38,91-98]. En la siguiente sección, hacemos una descripción detallada del procedimiento usado en este método y su aplicación a los problemas mencionados.

2. MODELO TEÓRICO

2.1 TEORÍA DE DIMENSIÓN FRACTAL

La ecuación de onda que define el espectro electrónico de un D^0 y un D^- en un semiconductor en el bloque (uni-, bi- o tri- dimensional) en la AME corresponde a un problema de una y dos partículas, respectivamente, en un campo central. Esta ecuación en coordenadas esféricas es completamente (para el D^0) o parcialmente (para el D^-) separable y se reduce a una ecuación diferencial para la parte radial de la función de onda con un Jacobiano J cuya dependencia con respecto al radio se da por una ley de potencia $J \sim r^\alpha$ donde el parámetro de escalamiento α está relacionado con la dimensión D del espacio como $\alpha = D-1$. El problema similar para las impurezas confinadas en las heterojunturas semiconductoras generalmente es mucho más complicado ya que las partes radial y angular de la función de onda ya no pueden ser separadas. Por otro lado, intuitivamente se entiende que el problema de un D^0 y de un D^- en una heterojuntura es similar al correspondiente en un semiconductor en el bloque con una dimensión D^* reducida. En las teorías de dimensión fraccionaria anteriores esta dimensión se consideraba como un parámetro fenomenológico cuyo valor depende de la geometría de la heterojuntura y la ecuación de onda en un medio anisotrópico se reemplaza por una ecuación similar en un espacio con simetría central donde la dependencia del Jacobiano con respecto al radio se da por una ley de potencia $J \sim r^{D^*-1}$. Hasta ahora este método se aplicó para analizar los estados base y primeros excitados de impurezas D^0 y excitones pero hasta donde nosotros conocemos no existen publicaciones de su aplicación al problema de un D^- cuyo análogo en física atómica es el H^- (el ión del átomo de hidrógeno negativamente cargado).

Como fue establecido en los primeros años del desarrollo de la mecánica cuántica las aproximaciones auto-consistentes de tipo Hartree-Fock no son válidas para el H^- ya que en estas aproximaciones no aparecen los niveles energéticos en el espectro discreto. También se demostró que los efectos de correlación en este sistema juegan un papel importante y conducen a la aparición de un único nivel en el espectro discreto con una energía de enlace muy pequeña. Estos resultados fueron obtenidos utilizando generalmente funciones de prueba de dos tipos (Hylleraas y Chandrasekhar), en ambos casos con términos dependientes tanto de la separación electrón-ion como de la distancia entre los dos electrones. Hasta ahora los cálculos de las energías de D^- confinados en heterojunturas semiconductoras fueron realizados utilizando las mismas funciones de prueba, en la mayoría de los casos la función de prueba de tipo Chandrasekhar. Mientras tanto, el

método de dimensión fraccionaria extendido a sistemas de dos electrones pudiera abrir nuevas posibilidades tanto para simplificar el procedimiento numérico como para facilitar la interpretación de los resultados del cálculo, estableciendo las analogías entre sistemas confinadas en las heterojunturas y sus análogos en el bloque.

En este trabajo, nosotros consideramos el formalismo de dimensión fraccionaria como una variante del procedimiento variacional, y lo llamamos “*Método de Dimensión Fractal*”. Utilizando el método de derivación funcional, demostraremos que el problema de una y dos partículas en un campo central dentro de una heterojuntura anisotrópica, es equivalente a un problema similar con simetría esférica en un semiconductor en el bloque cuyo Hamiltoniano tiene el operador de Laplace correspondiente a una dimensión no entera según la definición de Stillinger [35]. Esto nos permite interpretar nuestro procedimiento como una generalización del método de dimensión fraccionaria introducido anteriormente por otros autores. Como se podrá ver, este método es más refinado que las aproximaciones auto-consistente, y por eso tiene precisión superior en comparación con los métodos anteriores tanto para campos magnéticos débiles como intensos. A continuación haremos la descripción y aplicación de este método para el caso de una impureza D^0 confinada en una heterojuntura semiconductor, y posteriormente veremos como se aplica este método para el caso de una impureza D^- .

2.1.1 Método de dimensión fractal para un D^0 en una heterojuntura semiconductor. Consideremos el problema de una impureza D^0 ubicada en la posición $\vec{\xi}$, dentro de una heterojuntura semiconductor $GaAs-(Ga,Al)As$ (tal como un QW, QWW, QD o una SL) y bajo la presencia de un campo magnético uniforme. Inicialmente consideremos el problema en la aproximación de banda parabólica y no degenerada, de tal manera que el Hamiltoniano, dentro de la aproximación de masa efectiva se puede escribir como

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[\vec{p} + \frac{e}{c} \vec{A} \right]^2 - \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{\xi}|} + V(\vec{r}), \quad (2.1)$$

donde todos los vectores son medidos desde el centro de la heterojuntura, $V(\vec{r})$ es el potencial de confinamiento, m^* la masa efectiva en la banda de conducción y ε es la constante dieléctrica del conductor, la cual inicialmente consideraremos como uniforme en la heterojuntura. Los valores de los parámetros físicos pertenecientes al GaAs ($m^* = 0.067m_0$, y $\varepsilon = 12.53$, donde m_0 la masa del electrón libre) son usados en nuestros cálculos. Escogeremos el potencial vector $\mathbf{A} = 1/2(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$, y el campo magnético orientado a lo largo del eje z de manera que el Hamiltoniano (1) para el estado base, podría escribirse como:

$$\hat{H}_{D^0} = \hat{H}_0 - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|}, \quad (2.2a)$$

donde el primer término de la derecha es el Hamiltoniano correspondiente a un electrón no ligado confinado dentro de la heterojuntura, el cual está dado por:

$$\hat{H}_0 = -\nabla^2 + \tilde{V}(\vec{r}), \quad (2.2b)$$

con

$$\tilde{V}(\vec{r}) = V(\vec{r}) + \frac{1}{4}\gamma^2 \rho^2. \quad (2.2c)$$

Aquí hemos representado \vec{r} como $\vec{r} = (\rho, z)$, e introducido el radio efectivo de Bohr $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m^* e^2$, como unidad de longitud, el Rydberg efectivo $Ry^* = e^2 / 2a_0^* \epsilon$, como la unidad de energía, y $\gamma = e \hbar B / 2m^* c Ry^*$, como la unidad adimensional para la intensidad del campo magnético.

La función de onda $f_0(x, y, z)$, para el electrón no ligado correspondiente a la más baja energía E_0 se puede encontrar como solución del siguiente problema de valores propios

$$\hat{H}_0 f_0(x, y, z) = E_0 f_0(x, y, z). \quad (2.3)$$

Analizando estas ecuaciones, se puede notar que si la heterojuntura tiene una simetría particular (por ejemplo, axial en pozos e hilos cilíndricos o, esférica como en puntos esféricos), el Hamiltoniano \hat{H}_0 es completamente separable, y el problema tridimensional (2.3), se puede resolver exactamente, usando cualquier procedimiento analítico o numérico conocido. Por el contrario, la ecuación de Schrödinger para la impureza D^0 (electrón ligado)

$$\hat{H}_{D^0} \Psi_{D^0}(\vec{r}) = E(D^0) \Psi_{D^0}(\vec{r}), \quad (2.4)$$

no es completamente separable si la simetría de los dos terminos del Hamiltoniano (2.2a) no coinciden. De manera que en este caso, para resolver este problema debemos usar algún método de aproximación. En lo que sigue asumiremos que la energía E_0 y la función de onda para el electrón no ligado son conocidas

2.1.1.1 Renormalización de la ecuación de onda para el estado base de un D^0 . Para simplificar y resolver el problema (2.4), seria interesante eliminar el potencial de confinamiento en esta ecuación, para lo cual usaremos la siguiente sustitución:

$$\Psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(x, y, z) \Phi(\vec{r} - \vec{\xi}), \quad (2.5)$$

donde la función envolvente $\Phi(\vec{r} - \vec{\xi})$, que describe la modificación de la distribución de probabilidad electrónica producida por la atracción Coulombiana, tiene simetría esférica y depende solamente de la separación electrón-ión.

Sustituyendo la ecuación (2.5) en (2.4) y partiendo del principio variacional de Schrödinger, se llega al siguiente funcional:

$$F[\Phi] = \langle f_0(x, y, z) \Phi(\vec{r} - \vec{\xi}) | \hat{H} - E | f_0(x, y, z) \Phi(\vec{r} - \vec{\xi}) \rangle \rightarrow \min; \quad (2.6)$$

de donde sustituyendo las ecuaciones (2.2), teniendo en cuenta la ecuación (2.3), y transfiriendo el origen de coordenada a la posición del ion se llega al siguiente funcional para la función $\Phi(\vec{r})$

$$F[\Phi] = \int_0^{\infty} J(r) \left\{ \left[\frac{d\Phi(r)}{dr} \right]^2 - \frac{2}{r} \Phi^2(r) + (E_0 - E) \Phi^2(r) \right\} dr \rightarrow \min \quad (2.7)$$

el principio variacional de Schrödinger establece que este funcional tiene un valor estacionario, cuando la función $\Phi(\vec{r})$ satisface la siguiente ecuación de Euler-Lagrange

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d}{dr} \Phi(r) \right] - \frac{2}{r} \Phi(r) = [E - E_0] \Phi(r) \quad (2.8)$$

el cual se puede representar en una forma tridimensional como:

$$-\frac{1}{P(r)} \nabla [P(r) \nabla \Phi(r)] - \frac{2}{r} \Phi(r) = [E - E_0] \Phi(r), \quad (2.9)$$

donde

$$J(r) = r^2 P(r);$$

$$P(r) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{\pi} f_0^2(r \sin \theta \cos \varphi + \zeta_x, r \sin \theta \sin \varphi + \zeta_y, r \cos \theta + \zeta_z) \quad (2.10)$$

La ecuación de onda renormalizada (2.8), describe a un átomo de hidrógeno en un espacio efectivo con un Jacobiano cuya parte radial esta dada por $J(r)$. Tal interpretación surge a partir de la propiedad de ortogonalidad de las funciones propias $\Phi_n(r)$ de la ecuación auto-conjugada (2.8) para los diferentes estados S:

$$\int_0^{\infty} \Phi_n(r) \Phi_m(r) J(r) dr = \int \Phi_n(r) \Phi_m(r) dV = \delta_{n,m}. \quad (2.11)$$

En esta ecuación (2.11), se puede ver que $dV = J(r) dr$ representa el elemento de volumen en un espacio funcional efectivo, donde $J(r)$ puede ser considerado como el área superficie frontera de un cascarón esférico infinitesimal de radios r y $r + dr$ en este espacio. Por ejemplo, para un espacio homogéneo de uno, dos y tres dimensiones, la función $J(r)$ será igual a 1, $2\pi r$ y $4\pi r^2$ respectivamente. Si $J(r)$ dependiera solo como potencia de r , por ejemplo, $J(r) = Cr^{D-1}$, entonces la ecuación (2.8) coincidiría con la ecuación de Schrödinger para los estados S de un átomo de hidrógeno en un espacio efectivo isotrópico y homogéneo de D dimensiones, siendo esta D un número entero o fraccional [34]. Pero en general, la función $J(r)$ no tiene una dependencia en forma de potencias de la separación electrón-ión r debido a el factor $P(r)$, y por tanto la ecuación (2.8) podría ser considerada como la ecuación de onda para un átomo de hidrógeno en un espacio isotrópico y no-homogéneo con una dimensión variable que depende de la separación electrón-ion r . Esta dimensión nosotros la llamamos "Fractal" y se puede calcular una vez se conozca la parte radial del Jacobiano $J(r)$.

Nótese que la relación (2.11) junto con la definición de la parte radial del Jacobiano (2.10), proporcionan automáticamente la ortogonalidad de todas las funciones de prueba $\Psi_{D_0}^n(\vec{r}) = f_0(\vec{r}) \Phi_n(r)$ correspondiente a diferentes estados S del donar. Es claro que la

solución de la ecuación (2.8) define solamente un valor aproximado debido a que la correspondiente función de onda no es exacta, pero esta da la mejor aproximación para la energía del estado base, entre todas las funciones para los estados S que puedan ser representadas en la forma (2.5)

2.1.2 Método de dimensión fractal para un D^- en una heterojuntura semiconductor. Siguiendo un procedimiento similar al del caso de una impureza D^0 (sección 2.1.1), aquí consideramos una impureza D^- ubicada en la posición $\vec{\xi}$, dentro de una heterojuntura semiconductor de $GaAs-(Ga,Al)As$ (tal como un QW, QWW, QD o una SL) y bajo la presencia de un campo magnético uniforme orientado en la dirección z. De tal manera que dentro de la aproximación de masa efectiva, y usando las mismas unidades adimensionales como en las ecuaciones (2.2), llegamos a que el Hamiltoniano adimensional para este problema se puede escribir como:

$$\hat{H}_{D^-} = \hat{H}_0(\vec{r}_1, Z=1) + \hat{H}_0(\vec{r}_2, Z=1) + \frac{2}{r_{12}} \quad (2.12)$$

donde $\hat{H}_0(\vec{r}, Z)$, es un Hamiltoniano igual al de la expresión (2.2), pero que en términos generales podemos representar en la forma

$$\hat{H}_0(\vec{r}_i, Z) = -\nabla_i^2 + V(\vec{r}_i) + \frac{\gamma^2 \rho_i^2}{4} - \frac{2Z}{|\vec{r}_i - \vec{\xi}|}; \quad i=1,2 \quad (2.13)$$

en donde el parámetro Z es igual a cero, en el caso de un electrón no ligado y es igual a uno, en el caso de la impureza donora D^0 , y $\vec{r}_i = (\vec{\rho}_i, z_i)$, ($i=1,2$) designa los vectores posición de los electrones 1 y 2, los cuales son medidos desde el centro de la heterojuntura. El termino $2/r_{12}$, representa la interacción entre los dos electrones con $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ y $V(\vec{r})$ es el potencial de confinamiento debido a la heterojuntura.

2.1.2.1 Renormalización de la ecuación de onda para el estado base de un D^- . Para determinar la energía del estado base de un D^- en diferentes heterojunturas semiconductoras, podemos usar un procedimiento similar al usado en la sección 2.1.1, para el caso del D^0 . En este caso, la ecuación de Schrödinger correspondiente a este problema, es:

$$\hat{H}_{D^-} \Psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E(D^-) \Psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (2.14)$$

y escogemos una función variacional en la forma:

$$\Psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_0(\vec{r}_1) f_0(\vec{r}_2) \Phi_{D^-} \left(|\vec{r}_1 - \vec{\xi}|, |\vec{r}_2 - \vec{\xi}|, r_{12} \right), \quad (2.15)$$

donde la función $f_0(\vec{r})$, es solución del problema uniparticular (2.3), y la función envolvente Φ_{D^-} toma en cuenta el efecto de la correlación entre los electrones dentro de la heterojuntura, producido por la interacción Coulombiana. Para derivar una ecuación diferencial para esta función, hacemos uso del principio variacional en la forma:

$$\frac{\delta F[\Phi_{D^-}]}{\delta \Phi_{D^-}} = 0; \quad F[\Phi_{D^-}] = \langle f_0(\vec{r}_1) f_0(\vec{r}_1) \Phi_{D^-} | \hat{H} - E(D^-) | f_0(\vec{r}_1) f_0(\vec{r}_1) \Phi_{D^-} \rangle \quad (2.16)$$

con el Hamiltoniano \hat{H} , definido por la relación (2.12). Para los estados S, solamente los dos primeros factores en el lado derecho de la expresión (2.15), dependen de los ángulos de Euler, por lo tanto, para obtener una forma explícita para el anterior funcional uno puede integrar sobre estos ángulos inmediatamente, y usando un procedimiento similar al que describimos en el caso del D^0 obtenemos la siguiente ecuación de Euler-Lagrange para $\Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12})$:

$$-\sum_{i=1,2} \frac{1}{P(r_i)} \nabla_i [P(r_i) \nabla_i \Phi_{D^-}] + \left(-\frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{2}{r_{12}} \right) \Phi_{D^-} = [E(D^-) - 2E_0] \Phi_{D^-} \quad (2.17)$$

Esta ecuación describe a un ion H^- en un espacio efectivo isotropico con una dimensión fractal variable cuya parte radial del Jacobiano esta definida por la expresión (2.10). Esta ecuación (2.17) para el D^- , y la ecuación (2.8) para el D^0 , pueden ser resueltas usando cualquier método aproximado elaborado previamente para problemas de fuerza central. En la siguiente sección describiremos que métodos empleamos para resolver estos problemas. Por el momento hacemos un paréntesis en el cálculo de energías, para continuar con el cálculo e interpretación del Jacobiano y la dimensión fractal en diferentes heterojunturas semiconductoras.

2.1.3 Jacobiano y Dimensión Fractal. Antes de continuar con el procedimiento para calcular la dimensión fractal, uno debe tomar en cuenta que por un lado el Jacobiano $J(r)$, en la ecuación (2.8), esta relacionado con la geometría del sistema de acuerdo con la ecuación (2.11) y, por otro lado, esta relacionado con la densidad de carga del electrón no ligado de acuerdo con la ecuación (2.10). Esto sugiere, que la densidad de carga del electrón no ligado, pero confinado en la heterojuntura, puede ser considerada como un objeto fractal que cambia la dimensión del espacio real, y que la dimensión de este objeto esta relacionada directamente con el Jacobiano $J(r)$.

Si la heterojuntura que se está analizando tiene algún tipo de simetría particular, la expresión general (2.10), para el Jacobiano $J(r)$ se puede simplificar. Por ejemplo, para un punto cuántico esférico, en el caso de campo magnético cero, la función de onda para el estado base de un electrón no ligado, depende solamente de r , esto es $f_0(\vec{r}) \equiv f_0(r)$, de manera que la relación (2.10) se puede simplificar como:

$$J(r) = 2\pi r^2 \int_{-1}^1 f_0^2(\sqrt{r^2 + \xi^2 + 2r\xi x}) dx \quad (2.18)$$

donde ξ es la distancia medida desde la posición del ión al origen de coordenadas, mientras que $f_0(r)$ es solución de la ecuación de onda unidimensional

$$\left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} + V(r) \right] f_0(r) = E_0 f_0(r), \quad (2.19)$$

correspondiente a la energía mas baja E_0 .

En el caso de heterojunturas con simetría cilíndricas (QWs, doble QWs, SLs, QWWs cilíndricos, discos y anillos cuánticos) la función de onda para el electrón no ligado solo depende de las coordenadas radial ρ y axial z de la posición del electrón, esto es, $f_0(\vec{r}) \equiv f_0(\rho, z)$. Si la posición en coordenadas cilíndricas esta dada por el vector $\xi = \{\xi_\rho, \xi_z, \xi_\theta\}$, entonces la expresión (2.10) se puede reducir a la siguiente forma:

$$J(r) = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta f_0^2 \left(\sqrt{r^2 \sin^2 \theta + \xi_\rho^2} + 2r\xi_\rho \sin \theta \cos \varphi, r \cos \theta + \xi_z \right) \quad (2.20)$$

donde la función de onda $f_0(\rho, z)$, es solución de la ecuación bidimensional de Schrödinger

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(\rho, z) + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} \right] f_0(\rho, z) = E_0 f_0(\rho, z). \quad (2.21)$$

Para heterojunturas con el eje de crecimiento a lo largo de la dirección z , tales como un QW, doble o múltiple QWs, y superredes, la ecuación (2.21) es separable y se separa en un par de ecuaciones independientes, cuyas soluciones pueden ser encontradas en una forma analítica o numéricamente, puesto que en este caso $V(\rho, z) \equiv V(z)$. Igual es el caso de hilos cilíndricos, discos y anillos, con una barrera infinita en la dirección z , donde $V(\rho, z) \equiv V(\rho)$.

2.1.3.1 Interpretación del Jacobiano y la dimensión fractal. Para dar una interpretación geométrica y encontrar la dependencia de la dimensión fractal con la separación electrón-ion, podemos hacer uso del concepto de Mandelbrot [41] sobre dimensión fractal, y del hecho de que el Jacobiano $J(r)$ coincide con la parte radial de la distribución de probabilidad para el estado base de un electrón no ligado confinado en la heterojuntura. De acuerdo con la definición de Mandelbrot, la dimensión fractal D^* , de un objeto ramificado homogéneo, contenido dentro de una esfera de radio r , esta relacionado con el volumen ocupado por este objeto, por medio de la expresión $V = Cr^{D^*}$, donde C es una constante. Si nosotros consideramos la densidad de carga dentro de una heterojuntura como un objeto fractal, y teniendo en cuenta la simetría de los estados S de un donador, entonces para establecer la relación entre la parte de la carga electrónica dQ contenida dentro de una esfera y el radio de esta, podemos considerar un conjunto de esferas concéntricas con centro en la posición del ion $\vec{\xi}$. Para un fractal exacto, la relación entre el radio r de un cascaron esférico con radios r y $r+dr$ y la parte de la carga electrónica dQ , debe tener la forma $dQ = Cr^{D-1} dr$, donde se asume que el parámetro de escalamiento D es la dimensión fractal.

Por otro lado, de acuerdo con la ecuación (2.10), el Jacobiano $J(r)$ da la distribución de probabilidad radial en el marco de referencia con el origen ubicado en la posición del ion $\bar{\xi}$. Por lo tanto se puede decir que $dQ = J(r)dr$ da la parte de la carga electrónica contenida dentro de un cascaron esférico de radio r y espesor dr y con centro en la posición del ion. Ahora como el Jacobiano generalmente no depende en forma potencial de r , la densidad de carga no podría ser considerada como un fractal exacto, y su dimensión puede ser definida rigurosamente solo localmente, ya que es imposible definir una dimensión fractal que sea la misma en todas las partes del espacio. Desde este punto de vista, podríamos representar la relación entre el Jacobiano y la dimensión fractal definida localmente $D^*(r)$, como:

$$J(r) = C(r)r^{D^*(r)-1}. \quad (2.22)$$

donde las funciones $C(r)$ y $D^*(r)$ varían mas suavemente que cualquier función potencial.

Hay muchas funciones $C(r)$ y $D^*(r)$, las cuales podrían satisfacer la condición (2.22), por lo tanto debemos imponer una condición adicional para definir las de manera única. Consideremos como una escogencia natural para esta condición adicional, la relación entre la dimensión fractal y la parte radial del Jacobiano valida para cualquier fractal exacto para el cual $C(r)$ y $D^*(r)$ son constantes:

$$D^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J(r)}{dr} = 3 + r \frac{d \ln P(r)}{dr}. \quad (2.23)$$

esta relación se obtiene a partir de (2.16) si la función $C(r)$ es una solución de la ecuación:

$$\frac{d \ln C(r)}{dr} + \ln r \frac{d D^*(r)}{dr} = 0 \quad (2.24)$$

las ecuaciones (2.10) y (2.23) establecen la relación entre el espacio real cuyas propiedades están definidas por la geometría de la heterojuntura, y un espacio efectivo con dimensión fractal variable dada por la ecuación (2.23). Por consiguiente, nosotros interpretamos la ecuación (2.8) cuyo Laplaciano tiene el factor Jacobiano (2.10), como la ecuación de onda para los estados S de un átomo de hidrogenoide en un espacio efectivo con dimensión fractal. Por esta razón nos referimos al método de encontrar la energía de enlace del donador resolviendo la ecuación (2.8), como “*método de dimensión fractal*”. Adicionalmente, en nuestro formalismo definimos la “*dimensión fraccionaria*” como una dimensión fractal promedio dada por la ecuación (2.23). Asumiendo que la densidad de probabilidad de encontrar al electrón a una distancia r del ion esta dada por la parte radial de la función de onda del átomo hidrogenoide para el n-esimo estado S, en un espacio de D dimensiones, $R_n(r, D)$, definimos la dimensión fraccionaria [34] como:

$$\bar{D} = \int_0^{\infty} D^*(r) R_n^2(r, D^*(r)) J(r) dr \Big/ \int_0^{\infty} R_n^2(r, D^*(r)) J(r) dr. \quad (2.25)$$

donde

$$R_n(r, D) = \exp(-\kappa r) M(1-n, D-1, 2\kappa r); \quad \kappa = \frac{1}{n + (D-3)/2} \quad (2.26)$$

siendo $M(a, b, z)$ la función hypergeométrica confluyente. Una vez que se conoce el valor de \bar{D} , la energía de enlace E_b del estado nS , y la función de onda correspondiente $\Psi_n(\vec{r})$ se pueden obtener en forma sencilla por medio de las expresiones [34]:

$$E_b = \frac{4}{(n + (\bar{D} - 3)/2)^2}; \quad \Psi_n(\vec{r}) = f_0(\vec{r}) R_n(r, \bar{D}) \quad (2.27)$$

Para el caso de un modelo con potencial rectangular, uno puede calcular el Jacobiano $J(r)$, directamente usando las relaciones (2.18) y (2.20), y las bien conocidas expresiones de la función de onda para un electrón no ligado en un QW, un QWW cilíndrico y un QD esférico. La figura 1 muestra el típico comportamiento de la parte radial del Jacobiano $J(r)$, obtenidos a partir de los tres modelos señalados. Se puede ver que para pequeños valores de la separación electrón-ion r , las tres curvas tienen un comportamiento parabólico ($J \sim r^2$). Pero cuando la separación electrón-ion crece, las curvas se convierten en una función lineal ($J \sim r$) en el caso de un QW, en una constante ($J \sim r^0$) para el caso del QWW, y en una función exponencial decreciente ($J \sim 0$) para el QD. Este comportamiento de $J(r)$ es típico de un espacio efectivo con dimensión variable, la cual decrece cuando r crece.

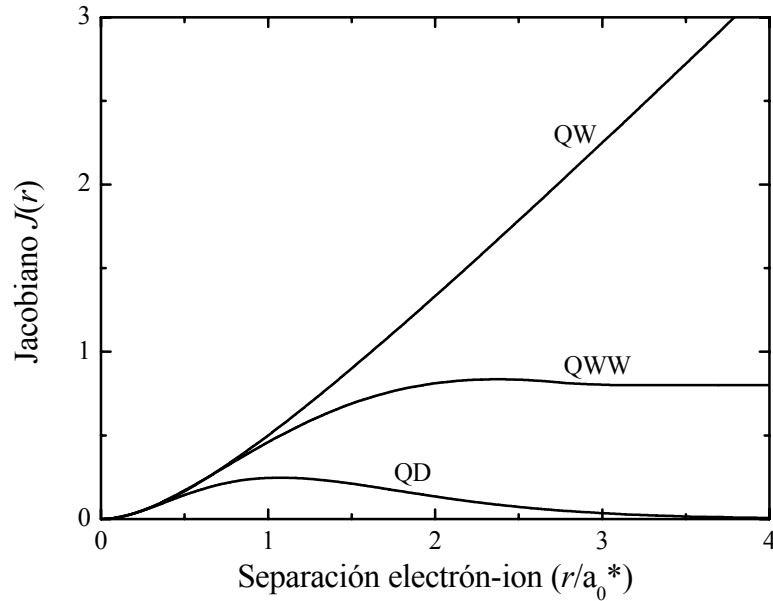


Fig 1. Parte radial del Jacobiano $J(r)$, calculado en diferentes heterojunturas de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, como función de la separación electrón-ion r

2.1.4 Dimensión fractal para un D^0 en QWs, QWWs y QDs. Para analizar las propiedades generales de la dimensión fractal en una heterojuntura, hemos calculado la dimensión fractal como función de la separación electrón-ion, para los caso de un donador centrado en un QD, un QWW, y un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, todos con un potencial rectangular de altura $V_0=40Ry^*$ y en el limite de cero campo magnético. Para estos modelos, la expresión explícita para la función de onda del estado base es bien conocida en cada caso, de manera

que se puede calcular directamente la dimensión fractal $D^*(r)$ como una función de la separación electrón-ion, usando las relaciones (2.18), (2.20) y (2.23).

La figura 2 muestra el resultado de la dimensión fractal $D^*(r)$ como función de la separación electrón-ion r , para el caso de un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular $V(z)=0$ para $|z|<W/2$ y $V(z)=V_0$ para $|z|>W/2$, en el caso de campo magnético cero ($\gamma=0$) y para diferentes anchos W del pozo. Como la función de onda del estado base en este caso solo depende de la coordenada z , entonces la expresión explícita para la dimensión fractal se puede obtener directamente de las ecuaciones (2.18) y (2.22).

$$D^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J(r)}{dr}; \quad J(r) = 2\pi r \int_{-r}^r f_0^2(z) dz \quad (2.28)$$

a partir de esta expresión, se puede ver que para pequeñas distancias entre el electrón y el ion, ($r \rightarrow 0$), el Jacobiano tiene una dependencia parabólica con respecto a r , pues en este caso, $J(r) \rightarrow 4\pi r^2 f_0^2(0)$, lo cual corresponde a un espacio efectivo tridimensional, pero cuando $r \rightarrow \infty$, el comportamiento del Jacobiano se transforma en bidimensional, ya que en ese caso $J(r) \rightarrow 2\pi r$.

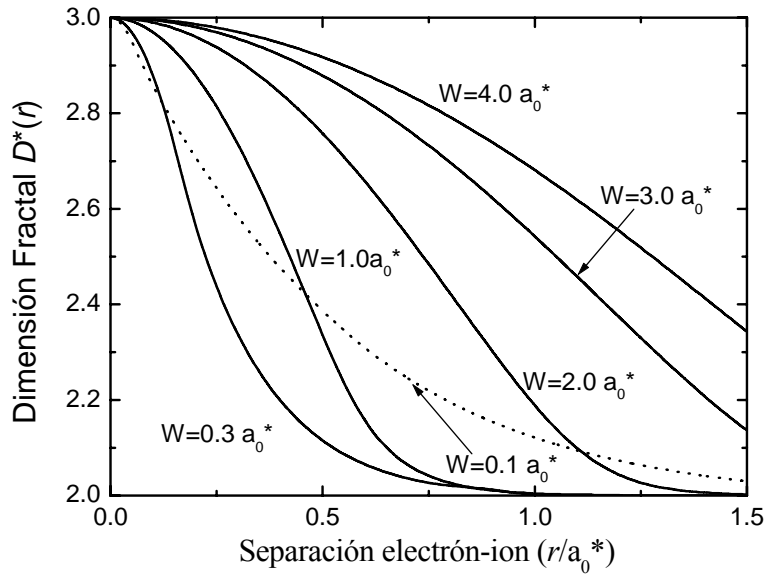


Fig 2. Dimensión fractal $D^*(r)$ como función de la separación electrón-ion r , para un donador en un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular, en el caso de campo magnético cero y para diferentes anchos W del pozo

En concordancia con este resultado, la dimensión fractal $D^*(r)$ en la figura 2, en todo los casos cae desde 3 hasta 2, cuando r crece desde cero. Se puede ver que cuando el ancho del pozo decrece, la pendiente de las curvas crecen, esto se debe al hecho de que si el ancho es pequeño, los orbitales exhiben su carácter bidimensional mucho más rápido a medida que r crece, mientras que cuando el ancho es grande, el carácter bidimensional se logra más lentamente a medida de r crece. También se puede notar que existe un ancho crítico, $W \approx 0.3a_0^*$, a partir del cual para anchos mas pequeños que este valor, la pendiente de las

curvas disminuye y por tanto se aumenta la dimensión fractal de las orbitas electrónicas, esto es consecuencia del bien conocido efecto de desbordamiento de la función dentro de la región de las barreras (línea punteada en la fig. 2), debido a que estas tiene altura finitas. En ambos limites, $W \rightarrow \infty$ y $W \rightarrow 0$, la pendiente de las curvas llega a ser casi horizontal y la dimensión fractal esta cerca de 3 para cualquier valor de r .

En la figura 3 mostramos los resultados para la dimensión fractal $D^*(r)$ como una función de la separación electrón-ion para un hilo cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con un potencial rectangular $V(\rho)=0$ para $|\rho| < R$ y $V(z)=V_0$ para $|\rho| > R$, en el caso de campo magnético cero ($\gamma = 0$) y para diferentes radios R del hilo. En este caso, la ecuación (2.21) llega a ser separable, y la función $f(\rho)$ correspondiente a la más baja energía del electrón, depende solamente de la coordenada ρ . De manera que a partir de las relaciones (2.20) y (2.23), podemos obtener la siguiente fórmula para la dimensión fractal de una impureza donora centrada en un QWW cilíndrico.

$$D^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J(r)}{dr}; \quad J(r) = 4\pi r \int_0^r \frac{f_0^2(\rho)\rho}{\sqrt{r^2 - \rho^2}} d\rho \quad (2.29)$$

Similarmente al caso de un QW, cuando $r \rightarrow 0$, el Jacobiano es parabólico $J(r) \rightarrow 4\pi r^2 f_0^2(0)$, y la dimensión fractal es 3, pero para grandes valores de la separación electrón-ion, en contraste al caso del QW, el Jacobiano tiende a un valor constante $J(r) \rightarrow 4\pi$, lo cual corresponde a un Jacobiano unidimensional.

El comportamiento de las curvas $D^*(r)$ en la figura 3 para diferentes radios del QWW, es similar al de las curvas para el caso del QW para diferentes anchos, excepto que la dimensión fractal ahora en este caso cae desde 3 hasta 1 cuando r crece. El efecto del desbordamiento de la función de onda dentro de la regiones de las barreras en dirección radial para un radio critico, $R < 0.3a_0^*$ (curva punteada en la fig. 3), en este caso es más pronunciado que en el caso del QW.

Para una donadora centrada en un QD esférico, uno puede obtener a partir de las ecuaciones (2.18) y (2.23), la siguiente expresión explícita para la dimensión fractal:

$$D^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J(r)}{dr}; \quad J(r) = 4\pi r^2 f_0^2(r), \quad (2.30)$$

donde la función de onda $f_0(r)$ del estado base para un electrón no ligado, es solución del problema de fuerza central (2.19) con un potencial $V(r)$ que varia desde 0 hasta V_0 cuando r crece desde 0 hasta ∞ .

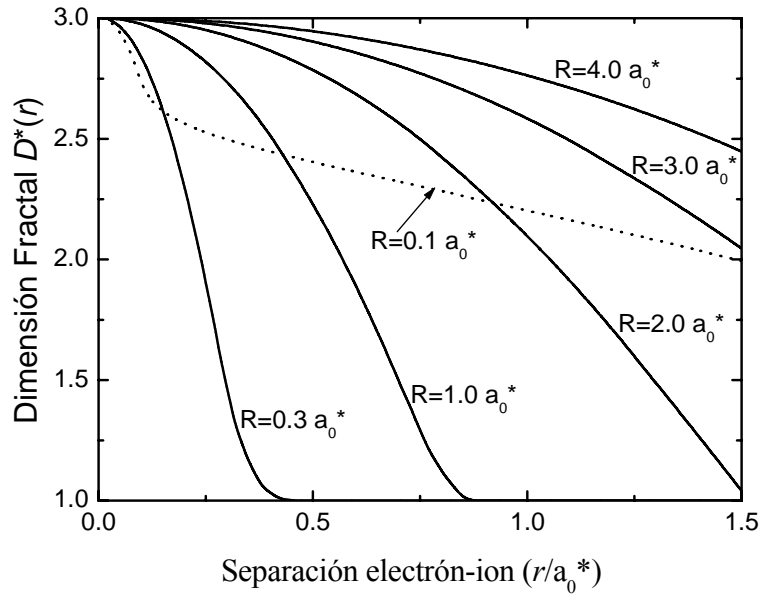


Fig 3. Dimensión fractal $D^*(r)$ como función de la separación electrón-ion r , para un donador en un QWW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular, en el caso de campo magnético cero y para diferentes radios R del hilo.

En la figura 4 presentamos las curvas de dimensión fractal para un punto cuántico esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con un potencial de confinamiento rectangular $V(r) = 0$ para $r < R$ y $V(r) = V_0$ para $r > R$, donde R es el radio del QD. Las curvas en la figura 4, son similares a las de la figura 3, excepto que la dimensión fractal en este caso cae desde 3 hasta 0 cuando r crece, y el efecto del desbordamiento de la función de onda dentro de la región de las barreras, para un radio crítico $R < 0.35a_0^*$ (línea punteada en la figura 4) en este caso es aun más pronunciado.

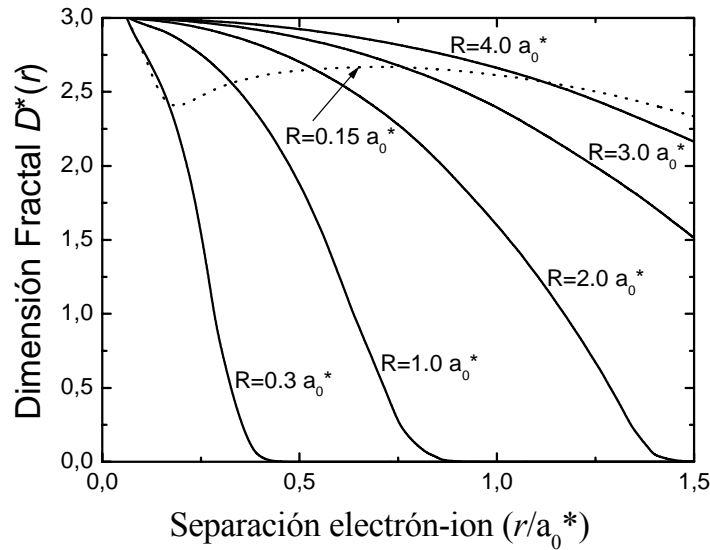


Fig 4. Dimensión fractal $D^*(r)$ como función de la separación electrón-ion r , para una donadora en un QD de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular, en el caso de campo magnético cero y para diferentes radios R del punto.

2.1.5 Comparación entre el método de dimensión fraccionaria y nuestro método de dimensión fractal. Para comparar la precisión de nuestro método de dimensión fractal y la del método de dimensión fraccionaria, podemos usar las expresiones (2.23) y (2.25) para calcular el parámetro de dimensión fraccionaria \bar{D} , para los casos de una donadora en un QW, un QWW, y un QD, todos con un potencial de confinamiento de forma rectangular. Los resultados obtenidos para este parámetro en el caso del D^0 centrado en un QW, QWW, y QD de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, en el caso de campo magnético cero, son presentados en las figuras 5 y 6.

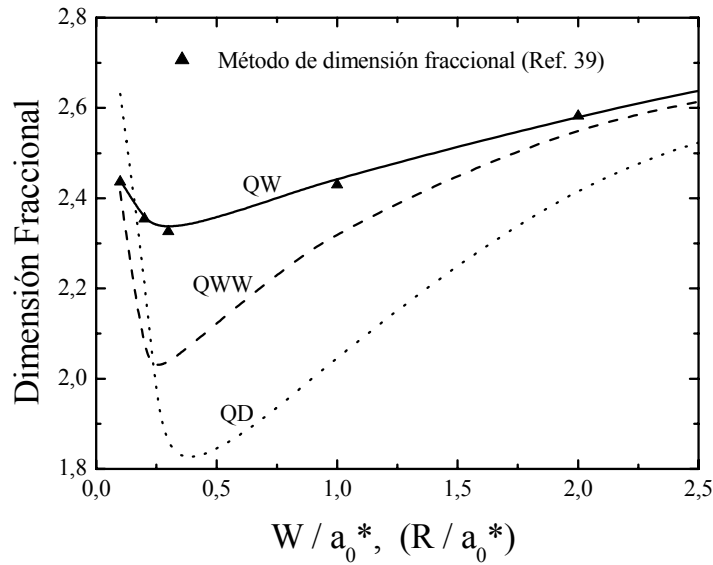


Fig. 5. Dimensión fraccionaria para un donador centrado en diferentes heterojunturas de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ como función del tamaño de la heterojuntura.

En la figura 5, se puede ver que para el caso de un pozo, nosotros obtenemos la dimensión fraccionaria similar a la obtenida en la referencia [39], a pesar de que nuestro método es completamente diferente. Debido a esto, podemos suponer que diferentes definiciones del promedio de la dimensión fraccionaria proporcionan resultados similares en el caso de campo magnético cero, y como lo mostraremos mas adelante, un mejoramiento de esta aproximación se puede lograr solo si se toma en cuenta que la dimensión no es la misma en diferentes partes de una heterojuntura. En la figura 5 se puede ver que para todas las heterojunturas, la dimensión fraccionaria promedio \bar{D} , decrece cuando sus tamaños (ancho W en el caso del pozo, y radio R en el caso del hilo cilíndrico y del punto esférico) se reducen hasta un valor crítico W_c (R_c). Esto sucede debido a que en ese valor crítico el nivel del estado base se sale del confinamiento y la función de onda electrónica recupera rápidamente su carácter tridimensional.

Usando el principio de incertidumbre, podemos calcular analíticamente el valor de W_c (R_c). Para esto tomamos en cuenta el hecho de que al momento del desbordamiento de la función de onda, la distribución de probabilidad electrónica dentro del pozo llega a ser casi homogénea. Después de algunos cálculos sencillos llegamos a las siguientes expresiones

aproximadas para el tamaño crítico de la heterojuntura: $W_c/a_0^* \approx [3Ry^*/V_0]^{1/2}$, para un QW, $R_c/a_0^* \approx [2Ry^*/V_0]^{1/2}$, para un QWW y $R_c/a_0^* \approx [15Ry^*/4V_0]^{1/2}$ para un QD. Considerando que la altura de la barrera en una heterojuntura de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ es aproximadamente $40Ry^*$ y usando las anteriores expresiones encontramos los valores correspondientes $W_c/a_0^* \approx 0.27$, $R_c/a_0^* \approx 0.22$ y $R_c/a_0^* \approx 0.31$, los cuales están en buena concordancia con la posición de los picos (0.28; 0.24 y 0.33 respectivamente) en las curvas de la figura 5. Cuando el tamaño de la heterojuntura llega a ser menor que el correspondiente tamaño crítico, la dimensión fraccional crece rápidamente y tiende a 3 a medida que el tamaño de la heterojuntura tiende a 0.

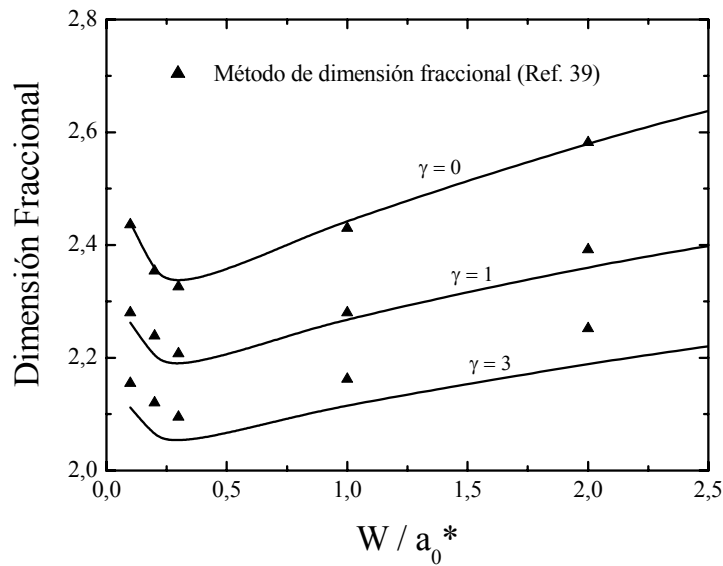


Fig. 6. Dimensión fraccionaria como función del ancho de un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, para diferentes intensidades del campo magnético.

En la figura 6 presentamos nuestros resultados de la dimensión fraccionaria, como función del ancho de un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, para diferentes intensidades del campo magnético. Allí se puede ver que nuestros resultados están en buena correspondencia con los resultados presentados en la referencia 39 (triángulos sólidos), en los casos de débil y moderados campos magnéticos, pero hay una considerable diferencia para campos magnéticos altos. Esto indica que el método de dimensión fraccional no es una buena herramienta para los casos de campos magnéticos altos. Para corroborar esto, mas adelante, en la figura 7 presentamos resultados de la energía de enlace para el estado base de un D^0 en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QW, los cuales fueron obtenidos usando los métodos de dimensión fractal y dimensión fraccional. En la figura 7, comparamos nuestros resultados con los correspondientes cálculos hechos por T. Pang y colaboradores, quienes usaron el método Monte Carlo [22,23], también con los resultados obtenidos por Reyes-Gomez y co-investigadores, quienes usaron el método de dimensión fraccionaria [39] y también con los resultados obtenidos por Fraizzoli y coautores, quienes usaron el método variacional [83]. En esta figura se puede ver una excelente concordancia entre los resultados obtenidos usando el método de dimensión fractal y el método Monte Carlo,

considerando la relativa simplicidad de nuestro procedimiento y tomando en cuenta que el error en los cálculos Monte Carlo es de $0.02Ry^*$. También se puede ver que la concordancia entre estos dos métodos mejora en el caso de fuertes campos magnéticos. Similarmente, es notable la concordancia entre nuestros resultados (líneas sólidas) y aquellos obtenidos previamente usando el método variacional [83] (triángulos abiertos). En contraste, la concordancia entre los resultados obtenidos con el método de dimensión fraccionaria (líneas punteadas son nuestros cálculos y los triángulos sólidos son los resultados de la referencia 39) y el método Monte Carlo (círculos abiertos) es mala y llega a ser peor en el caso de fuertes campos magnéticos. Este resultado comprueba una vez más que el método de dimensión fraccionaria no es bueno en el caso de fuertes campos magnéticos (hecho que es enfatizado en la referencia 39).

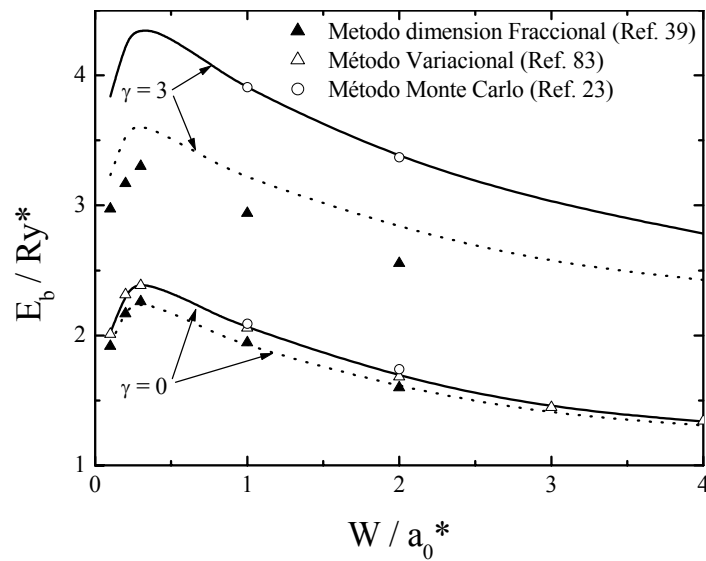


Fig. 7. Energía de enlace de un D^0 centrado en un QW de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As QW, como función del ancho del pozo, para diferentes campos magnéticos.

2.2 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO

En esta sección describiremos el método que usamos para resolver el problema de una partícula en una heterojuntura semiconductor con un potencial de confinamiento arbitrario. Este método es también aplicado para resolver la ecuación de Schrödinger para un campo central en un espacio con dimensión fractal. Por esta razón haremos una descripción general del método, de manera que sea aplicable para varias situaciones.

Supongamos que queremos resolver el siguiente problema de contorno

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d\psi(r)}{dr} \right] + V(r) \psi(r) = E \psi(r); \quad ; \quad (2.31)$$

$$0 < r < \infty; \quad \psi(0) < \infty; \quad \psi(\infty) = 0$$

donde el potencial $V(r)$ puede tener cualquier forma arbitraria, y solo debe cumplir la condición de que debe existir un límite finito de este potencial para grandes valores r . El Jacobiano $J(r)$ en la ecuación (2.31) debe cumplir las siguientes dos condiciones

$$J(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} Cr^\alpha \quad (2.32)$$

$$h(r) = J'(r)/J(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} C_1 < \infty \quad (2.33)$$

La ecuación (2.31) tiene dos dificultades para los cálculos numéricos: una es que la primera condición de frontera $\psi(0) < \infty$ es difícil utilizar en los cálculos numéricos, y la otra es que en el punto $r=0$ tiene singularidad en el término $h(0) = \infty$. Para evitar estas dificultades hacemos el cambio de variable:

$$\psi(r) = \chi(r)/r^p; \quad p = \alpha/2; \quad (2.34)$$

de manera que la ecuación (2.31) se reduce a:

$$\chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) = 0; \quad (2.35)$$

$$w(r) = h - 2p/r; \quad u(r) = E - V(r) + p[(p+1)/r - h]/r;$$

con las condiciones de frontera:

$$\chi(0) = 0; \quad \chi(\infty) = 0 \quad (2.36)$$

Nótese que en esta ecuación diferencial (2.35) ahora no tiene la singularidad que tenía inicialmente, puesto que ahora el coeficiente del segundo término $w(r) \rightarrow \alpha/r - 2p/r \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow 0$. Como en el cálculo numérico no existe un punto en el infinito tenemos que sustituir la segunda condición de frontera por otra en un punto suficientemente lejano el cual lo denotamos R_{\max} . De manera que ahora el problema de contorno (2.35)-(2.36) puede escribirse como:

$$\chi''(r) + w(r)\chi'(r) + u(r)\chi(r) = 0; \quad (2.37)$$

$$0 < r < R_{\max}; \quad \chi(0) = 0; \quad \chi(R_{\max}) = 0;$$

Para resolver este problema de contorno (2.37) utilizaremos coordenadas polares de Poincare:

$$\chi(r) = A(r)\cos \vartheta(r); \quad \chi'(r) = A(r)\sin \vartheta(r). \quad (2.38)$$

Derivando la primera relación y sustituyendo la expresión obtenida para la derivada $\chi'(r)$ en la segunda ecuación se obtiene:

$$A'(r) = A(r) \frac{\sin \vartheta(r)}{\cos \vartheta(r)} [\vartheta'(r) + 1]. \quad (2.39)$$

Por otro lado sustituyendo las expresiones (2.38) en la ecuación (2.37) y utilizando la relación (2.39) entre $A'(r)$ y $A(r)$ se obtiene la ecuación diferencial para la función $\vartheta(r)$:

$$\vartheta'(r) = -[\sin^2 \vartheta(r) + u(r)\cos^2 \vartheta(r) + w(r)\sin \vartheta \cos \vartheta] \quad (2.40)$$

y luego la función $A(x)$ se calcula como:

$$A(r) = \exp\left\{\int_0^r \left[[1 - u(r)] \sin \mathcal{G}(r) \cos \mathcal{G}(r) - w(r) \sin^2 \mathcal{G}(r) \right] dr \right\}; \quad A(0) = 1 \quad (2.41)$$

Las condiciones de frontera para el problema (2.35), ahora se pueden escribirse como:

$$\mathcal{G}(0) = \pi/2; \quad \mathcal{G}(R_{\max}) = \pi/2 - \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.42)$$

aquí n es el número del nivel, el estado base corresponde a $n = 1$, y el valor $n - 1$ da el número de los nodos de la parte radial de la función de onda.

La ecuación diferencial (2.40) junto con la primera condición en la relación (2.42) definen un problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden, el cual puede resolverse numéricamente para cada valor del parámetro $E \equiv E_n$ (la energía del nivel número n buscada) dado, y esta solución puede considerarse como una función de dos variables $\mathcal{G} = \mathcal{G}(r, E_n)$ y entonces la segunda condición de frontera en la relación (12) lleva a una ecuación trascendente para la energía E :

$$\mathcal{G}(R_{\max}, E_n) = \pi/2 - \pi n \quad (2.43)$$

la cual resolvemos utilizando el método de bisección.

2.3 MODELOS DE POTENCIAL

La forma del potencial de confinamiento en las heterojunturas semiconductoras esta determinado por los saltos de las energías correspondientes a los pisos de las bandas de conducción en las juntas. Estos saltos de energías dependen de varios factores tales como, los cambios bruscos de la constante dieléctrica [100], defectos de tensión [101], de contenido [102] o voltaje externo [103]. Para analizar teóricamente los efectos de confinamiento sobre los espectros de impurezas en las heterojunturas semiconductoras, comúnmente se utilizan modelos de confinamiento con potenciales de forma rectangular o parabólica. Sin embargo estas dos formas de confinamiento no son lo suficientemente flexibles para describir adecuadamente los potenciales reales [104], los cuales tienen forma parabólica cerca del piso de la banda de conducción y no-parabólica en la región de las juntas, tal como lo corrobora la solución numérica de la ecuación de Poisson [105]. Para tratar de describir adecuadamente el perfil de los potenciales en las heterojunturas semiconductoras, anteriormente se han utilizado modelos tales como Wood-Saxon [82] y funciones de potencia [104]. Aquí en este trabajo doctoral, nosotros consideramos una nueva forma de potencial, la cual es lo suficientemente flexible para aproximar el potencial real en diferentes tipos de heterojunturas.

Para el caso de heterojunturas de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, asumimos que la concentración de aluminio (Al), en las juntas varia en forma gradual y debe ser representada por una función que varié suavemente. De manera que para representar esta variación de la

concentración de aluminio, introducimos una forma no abrupta de la función paso, la cual es definida como:

$$\theta(r, r_0, \lambda) = \begin{cases} 0; & r < r_0 - \lambda \\ \left[\frac{(r - r_0)^2}{\lambda^2} - 1 \right]^2; & r_0 - \lambda \leq r < r_0, \\ 1; & r \geq r_0 \end{cases} \quad (2.44)$$

Aquí a diferencia con la común función paso de Heaviside, se introdujo el parámetro adicional, λ el cual controla la forma de la función paso y puede ser asociado con el ancho de la región transitoria en las juntas. Cuando $\lambda \rightarrow 0$ la función (2.44) se transforma en la función de Heaviside. Usando esta función paso, se puede representar el potencial de confinamiento en diferentes heterojuntas.

En lo que sigue, asumiremos que la variación espacial de la concentración de aluminio $c(\vec{r})$ en una heterojuntura de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ viene dada por la función (2.44) en la siguiente forma:

$$c(\vec{r}) = x\theta(\vec{r}, \vec{r}_0, \lambda) = F(\vec{r}, \vec{r}_0, x, \lambda) \quad (2.45)$$

y asumiremos que el desplazamiento de los extremos en las bandas de conducción, el cual define la forma del potencial de confinamiento, esta relacionado con la concentración $c(\vec{r})$ de acuerdo con la formula de interpolación

$$V(\vec{r}) = 0.6 \left[1.36c(\vec{r}) + 0.22c^2(\vec{r}) \right] (eV). \quad (2.46)$$

Para analizar los efectos del confinamiento sobre las energías de enlace de un D^0 y un D^- en una heterojuntura de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, consideraremos diferentes modelos de potencial, los cuales serán descritos en cada caso particular.

3. CÁLCULOS Y RESULTADOS

En la sección 1.4, hicimos algunos comentarios sobre los métodos que se han utilizado para calcular algunas características de impurezas D^0 y D^- confinadas en heterojunturas semiconductoras. Sin embargo en esta sección es importante recordar algunos datos importantes sobre el tratamiento que se ha dado a estos problemas, con el fin de resaltar cual será nuestro aporte para mejorar estas soluciones, así como también reconocer los novedosos cálculos y resultados que nos permite nuestro método. Para esto, en el tratamiento de cada heterojuntura haremos un comentario sobre algunos resultados obtenidos por otros autores.

3.1 ENERGÍA DE ENLACE DEL ESTADO BASE DE IMPUREZAS D^0 Y D^- EN DIFERENTES HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

En esta sección presentamos los cálculos y resultados para los casos de impurezas D^0 y D^- en pozos (QWs), hilos (QWWs) y puntos (QDs) cuánticos de $GaAs-(Ga,Al)As$, bajo la presencia de un campo magnético uniforme. Inicialmente consideremos los problemas en la aproximación de banda parabólica, no degenerada, y además asumiremos que la masa efectiva m^* y la constante dieléctrica ϵ , son uniformes en la heterojuntura. En secciones posteriores consideraremos variación de estos parámetros y también presentaremos cálculos de energía de enlace para estados excitados.

Para calcular la energía de enlace del estado base de un D^0 y D^- en una heterojuntura semiconductor, debemos resolver los problemas (2.3), (2.4) y (2.14), y una vez que las energías E_0 , $E(D^0)$ y $E(D^-)$ son evaluadas, la energía de enlace para estos sistemas puede ser obtenida en una forma sencilla a través de:

$$E_b(D^0) = E_0 - E(D^0); \quad E_b(D^-) = E_0 + E(D^0) - E(D^-) \quad (3.1)$$

Para estimar la energía $E(D^-)$ para el estado base de una impureza D^- confinada en una heterojuntura, finalmente debemos resolver el problema (2.17). Para esto, usamos como función de correlación $\Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12})$, una función de prueba tipo Hylleraas [13] en la forma:

$$\Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12}) = e^{-\alpha s} (1 + \beta t^2 + \eta u) \quad (3.2)$$

donde α , β y η son parámetros variacionales y $s = r_1 + r_2$, $t = r_1 - r_2$, $u = r_{12}$ son las coordenadas de Hylleraas. Siguiendo el procedimiento de cálculo usado por Hylleraas [13] para las integrales múltiples, obtenemos la siguiente forma explícita para la energía variacional como función de los parámetros α , β y η :

$$E(D^-, \alpha, \beta, \eta) = 2E_0 + 2\alpha^2 + \frac{\int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) P\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) R_1(s, t) dt}{\int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) P\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) R_0(s, t) dt}, \quad (3.3)$$

donde

$$\begin{aligned} R_1(s, t) = & 2(s-t) \left[(s^2 - t^2)(1 + \beta t^2)^2 + 4\beta \eta s^2 t^2 + 2\alpha \eta s t^2 (1 + \beta t^2) \right] + \\ & (s^2 - t^2) \left\{ 2s\alpha \eta^2 t^2 - 4s(1 + \beta t^2)^2 + (s^2 - t^2) \left[4\beta^2 t^2 + 2\eta(1 + \beta t^2) + \eta^2 \right] \right\} - \\ & \frac{2\eta}{3} (s^3 - t^3) \left[4\beta t^2 + 2s(4 + \alpha)(1 + \beta t^2) - \eta(s^2 - t^2) \right] - \eta^2 s (s^4 - t^4) (\alpha + 2) \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$R_0(s, t) = (s^2 - t^2) \left[\frac{1}{2} (s^2 - t^2)(1 + \beta t^2)^2 + \frac{2\eta}{3} (s^3 - t^3)(1 + \beta t^2) + \frac{\eta^2}{4} (s^4 - t^4) \right]$$

Luego la energía variacional $E(D^-)$ puede ser encontrada minimizando la expresión (3.3) con respecto a los parámetros α , β y η . Esto es:

$$E(D^-) = \min_{\alpha, \beta, \eta \in (0,1)} E(D^-, \alpha, \beta, \eta) \quad (3.5)$$

En lo que sigue, presentamos los resultados de la siguiente manera: en cada tipo de heterojuntura, inicialmente haremos una descripción general del problema y presentaremos algunos resultados que verifican la validez y precisión de nuestro método de dimensión fractal en el caso de las impurezas centradas en cada heterojuntura, y posteriormente hacemos un análisis de estos problemas considerando las impurezas descentradas.

3.1.1 Pozos cuánticos (QWs). Los problemas de impurezas D^0 y D^- en pozos cuánticos, han sido extensivamente estudiados tanto teórica como experimentalmente, y se ha establecido que hay un incremento en la energía de enlace en estos sistemas debido al confinamiento en la dirección de crecimiento. Además si se aplica un campo magnético orientado en la misma dirección, este produce un confinamiento adicional en el plano perpendicular a la dirección del campo, el cual hace crecer aun más la energía de enlace y contrae la distribución de densidad electrónica en esa dirección. No obstante esto, los cálculos de la energía de enlace de una impureza D^- descentrada en un pozo cuántico, realizados por Zhu y Xu [27], y también por C. Rivas y colaboradores [33], muestran que

en el caso de campos magnéticos fuertes, es posible un decrecimiento de la energía de enlace de este sistema. Estos autores explican este comportamiento, aduciendo que el efecto del confinamiento de los dos electrones en el plano perpendicular al campo, lleva a un aumento en la repulsión entre ellos. En las funciones de ondas que ellos usaron en sus cálculos, consideran separadamente el movimiento en la dirección z y en el plano perpendicular para simplificar el procedimiento numérico. Además consideran la correlación electrón-electrón solo en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento y asumen que ni el desplazamiento del ion desde el centro, ni el campo magnético, cambian la simetría de la distribución de los electrones en la dirección z . Mientras que es claro que la atracción de los electrones hacia el ion, y el confinamiento en el plano perpendicular al campo, podría desplazar el centro de la distribución electrónica en la dirección de la posición del ion, para compensar cualquier incremento de la repulsión electrón-electrón. Este desplazamiento puede ser grande o pequeño, dependiendo de la posición del ion y de la intensidad del campo.

Para tener en cuenta este posible desplazamiento, uno puede incluir en la función de prueba usada en las referencias [27,39], un parámetro variacional adicional que pueda analizar la posible variación de la posición promedio de los electrones y la correlación entre ellos en la dirección z .

En un pozo cuántico, el potencial de confinamiento $V(\vec{r})$, depende solo de la coordenada z , por lo tanto, la solución de la ecuación de onda (2.21), para el electrón libre puede ser encontrada en forma explícita como:

$$f_0(\vec{r}) = \exp(-\gamma \rho^2 / 4) f_z(z), \quad (3.6)$$

donde $f_z(z)$ es solución de la siguiente ecuación de onda:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z) \right] f_z(z) = E_z f_z(z); \quad E_0 = E_z + \gamma \quad (3.6a)$$

correspondiente a la energía mas baja E_z . Además en este caso uno puede asumir que $\xi_\rho = 0$, de manera que la fórmula (2.20) para $P(r)$ puede simplificarse como:

$$P(r) = \frac{2\pi \exp(-\gamma r^2 / 2)}{r} \int_{-r}^r \exp(\gamma z^2 / 2) f_z^2(z + \xi_z) dz, \quad (3.7)$$

siendo ξ_z la posición del ión a lo largo del eje z , la cual es medida desde el centro del pozo. Primeramente haremos una análisis del problema considerando que la impureza esta ubicada en el centro del pozo, esto es $\xi_z = 0$, y más adelante consideraremos la impureza en cualquier posición.

3.1.1.1 Un D^0 y un D^- centrado en QWs. Para verificar la validez y precisión de nuestro método consideremos inicialmente el caso de un pozo cuántico con un potencial de confinamiento de forma rectangular, para el cual la solución de la ecuación (3.6a) es bien conocida, y calculemos las energías de enlace $E_b(D^0)$ y $E_b(D^-)$ considerando que las impurezas están ubicadas en el centro de un pozo de $GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As$.

En la siguiente tabla mostramos resultados para pozos de anchos 100 Å y 200 Å y para varios valores del campo magnético, y comparamos con resultados obtenidos por otros autores, los cuales usaron el método Monte Carlo [23] y el método variacional considerando una función de prueba tipo Chandrasekhar con 5 parámetros variacionales [29].

Tabla 1. Comparación de la energía (en Ry*) de enlace de un D^0 y D^- en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As$, con resultados del método Monte Carlo [23] y el método variacional [29].

Impureza	γ	L(Å)	Nuestros cálculos	Cálculos con Monte Carlo	Cálculos Variacionales
D^-	0	100	0.283	0.29	0.252
		200	0.233	0.23	0.214
	1	100	0.787	0.77	0.736
		200	0.674	0.65	0.641
	3	100	1.136	1.13	1.082
		200	0.950	0.94	0.910
D^0	0	100	2.059	2.09	2.096
		200	1.694	1.74	1.701
	1	100	2.876	2.92	2.894
		200	2.475	2.52	2.441
	3	100	3.880	3.89	3.858
		200	3.342	3.36	3.242

En esta tabla se puede ver que nuestros resultados están dentro de un intervalo de validez, cuando comparamos con los mejores resultados dados por el método Monte Carlo, los cuales tienen un error de $\pm 0.02Ry^*$. De esta manera podemos decir que las funciones de ondas que asumimos en nuestro método son razonables y los resultados numéricos son lo suficientemente precisos si se tiene en cuenta la simplicidad de nuestro método y que en el caso del D^- solo usamos una función variacional de tres parámetros.

En la figura 8, presentamos la energía de enlace $E_b(D^-)$ de una impureza D^- centrada en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, como función del ancho W , y para dos valores diferentes del campo magnético, $\gamma=0$ y $\gamma=1$. En esta figura las curvas punteadas representan los resultados del calculo variacional de la referencia [28] los cuales fueron obtenidos usando una función de prueba tipo Chandrasekhar.

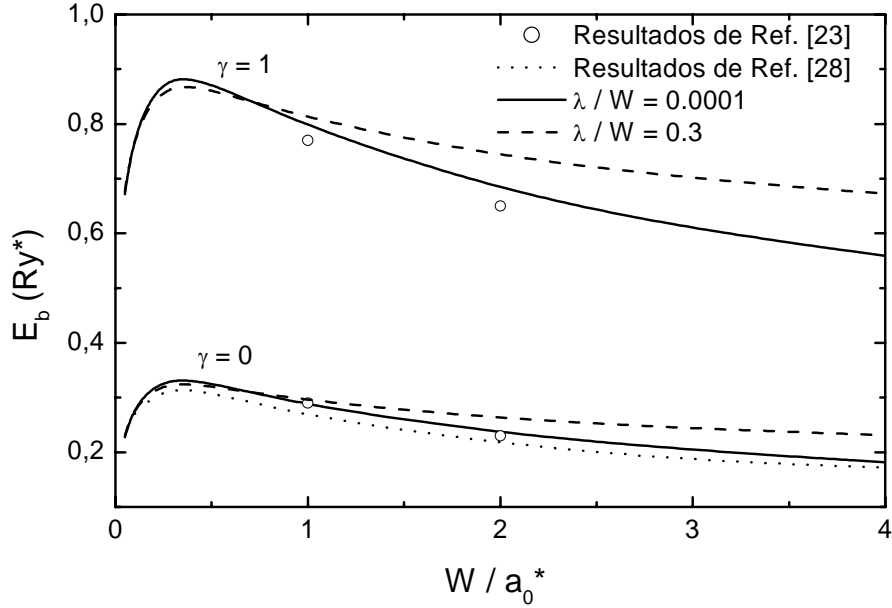


Fig. 8. Energía de enlace para el estado base un D^- centrado en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Las líneas punteadas muestran los resultados del calculo variacional tomados de la referencia [28] y los círculos abiertos representan los resultados con el método Monte Carlo [23] para un pozo de $GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As$, como función del ancho del pozo.

La pequeña discrepancia entre las líneas sólidas y las punteadas, se debe a que en nuestros cálculos usamos una función de prueba diferente a la usada en la referencia [28]. Se sabe que el valor exacto de la energía de enlace de un ion de hidrogeno negativamente cargado es $0.0555Ry^*$, y que en los cálculos variacionales, la función de prueba tipo Chandrasekhar da una mejor aproximación a este valor ($0.0518Ry^*$), que la función de Hylleraas con tres parámetros ($0.0506Ry^*$), y peor que con 6 parámetros ($0.0529Ry^*$) [13]. Pero comparando valores para otros átomos con dos electrones e iones (He, Li^+ , etc.), se encuentra que el valor obtenido para estas energías a partir de cálculos variacionales, mejora rápidamente con el aumento del número de parámetros en una función de prueba tipo Hylleraas. También se sabe que entre mayor sea la carga del núcleo, menor es la separación electrón-ion y más débil es el efecto que un electrón ejerce sobre el otro. Similarmente, entre más estrecho es el pozo, más cerca están los electrones del ion y menor es el efecto entre los electrones, de manera que mejor es la convergencia del valor de la energía de enlace con el aumento del número de parámetros en la función de prueba tipo Hylleraas. Por consiguiente, nuestros resultados para la energía de enlace, para valores intermedios del ancho del pozo, cuando el efecto del confinamiento es significativo, son un poco más altos, mientras que para muy pequeños y muy grandes anchos, están un poco más bajos en comparación con aquellos tomados de la referencia [28]. Adicionalmente, los resultados obtenidos con el método Monte Carlo [23] para un pozo de $GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As$ (círculos abiertos en la Fig. 8), están en una mejor concordancia con nuestros resultados (líneas sólidas en la Fig. 8), tomando en cuenta que en un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ el confinamiento es más fuerte y por consiguiente la energía debe ser más grande que en un pozo de $GaAs/Ga_{0.75}Al_{0.25}As$.

En la figura 9 mostramos los resultados de la energía de enlace como función del campo magnético, para una D^- confinada en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con dos perfiles diferentes del potencial de confinamiento (ver figura insertada en la figura 9): potencial rectangular (curvas sólidas) y potencial suave (curvas truncadas), para dos valores del ancho del pozo, 50 Å y 200 Å. Los círculos sólidos en esta figura, muestran los resultados de la referencia [33] para la misma heteroestructura con un potencial rectangular. Se puede observar una discrepancia significativa entre nuestros resultados y aquellos de la referencia [33] cuando crece la intensidad del campo magnético. Esto se debe al hecho de que cuando el campo magnético es fuerte el confinamiento crece y como anotamos anteriormente, cuanto mayor es el confinamiento, mayor es la precisión de los resultados variacionales con una función de prueba tipo Hylleraas con tres parámetros. Uno puede notar la inversión del orden de las curvas correspondiente a diferentes tipos de potenciales de confinamiento cuando el ancho del pozo decrece de 200Å hasta 50Å, esto se debe a que cuando el ancho del pozo es 50Å, el potencial rectangular produce un mayor confinamiento que el potencial con barrera suave, mientras que ocurre lo contrario cuando el ancho del pozo es 200Å.

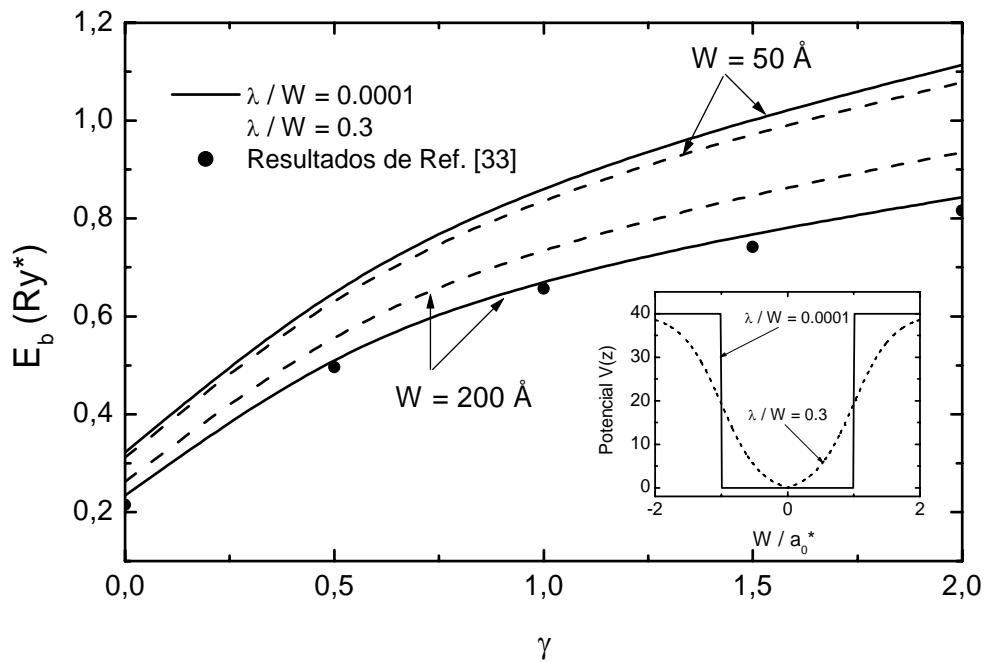


Fig. 9. Energía de enlace como función del campo magnético para un D^- centrado en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Los círculos sólidos muestran los resultados de la referencia [33].

3.1.1.2 Un D^0 descentrado en un QW. Ahora hagamos el análisis del problema considerando que las impurezas pueden estar ubicadas en cualquier parte, a una distancia ξ_z medida desde el centro del pozo (ver esquema en la siguiente figura). Para esto consideraremos el caso de un pozo con un potencial rectangular el cual definimos como: $V_z(z)=0$ para $|z| < L/2$ y $V_z(z)=V_0$ para $|z| > L/2$, donde L es el ancho del pozo.

$$-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \left[\rho \frac{d}{d\rho} \Phi_{D^0}(\rho) \right] - V_{eff}(\rho, \tau) \Phi_{D^0}(\rho) = [E(\tau) - E_z] \Phi_{D^0}(\rho) \quad (3.10)$$

donde el potencial efectivo esta dado por

$$V_{eff}(\rho, \tau) = \left[\tau^2 - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f_z^2(z)(1 + \tau z)^2}{\sqrt{\rho^2 + (z - \xi_z)^2}} dz \right] / I(\tau) + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} \quad (3.11)$$

con

$$I(\tau) = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} f_z^2(z)(1 + \tau z)^2 dz = I_0 + \tau^2 I_2; \quad (3.11a)$$

$$I_n = 2\pi \int_{-\infty}^{\infty} f_z^2(z) z^n dz; \quad I_0 = 1; \quad I_{2n+1} = 0$$

y para la función de prueba (3.9), se llega a:

$$-\frac{1}{J(r, \tau)} \frac{d}{dr} \left[J(r, \tau) \frac{d}{dr} \Phi_{D^0}(r) \right] - \tilde{V}_{eff}(r, \tau) \Phi_{D^0}(r) = [E(\tau) - E_0] \Phi_{D^0}(r) \quad (3.12)$$

donde el Jacobiano $J(r, \tau)$, y el potencial efectivo $\tilde{V}_{eff}(r, \tau)$ están dados por:

$$J(r, \tau) = 4\pi r^2 P(r, \tau); \quad P(r, \tau) = \frac{1}{2r} I_0(r, \tau); \quad (3.13)$$

$$\tilde{V}_{eff}(r, \tau) = -2I_1(r, \tau)/I_0(r, \tau)$$

con

$$I_0(r, \tau) = \int_{-r}^r e^{-\gamma(r^2 - z^2)/2} f_z^2(z + \tau \xi_z) dz; \quad (3.13a)$$

$$I_1(r, \tau) = \int_{-r}^r \frac{e^{-\gamma(r^2 - z^2)/2} f_z^2(z + \tau \xi_z)}{\sqrt{r^2 - 2\xi_z(1 - \tau)z + \xi_z^2(1 - \tau)^2}} dz$$

Para resolver las ecuaciones diferenciales (3.10) y (3.12), utilizamos el procedimiento de barrido trigonométrico (sección 2.2) y definimos la energía de enlace para el estado base del D^0 como $E(D^0) = \min_{\tau} E(\tau)$.

En la figura 11 presentamos los resultados de la energía de enlace como función del campo magnético, para un D^0 ubicado en diferentes posiciones dentro de un pozo de ancho $L = 2a_0^*$ y con una barrera de potencial de altura $V_0 = 80 Ry^*$. Estos resultados fueron obtenidos a partir de la ecuación diferencial (3.10). Las líneas sólidas representan los resultados obtenidos minimizando la energía variacional con respecto al parámetro τ , mientras que las líneas truncadas muestran los resultados encontrados para el valor fijo $\tau = 0$.

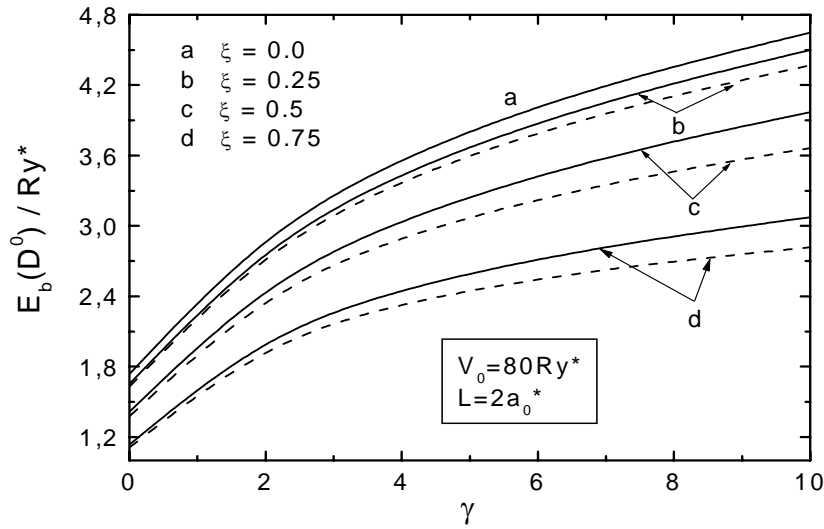


Fig. 11. Energía de enlace $E_b(D^0)$ como función del campo magnético, para un D^0 ubicado en las posiciones $\xi/a_0^* = 0.0, 0.25, 0.5$ y 0.75 dentro de un QW. Las líneas sólidas representan los resultados obtenidos minimizando la energía variacional con respecto al parámetro τ , y las líneas truncadas representan los resultados encontrados para el valor fijo $\tau = 0$.

En la figura 11, se puede ver que al tomar en cuenta el posible desplazamiento del máximo de la densidad electrónica, se encuentra que la energía de enlace es mayor que cuando no se tiene en cuenta este desplazamiento, lo cual llega a ser más notable cuando el campo magnético aumenta considerablemente. El incremento del desplazamiento del máximo de la densidad electrónica a medida que aumenta el campo magnético, se puede ver más claramente en la figura 12, en donde presentamos el valor promedio $\langle z \rangle$ del desplazamiento del electrón desde el centro del QW, como una función de la posición del ion, para diferentes campos magnéticos, y calculados usando la función de prueba (3.8) para un pozo de ancho $L=2a_0^*$ y una altura de barrera $V_0 = 80 Ry^*$.

En la figura 12 se puede ver que para todas las intensidades del campo magnético, el valor promedio $\langle z \rangle$, inicialmente crece con el incremento del desplazamiento del ion desde el centro del pozo, hasta que alcanza un valor máximo y empieza a decrecer para grandes valores del desplazamiento ξ_z . Podríamos considerar el máximo de estas curvas como el mayor desplazamiento de la densidad electrónica, producido por la traslación de la posición del ion en dirección a la barrera. También podemos considerar que en las posiciones del ion correspondientes a la parte creciente de estas curvas, el electrón está más ligado con el ion que con la barrera del pozo. Por el contrario, en las posiciones del ion correspondientes a la parte decreciente de estas curvas, el electrón puede ser considerado más ligado con la barrera del pozo que con el ión impureza. A partir de la figura 12, también se puede analizar que el incremento del campo magnético, produce tanto un incremento en el máximo alcanzado por el valor promedio $\langle z \rangle$, como también un incremento en el máximo

desplazamiento que puede tener el ión, para el cual, el electrón aun puede ser considerado como ligado al ión impureza.

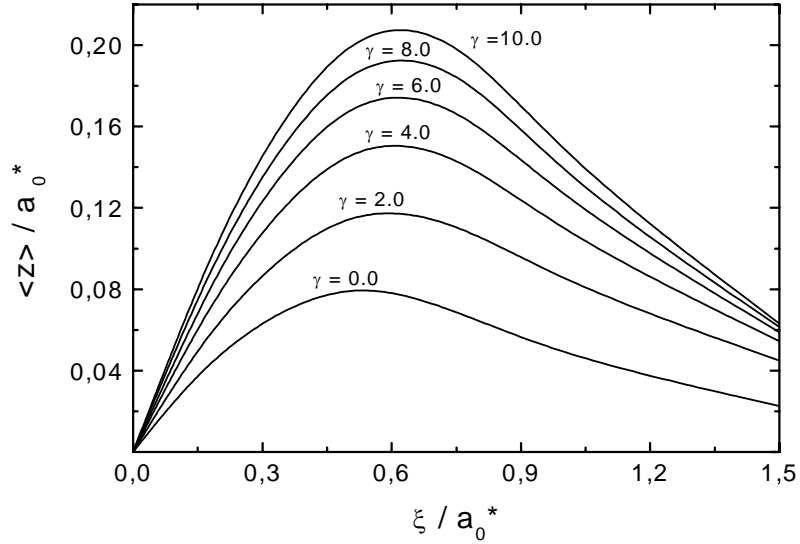


Fig. 12. Valor medio del desplazamiento del electrón desde el centro del QW, como función de la posición del ión, para diferentes intensidades del campo magnético

Estos resultados nos confirman que cualquier variante de la función de prueba (3.8), que tome en cuenta un desplazamiento del máximo de la densidad electrónica a lo largo del eje z , nos dará una energía para el estado base de un D^0 que será más baja que aquella calculada con una función de onda que no tenga en cuenta este desplazamiento. Por consiguiente, nosotros consideramos que con la función (3.9), nuestro método escogerá la función de prueba que de la menor energía para el estado base de este problema.

Los resultados de los cálculos realizados usando la función de prueba (3.9) y la ecuación (3.12), son presentados en la figura 13 y en la tabla 2, en donde comparamos con resultados obtenidos con la función de prueba (3.8) y la ecuación (3.10). A partir de la figura 13 y la tabla 2, se puede ver que las energías obtenidas a partir de la ecuación (3.12), son más grandes que aquellas que se obtienen de la ecuación (3.10), y la diferencia crece a medida que la intensidad del campo magnético aumenta. Nótese que los resultados obtenidos con la función de prueba (3.8) con el valor fijo $\tau = 0$ (líneas punteadas) coinciden con aquellos de la referencia [27], y cuando el ión esta descentrado, estos resultados están siempre considerablemente por debajo de los resultados mostrados por las líneas sólidas y truncadas. Esto demuestra que la función de prueba con el parámetro variable τ describe más adecuadamente la simetría del sistema. Además, en la tabla 2 podemos ver que: i) cualquier cálculo que incluya la posibilidad de desplazamiento del máximo de la distribución electrónica a lo largo del eje z [columnas (a), (c) y (d)] da energías superiores en comparación con los resultados obtenidos con funciones de pruebas con el máximo de la distribución electrónica en el centro del QW [columnas (b) y (e)]; ii), la diferencia entre

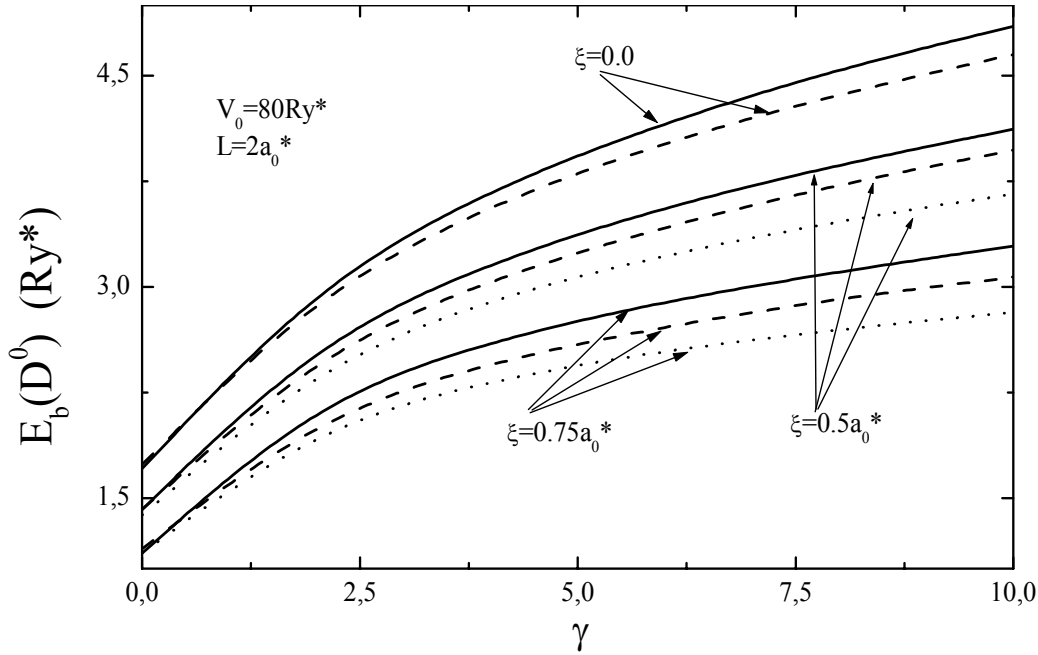


Fig. 13. Energía de enlace $E_b(D^0)$ como función del campo magnético, para un D^0 ubicado en las posiciones $\xi/a_0^* = 0.0, 0.5$ y 0.75 dentro de un QW . Las líneas sólidas representan los resultados obtenidos a partir de la ecuación (3.12), minimizando la energía variacional con respecto al parámetro τ . Las líneas punteadas representan los resultados encontrados a partir de la ecuación (3.10) para el valor fijo $\tau = 0$, mientras que las líneas troncadas representan resultados obtenidos a partir de la ecuación (3.10), pero minimizando el parámetro τ .

Tabla 2. Energías de enlace de un D^0 en un QW de ancho $2a_0^*$ y altura de barrera $80Ry^*$. Estas energías fueron obtenidas usando la función de prueba (3.8) (columnas a y b) y la función (3.9) (columnas c, d y e) para diferentes posiciones del ion y diferentes campos magnéticos. Las correspondientes energías fueron obtenidas variando el parámetro τ (columnas b y c), y para valores fijos $\tau = 1$ (columnas a y d) y $\tau = 0$ (columna e)

γ	$\zeta = 0$		$\zeta = 0.25a_0^*$					$\zeta = 0.5a_0^*$					$\zeta = 0.75a_0^*$				
	b)	c)	a)	b)	c)	d)	e)	a)	b)	c)	d)	e)	a)	b)	c)	d)	e)
0	1.74	1.71	1.65	1.63	1.63	1.62	1.56	1.42	1.38	1.42	1.40	1.29	1.14	1.11	1.11	1.10	1.06
2	2.96	3.02	2.85	2.81	2.92	2.90	2.80	2.53	2.44	2.62	2.58	2.40	2.08	2.01	2.20	2.13	1.98
4	3.59	3.70	3.46	3.40	3.56	3.55	3.41	3.06	2.92	3.18	3.13	2.88	2.47	2.34	2.62	2.53	2.32
6	4.03	4.17	3.89	3.80	4.02	4.00	3.83	3.43	3.23	3.57	3.51	3.20	2.72	2.55	2.90	2.77	2.53
8	4.37	4.55	4.22	4.11	4.37	4.35	4.16	3.73	3.47	3.87	3.80	3.44	2.92	2.70	3.11	2.98	2.68
10	4.65	4.85	4.50	4.37	4.66	4.64	4.42	3.97	3.66	4.12	4.04	3.63	3.07	2.82	3.29	3.15	2.80

estos últimos resultados y los mejores cálculos variacionales [columna (c)] se incrementa significativamente cuando el campo magnético aumenta, y tiende al valor $0.5 Ry^*$, la cual es la energía de enlace de un D^- confinado en un QW ; iii) los resultados mostrados en la columna (c), los cuales fueron obtenidos optimizando el parámetro τ , y los correspondientes al valor fijo $\tau = 1$ [columna (d)] son muy similares, por consiguiente,

para un ión descentrado en un QW, la función de prueba (3.9) con $\tau = 1$ puede ser considerada como una buena aproximación para la función de onda real.

3.1.1.3 Un D^- descentrado en un QW. El último análisis hecho sobre los resultados anteriores, nos permite asumir que la función de prueba (3.9) con $\tau = 1$ tiene la suficiente flexibilidad para reflejar el cambio de simetría experimentado para el estado base de un D^- descentrado en un QW, y en presencia de un campo magnético fuerte. De manera que para este caso consideraremos la siguiente función de onda:

$$\Psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_0(\vec{r}_1) f_0(\vec{r}_2) \Phi_{D^-}(|\vec{r}_1 - \vec{\xi}|, |\vec{r}_2 - \vec{\xi}|, r_{12}), \quad (3.14)$$

la cual es exactamente igual a (2.15). Transfiriendo el origen de coordenadas a la posición del ion, y siguiendo el procedimiento descrito en la sección 2.1.2 llegamos a la ecuación diferencial (2.17), a partir de la cual se obtiene la energía de enlace teniendo en cuenta el procedimiento descrito en las ecuaciones (3.1) a (3.5).

En la figura 14 presentamos los resultados del cálculo de la energía de enlace del estado base de un D^- en QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de ancho 200\AA y altura de barrera 80 Ry^* , como función de la intensidad del campo magnético, y para diferentes posiciones del ión.

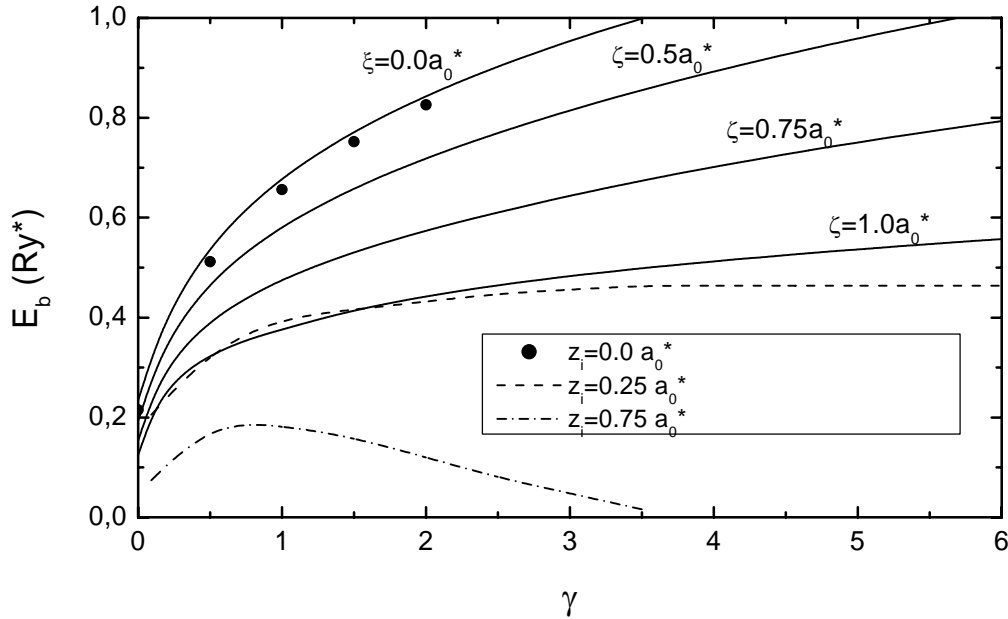


Fig. 14. Energía de enlace del estado base de un D^- en QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de ancho 200\AA y altura de barrera 80 Ry^* , como función del campo magnético, y para diferentes posiciones del donador. Las curvas sólidas representan nuestros resultados, mientras que las curvas truncadas y punteadas y los puntos sólidos representan los resultados de la referencia [27].

En esta figura se ve que para cualquier posición del ión, la energía de enlace (líneas sólidas) crece monótonamente con el campo magnético, de manera que no se observa ninguna inestabilidad para el estado base del D^- , lo cual está en total contraste con los datos teóricos presentados en la referencia [26], los cuales fueron obtenidos usando una función de onda

del tipo $\Psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_z(z_1)f_z(z_2)\Phi_{D^-}(\rho_1, \rho_2, \rho_{12})$, la cual es separable, pero a diferencia de la nuestra, aquí la función envolvente Φ_{D^-} , solo depende de las coordenadas en el plano y no incluye la posibilidad de la variación de la densidad de distribución electrónica a lo largo del eje z , y tampoco tiene en cuenta el posible incremento de correlación electrónica en la dirección z , a pesar de que estos efectos son esenciales para este sistema. Los electrones fuertemente confinados en un plano perpendicular al eje z , deben tender a incrementar su separación a lo largo de la dirección z , mientras que la coordenada z del máximo de la densidad de distribución electrónica debe desplazarse hacia la posición del ion, aumentando la atracción electrón-ión. Nosotros consideramos este hecho como la razón por la cual hay una discrepancia entre nuestros resultados y aquellos de la referencia [27].

3.1.2 Hilos cuánticos (QWWs). El problema de una impureza donadora neutra, confinada en un hilo cuántico (QWW), ha sido extensivamente estudiado teóricamente en las últimas dos décadas [36-38,66,69,88,89,106-113]. Usando el método variacional, inicialmente se analizaron los efectos de la forma seccional [66,106] y la posición del ion [107], sobre la energía de enlace de la donadora en un QWW con una barrera de altura infinita. Posteriormente estos cálculos se extendieron a modelos con barrera finita [69,88,89,108-112], para los cuales, además de la posición del ion [108], se analizaron los efectos de la variación de la constante dieléctrica [112,113], y el campo magnético [69,88] sobre la energía de enlace de la donadora. También se ha estudiado la densidad de estado [89,110,111], y la probabilidad de transición en el infrarrojo [89,110-113]. Sin embargo, hasta donde nosotros conocemos hay muy poca información sobre cálculos para el problema de una donadora negativamente cargada (D^-) confinada en un hilo cuántico [32,114], y los efectos del campo magnético en este caso no han sido investigados.

En los cálculos variacionales que se han hecho para estudiar una donadora en un QWW con un potencial de confinamiento de forma rectangular, se han escogido funciones de pruebas tipo Slater [69,89,110,111] con solo un parámetro variacional. Para tomar en cuenta el efecto de un campo magnético, en la referencia [88] se introdujo un factor adicional tipo Gaussiana. Es claro que el tipo de función de prueba que se escoja, depende fuertemente de la forma del potencial de confinamiento, y de la intensidad del campo magnético, de manera que es imposible escoger a priori la mejor función de prueba que describa adecuadamente la simetría del sistema.

En esta sección aplicaremos nuestro método de dimensión fractal, el cual como ya lo hemos dicho se puede aplicar para cualquier forma de potencial de confinamiento sin especificar a priori el tipo de función de prueba, sino que el mismo procedimiento matemático escoge una función de prueba lo suficientemente flexible como para cambiar automáticamente su simetría desde esférica hasta cilíndrica a medida que el radio del QWW disminuye y cambia su comportamiento asintótico de exponencial a Gaussiana, en presencia de campo magnético.

En un hilo cuántico cilíndrico infinito, podemos considerar que el confinamiento es solo en dirección radial, de manera que el potencial de confinamiento $V(\vec{r})$, depende solo de la coordenada ρ , y si el hilo es finito, entonces tomamos en cuenta un potencial de confinamiento en la dirección z , pero asumimos que estos potenciales son independientes uno del otro. Para describir el potencial de confinamiento en la dirección radial, en un QWW de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ seguiremos la idea descrita en la sección 2.3. De manera que considerando una variación suave de la concentración de Al en las interfases, podemos modelar diferentes formas de potencial. Aplicando esta idea consideraremos los modelos de barreras de potencial con uno y dos escalones, para lo cual asumimos que en cada modelo la concentración de aluminio (ver ecuación 2.45) en la dirección radial puede representarse como:

$$c(\rho) = F(\rho, \rho_0, x, \lambda) \quad (3.15)$$

para el potencial escalón, y

$$c(\rho) = F(\rho, R_1, x_1, \lambda) + F(\rho, R, x_2, \lambda) \quad (3.16)$$

para el potencial de doble escalón.

Si adicionalmente asumimos que en el eje del QWW existe una isla cilíndrica de radio R_i , con una aumentada concentración de Al debido a la sustitución de Ga , entonces la concentración de aluminio para tal estructura puede ser descrita por la siguiente relación

$$c(\rho) = F(-\rho, -R_i, x_1, \lambda) + F(\rho, R_e, x_2, \lambda) \quad (3.17)$$

donde R_i y x_1 son el radio y la concentración de aluminio del núcleo repulsivo, y R y x_2 son el radio y la concentración en la barrera exterior del QWW. De esta manera podemos analizar diferentes formas de potencial, variando λ y las concentraciones de Al , en cada caso.

En la figura 15 presentamos las formas de potencial descritas por las ecuaciones (3.15), (3.16) y (3.17). En la figura 15(a) presentamos el potencial doble escalón (ecuación 3.16), en donde asumimos que el radio interno y el radio externo R_1 y el radio externo R están relacionado como $R_1 = 0.5R$ siendo en este caso $R = 1a_0^*$. De acuerdo con las ecuaciones (2.45) y (3.16), la concentración de Al tiene dos saltos casi rectangulares: de 0 a 0.2 en la primera juntura ($\rho = R_1$), y de 0.2 a 0.3 en la segunda juntura ($\rho = R$), de manera que el potencial de confinamiento en estas juntas salta aproximadamente de 0 a $20Ry^*$ y de $20Ry^*$ a $40Ry^*$ respectivamente. En la figura 15(b) presentamos el potencial escalón dado por la ecuación (3.15), para un QWW cilíndrico de radio $R = 1a_0^*$ y con una altura de barrera $V = 40Ry^*$, para tres diferentes valores del parámetro λ correspondientes a un potencial rectangular ($\lambda = 0.01a_0^*$), un potencial suave ($\lambda = 0.3a_0^*$), y a un potencial parabólico ($\lambda = 1a_0^*$). Similares curvas se presentan en la figura 15(c), en donde además se asume un núcleo repulsivo de radio $R_i = 0.2a_0^*$ y altura $V_i = 20Ry^*$

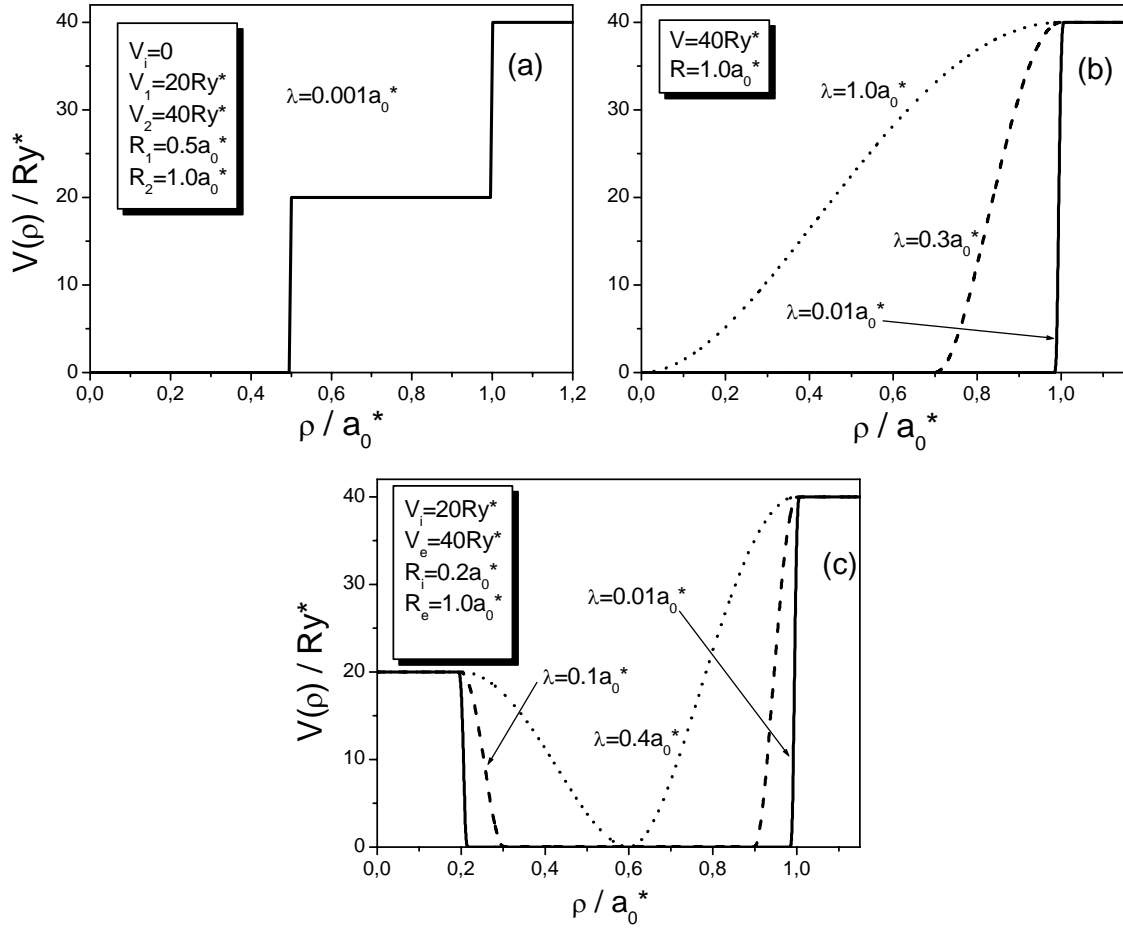


Fig. 15. Diferentes modelos de potenciales de confinamiento en un QW cilíndrico de GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs: (a) Potencial de doble escalón (ecuación (3.16)), (b) Potencial escalón (ecuación (3.15)) con diferentes valores del parámetro λ , y (c) potencial con núcleo repulsivo (ecuación (3.17)), también con tres diferentes valores para el parámetro λ .

Teniendo en cuenta que el potencial de confinamiento depende solo de la coordenada ρ , la ecuación de onda para la energía del estado base del electrón libre, y su solución $f(\rho)$, es separable. De manera que la ecuación (2.21) se puede resolver numéricamente usando el método de barrido trigonométrico (ver sección 2.2). Ahora para resolver la ecuación (2.4), para el estado base de una donadora ubicada en la posición ξ_ρ en un hilo cuántico, asumiremos que en un sistema de coordenadas con el origen en la posición de la donadora, la función de prueba para el estado base de la donadora descentrada, puede ser presentada como:

$$\Psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(\rho + \zeta_\rho) \Phi_{D^0}(r) \quad (3.18)$$

donde la función de correlación $\Phi_{D^0}(r)$, depende solo de la separación electrón ion.

Considerando esta función como variacional, y partiendo del principio variacional, llegamos a la siguiente ecuación de Euler-Lagrange para la función $\Phi_{D^0}(r)$:

$$-\frac{1}{J(r)} \frac{d}{dr} \left[J(r) \frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr} \right] - \frac{2}{r} \Phi_{D^0}(r) = [E - E_0] \Phi_{D^0}(r) \quad (3.19)$$

donde el Jacobiano $J(r)$ esta dado por:

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

$$P(r) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi f_0^2 \left(\sqrt{r^2 \sin^2 \theta + \zeta_\rho^2 + 2r\zeta_\rho \sin \theta \cos \varphi} \right) \sin \theta d\theta \quad (3.20)$$

Esta función $P(r)$ da la densidad de probabilidad de encontrar el electrón en una esfera de radio r centrada en la posición del ion. Una vez que la función $f(\rho)$ es encontrada, el Jacobiano puede ser calculado en una forma sencilla a través de (3.20) y luego se busca la energía para la donadora, resolviendo (3.19) usando el método de barrido trigonométrico.

Para calcular la energía de enlace para el estado base del D^- , seguimos un procedimiento similar al anterior, pero en este caso escogemos la función variacional de la forma:

$$\Psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_0(\rho_1) f_0(\rho_2) \Phi_{D^-} \left(\left| \vec{r}_1 - \vec{\xi}_\rho \right|, \left| \vec{r}_2 - \vec{\xi}_\rho \right|, r_{12} \right) \quad (3.21)$$

donde la función envolvente Φ_{D^-} toma en cuenta el efecto de la correlación entre los electrones dentro del QWW producida por la interacción Coulombiana. Para estimar la energía del estado base del D^- usamos la función triparamétrica (3.2), y seguimos el procedimiento descrito en las ecuaciones (3.2) a (3.5). Primeramente haremos un análisis del problema considerando que la impureza esta ubicada en el eje del QWW, esto es $\xi_\rho = 0$, y mas adelante consideraremos la impureza en cualquier posición.

3.1.2.1 Un D^0 y un D^- centrados en QWWs. Igual que en el caso del pozo, inicialmente analicemos la precisión y efectividad de nuestro método. En la siguiente figura mostramos los resultados de la energía de enlace de una donadora ubicada en el eje de un hilo cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ con potencial rectangular y en presencia de un campo magnético.

En la figura 16 se puede ver que nuestros resultados para un QWW “infinito” ($L = 10a_0^*$), están en buena concordancia con resultados variacionales (puntos solidos) obtenidos previamente [67]. Nótese que en un QWW el potencial de confinamiento [$V(\vec{r}) = V(\rho)$], y el término $\gamma^2 \rho^2 / 4$ que describe el campo magnético en el Hamiltoniano (2.2c), tiene la misma simetría, por consiguiente ellos producen efectos similares. Como se ve en la figura 16, para pequeños valores del radio ($R/a_0^* < 1$), la energía de enlace es relativamente insensible al campo magnético puesto que la energía diamagnética del electrón, fuertemente confinado en dirección radial, tiende a cero. En este rango de radios, el efecto geométrico o de localización espacial sobrepasa el efecto del campo magnético. Cuando el radio del QWW crece y supera el valor del radio ciclotrónico, el efecto del campo magnético llega a ser considerable. Se observa que cuando el campo magnético aumenta, la energía de enlace crece para grandes valores del radio, lo cual puede deberse a la localización del electrón

debido a la reducción del radio ciclotrónico. En la figura 16 se ve que para todo los casos, la energía de enlace aumenta cuando el radio del hilo disminuye hasta un valor crítico $R_c \approx 0.24a_0^*$ donde el nivel del estado base sobrepasa la barrera de potencial, y la función de onda se desborda. Estos resultados indican que el método de dimensión fractal nos proporciona una función de onda lo suficiente flexible para transformar su simetría de esférica a cilíndrica cuando el radio del hilo decrece, y cambia su comportamiento asintótico de exponencial a Gaussiana en presencia de un campo magnético.

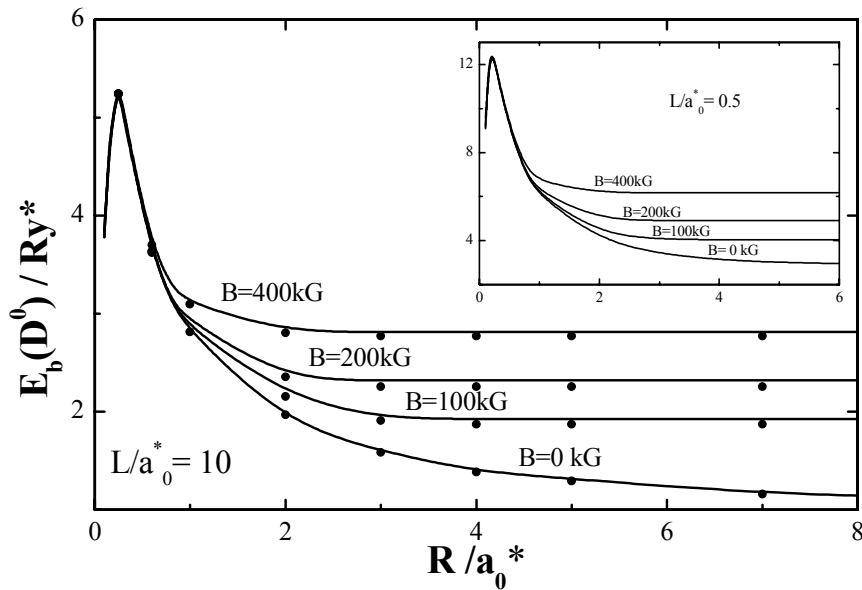


Fig. 16. Energía de enlace de un D^0 como función del radio de un QWW de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ de longitud $L = 10a_0^*$ con potencial rectangular y para diferentes intensidades del campo magnético. La figura insertada corresponde al caso de un hilo de longitud $L = 0.5a_0^*$.

Un resultado similar al anterior se puede analizar en la figura 17, en donde se muestra la energía de enlace de un D^- en función del radio R de un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$, con potencial rectangular y para diferentes intensidades del campo magnético. Se puede ver que el comportamiento de las curvas en este caso es similar al caso del D^0 y la diferencia es que en el caso del D^- el radio crítico es $R_c \approx 0.21a_0^*$, y el máximo valor alcanzado por la energía de enlace es aproximadamente $1.23Ry^*$, el cual corresponde a un valor entre $0.326Ry^*$ y $2.41Ry^*$ obtenidos previamente para QW [30] y QD [32]. La curva de la energía de enlace para campo magnético cero tiende asintóticamente al valor $0.0506Ry^*$, valor que coincide exactamente con el resultado obtenido por Hylleraas para el ion de hidrogeno negativamente cargado [13], usando una función de prueba similar a la utilizada aquí.

Los resultados obtenidos para el modelo de un QWW con un potencial de confinamiento de doble escalón, el cual corresponde a la estructura $GaAs/Ga_{0.8}Al_{0.2}As/Ga_{0.55}Al_{0.45}As$ son presentados en la figura 18, donde mostramos los resultados de la energía de enlace E_b , como función del radio externo y para varios valores de la longitud L del hilo. Como se puede ver en esta figura, cada curva tiene dos picos, el pico principal esta asociado con el

desbordamiento de la función de onda hacia la región de la barrera exterior, mientras que el pico secundario está asociado al desbordamiento de la función de onda electrónica en la región de la barrera interna.

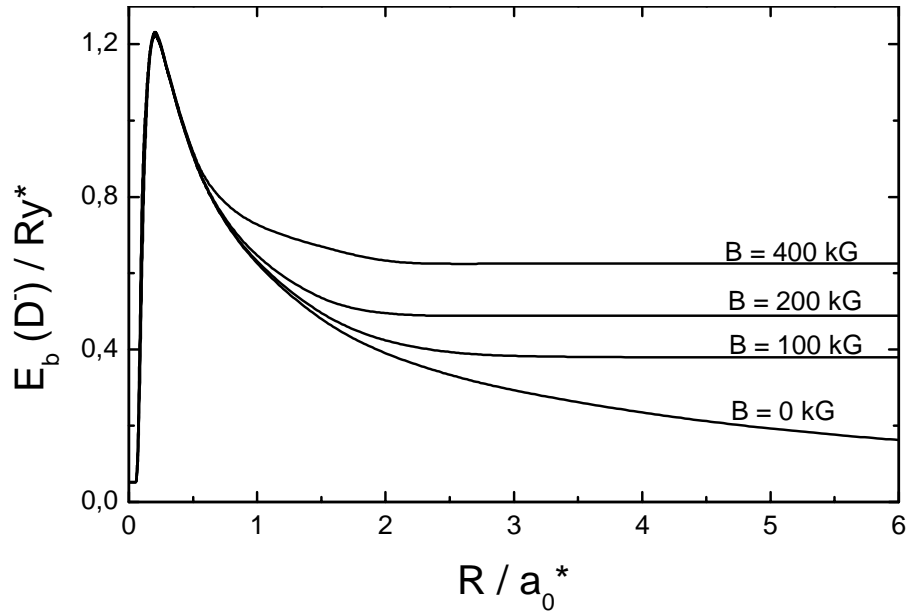


Fig. 17. Energía de enlace para el estado base de un D^- como función del radio de un QWW de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As con potencial rectangular, para diferentes intensidades del campo magnético.

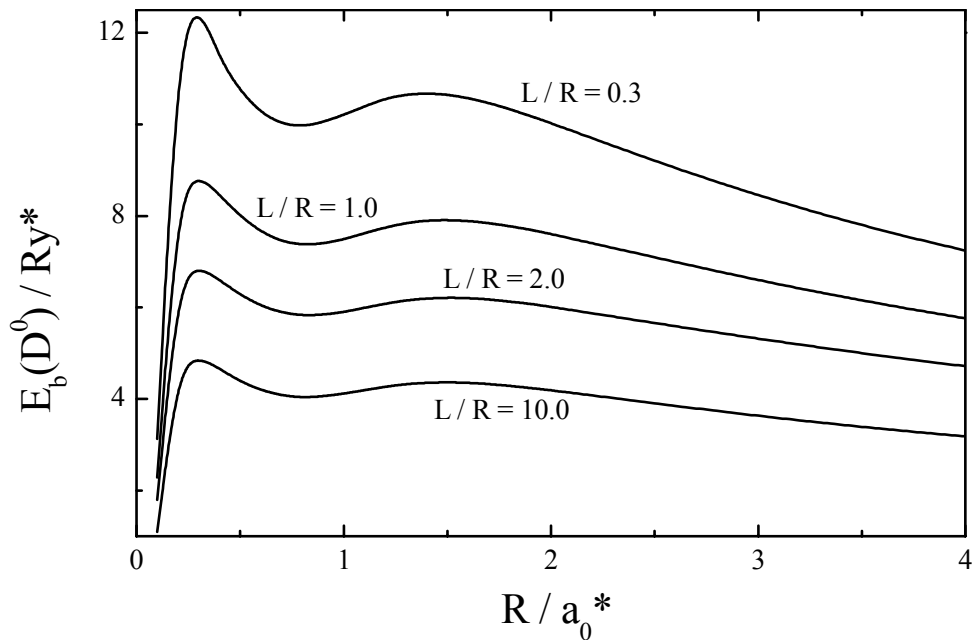


Fig. 18. Energía de enlace de un D^0 como función del radio de un QWW coaxial de GaAs/Ga_{0.8}Al_{0.2}As/Ga_{0.55}Al_{0.45}As (potencial doble escalón) de radio R , y para diferentes longitudes del hilo.

Un aumento considerable de la energía de enlace se observa cuando la longitud del QWW decrece, esto se debe a que cuando la longitud se va disminuyendo, el sistema se transforma de un sistema cuasi-unidimensional (QWW) a un sistema cuasi-cero-dimensional (QD cilíndrico).

En la figura 19, se muestran los resultados de la energía de enlace para el estado base de una donadora neutra en un hilo cuántico de longitud $L/R = 0.5$, calculados para tres diferentes anchos de la región de transición en la junta: $\lambda/R = 0.01$, 0.1 , y 0.2 que corresponden a barreras de potencial casi rectangular, suave y muy suave respectivamente. En esta figura se observa un cruce de las curvas en la región $0.4 < R/a_0^* < 0.6$, este cruce se debe a la diferencia entre los modelos de potencial. Es aparente que para intermedios y grandes valores del radio del QWW ($R/a_0^* > 0.6$), el confinamiento de las orbitas electrónicas es más pequeño y el nivel de energía está situado cerca al piso de la banda de conducción. De manera que el confinamiento de las orbitas electrónicas debido a un potencial muy suave ($\lambda/R = 0.2$) en esta región es más fuerte que el confinamiento producido por el potencial suave ($\lambda/R = 0.1$) y casi rectangular ($\lambda/R = 0.01$), y por lo tanto, el potencial correspondiente a $\lambda/R = 0.2$ da la más alta energía de enlace, seguido por el potencial correspondiente a $\lambda/R = 0.1$, mientras que el potencial casi rectangular presenta menor confinamiento y energía de enlace más pequeña. Cuando el radio del QWW decrece, el nivel de energía sube hasta

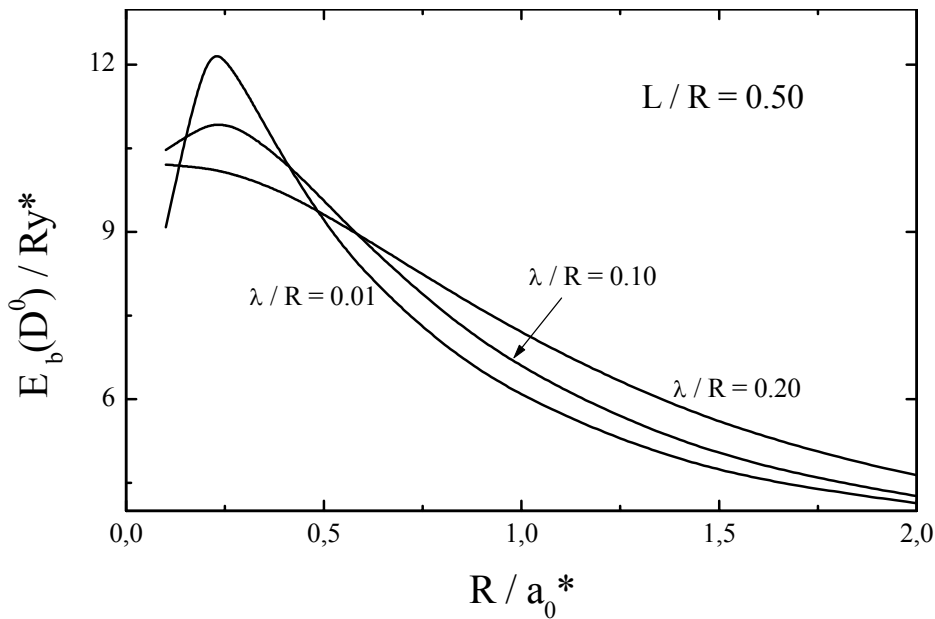


Fig. 19. Energía de enlace de un D^0 como función del radio de un QWW cilíndrico de GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As de radio R , para diferentes perfiles de la barrera de potencial.

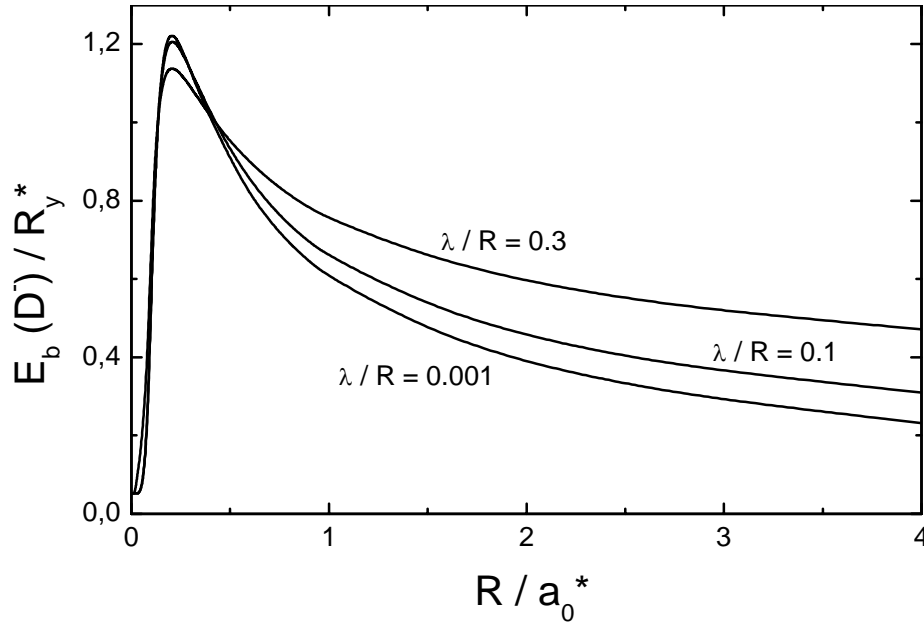


Fig. 20. Energía de enlace de un D^- como función del radio de un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ de radio R , para diferentes perfiles de la barrera de potencial.

la parte superior de la banda de conducción, donde el potencial casi-rectangular produce el mayor confinamiento. Por consiguiente, cuando el radio es pequeño ($R/a_0^* < 0.4$), el potencial correspondiente a $\lambda/R = 0.01$, presenta la mayor energía de enlace para la donadora seguido por el potencial suave ($\lambda/R = 0.1$), mientras que el correspondiente a ($\lambda/R = 0.2$) presenta la energía de enlace más pequeña. Un comportamiento similar se observa en los resultados presentados en la figura 20, en donde mostramos la energía de enlace para el estado base de un D^- como función del radio de un QWW muy largo de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$, con potencial rectangular y calculados para tres diferentes anchos de la región de transición en la junta: $\lambda/R = 0.001$, 0.1 , y 0.3 que corresponden a barreras de potencial casi rectangular, suave y muy suave respectivamente.

3.1.2.2 Un D^0 y un D^- descentrados en un QWW. Para chequear la precisión de nuestro método en el caso de impurezas ubicadas fuera del eje del QWW, primeramente calculamos la energía de enlace del estado base de una donadora neutra como función de la posición del ion ξ_ρ , para el modelo de un QWW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ cilíndrico con un potencial rectangular, y comparamos con resultados obtenidos previamente usando el método variacional [115]. En la figura 21 se puede ver que nuestros resultados para radios $R = 0.25a_0^*$ y $R = 0.5a_0^*$ están en buena concordancia con aquellos presentados en la referencia [115] (puntos sólidos). En todos los casos se ve que la energía de enlace disminuye a medida que el ion se desplaza desde el centro del QWW hacia la barrera. La razón de esto es que debido al fuerte confinamiento lateral, el electrón tiende a estar localizado en el eje del hilo, aun cuando el ion se ubique fuera de este. Esto lleva a que la función de onda para el estado base cambia su simetría, pues cuando el ion esta en el centro

del hilo, esta tiene la simetría típica del estado 1s, pero a medida que el ion se desplaza hacia la barrera, la simetría se va transformando hasta ser similar a la orbita 2p. La variación de la simetría produce un incremento de la distancia media entre el electrón y el ion, por lo tanto la energía de enlace disminuye.

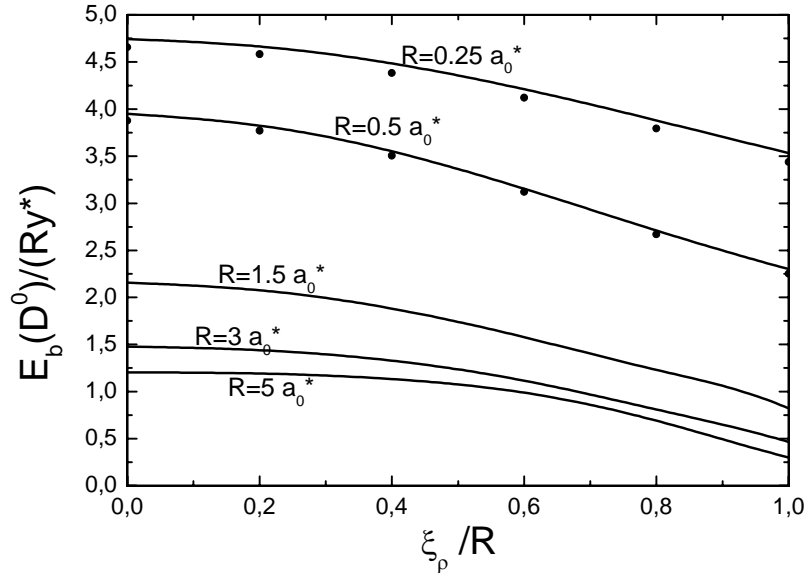


Fig. 21. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función de la posición ξ_p del ion en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con potencial rectangular, para diferentes radios del hilo. Los círculos sólidos representan los resultados del cálculo variacional presentados en la referencia [115].

Cuando el confinamiento es débil (ver curva para $R = 5a_0^*$ en la figura 21), la energía de enlace para la donadora colocada en el eje del QWW, se aproxima a el valor correspondiente al estado base de una donadora en el volumen ($\sim 1 Ry^*$), mientras que en el caso de la donadora ubicada en la barrera, la energía se aproxima al valor correspondiente al estado 2p en el volumen ($\sim 0.25 Ry^*$).

En la figura 22 mostramos la energía de enlace como función del radio del hilo, para el caso de una donadora ubicada en el punto medio entre el eje y la barrera de un QWW de $GaAs/Ga_{0.6}Al_{0.4}As$, para dos modelos de potencial correspondientes a $\lambda/R = 0.001$ (potencial rectangular) y $\lambda/R = 0.3$ (potencial muy suave). Nuestros resultados para el modelo de potencial rectangular (línea sólida) están en buena concordancia con aquellos obtenidos en la referencia [71] (círculos abiertos). Podemos ver que para $R < 0.7a_0^*$, y también para $R > 1.3a_0^*$, el potencial rectangular produce un confinamiento más fuerte que el potencial suave, mientras que para $0.7a_0^* < R < 1.3a_0^*$ ambos potenciales producen el mismo efecto. Nótese que en este caso el comportamiento de las curvas es diferente al caso cuando el ion esta ubicado en el centro (ver figura 19).

La energía de enlace para el estado base de un D^0 y de un D^- en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con los modelos de potencial presentados en la figura 15(b), se presenta en la figura 23, como función de la posición ξ_p .

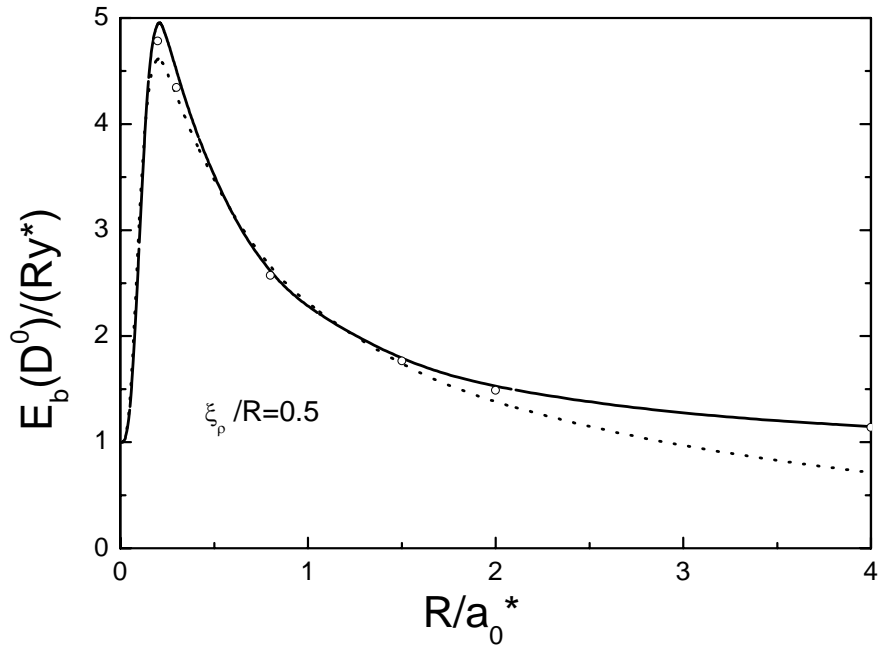


Fig. 22. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función del radio de un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con dos diferentes modelos de potencial, rectangular (línea sólida) y suave (línea punteada). Los círculos abiertos representan los resultados de la referencia [67]

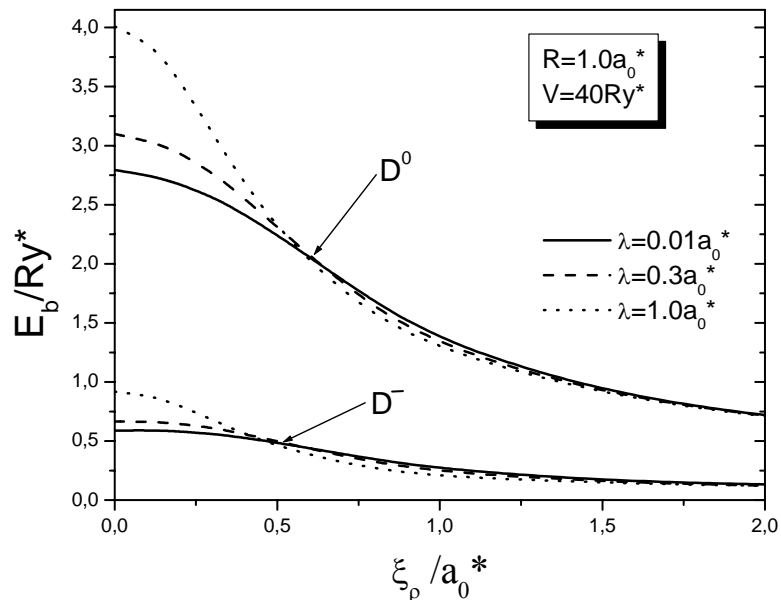


Fig. 23. Energía de enlace para el estado base de un D^0 y un D^- como función de la posición ξ_p del ion en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con los tres modelos de potencial, presentados en la figura 15(b).

En donde se puede ver que la energía para las tres formas de potencial difiere significativamente solo cuando el ion esta ubicado cerca del eje del hilo, y la diferencia entre estas energías disminuye rápidamente cuando el ion se aproxima a la barrera. Aquí al igual que en la figura 21, se ve que todos los casos la energía de enlace disminuye a medida que el ion se desplaza desde el centro hacia la barrera.

Resultados similares son presentados en la figura 24, en donde mostramos la energía de enlace para el estado base de un D^0 y de un D^- en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con un núcleo repulsivo (ver figura 15(c)), de radio $R_i = 0.2a_0^*$ y altura de potencial $V_i = 20Ry^*$, correspondiente a una concentración de aluminio del 15% en el eje del QWW. Se ve que para este modelo, el comportamiento de las curvas cuando el ion esta ubicado cerca del eje, es similar al comportamiento en la figura 22, con la única diferencia de que en la región $\xi_\rho < 0.5a_0^*$, la energía de enlace depende muy débilmente de la posición del ion. Como se puede ver, en esta región la energía de enlace para el D^0 es casi constante, mientras que para D^- , inicialmente se observa un leve incremento y luego disminuye. Además, podemos ver que para grandes distancias ξ_ρ la energía de enlace en un QWW con núcleo repulsivo disminuye menos que en la figura 23. Esto se debe a que el núcleo repulsivo impide que el electrón se localice en el eje de hilo, de manera que la separación electrón-ión aumenta menos en este caso, y por consiguiente la energía de enlace disminuye menos que en la figura 23.

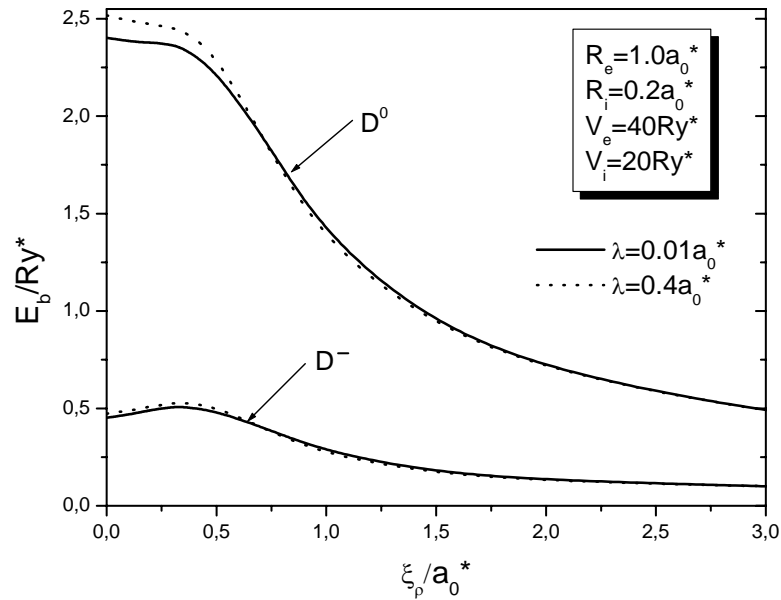


Fig. 24. Energía de enlace para el estado base de un D^0 y un D^- como función de la posición ξ_ρ del ion en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un núcleo repulsivo y para dos de los tres modelos de potencial, presentados en la figura 15(c).

3.1.3 Puntos cuánticos (QDs). En los últimos años muchos autores se han dedicado al estudio de impurezas donadoras neutras (D^0) y negativamente cargada (D^-), confinadas en QDs. Para analizar el estado base de un D^0 centrado en un punto cuántico esférico con diferentes formas de potencial, se ha utilizado el método variacional [72], el método de expansión en serie [73,74] y el método de barrido trigonométrico [82]. Usando el procedimiento variacional, también han sido calculadas las energías de estados excitados de un D^0 descentrado en un punto cuántico [115], y para el cálculo de la energía de enlace de un D^- centrado en un QD se usó una función de prueba tipo Chandrasekhar [75]. Sin embargo, hasta donde nosotros conocemos ningún estado ha sido calculado, para el caso de un D^- descentrado en un QD, por lo tanto sería interesante analizar cómo afecta la posición del ion a la energía de enlace de un D^- descentrado en un QD y también analizar el efecto de la localización en la competencia entre el confinamiento, la repulsión Coulombiana y los electrones en este problema. Aplicaremos nuestro método de dimensión fractal, para calcular la energía de enlace del estado base de un D^0 y un D^- confinados en un punto cuántico esférico con las diferentes formas de potencial presentadas en la figura 15.

Debido a que en este caso la estructura tiene simetría esférica, el potencial de confinamiento depende solo de la distancia hasta el centro del QD $V(\vec{r}) \equiv V(r)$, de manera que el problema de un electrón en el punto se reduce a resolver la ecuación de onda unidimensional (2.19), la cual se puede resolver numéricamente usando el método de barrido trigonométrico (ver sección 2.2). Ahora para resolver el problema para un D^0 confinado en el QD y tomar en cuenta la simetría del sistema, escogimos un sistema de coordenadas con el origen ubicado en la posición $\vec{\xi}$ del ion, y con la dirección z a lo largo de la línea que une el centro del QD con la localización del ion, tal como se muestra en la siguiente figura:

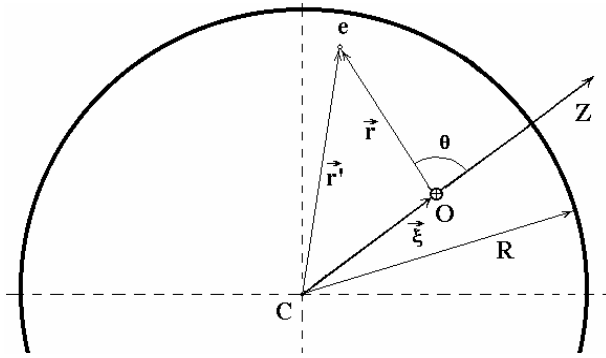


Fig. 25. Sistema de referencia usado para escoger una función de prueba tipo Bastard.

Como en este sistema de referencia $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{\xi}$, el Hamiltoniano del sistema puede escribirse como:

$$\hat{H}_0(\vec{r} + \vec{\xi}) = -\nabla^2 + V(|\vec{r} + \vec{\xi}|) - \frac{2}{r}; \quad (3.22)$$

de manera que como función de prueba podemos tomar:

$$\Psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0(|\vec{r} + \vec{\xi}|) \Phi_{D^0}(r) \quad (3.23)$$

donde f_0 es la solución de la ecuación (2.19) y Φ_{D^0} es una función envolvente que depende solo de la separación electrón-ion.

Siguiendo el procedimiento descrito en la sección 2.1.1.1, deducimos una ecuación similar a la (2.8) para la función Φ_{D^0} , con $J(r)$ dado por

$$J(r) = 4\pi r^2 P(r); \quad P(r) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f_0^2 \left(\sqrt{r^2 + \xi^2 - 2r\xi x} \right) dx \quad (3.24)$$

y para calcular la energía de enlace resolvemos el problema (2.4), usando el método de barrido trigonométrico.

Para calcular la energía de enlace del estado base de un D^- en el QD seguimos el procedimiento descrito en la sección 3.1, y escogemos la siguiente función de prueba:

$$\Psi_{D^-}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_0\left(|\vec{r}_1 + \vec{\xi}|\right) f_0\left(|\vec{r}_2 + \vec{\xi}|\right) \Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12}), \quad (3.25)$$

donde al igual que antes, la función Φ_{D^-} toma en cuenta el efecto de correlación producido por la interacción Coulombiana entre los electrones y de estos con el ion.

Al igual que para pozos y para hilos, inicialmente haremos un análisis de los problemas considerando que las impurezas están ubicadas en el centro del QD, esto es $\xi = 0$, y después consideraremos las impurezas en cualquier posición.

3.1.3.1 Un D^0 y un D^- centrados en QDs. Para analizar la precisión y efectividad de nuestro método, en el caso de un punto cuántico. En la siguiente figura mostramos los resultados de la energía de enlace de una impureza D^0 centrada en un punto cuántico esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con potencial rectangular y comparamos con resultados presentados en la referencia [73].

En la figura 26 se puede observar una total coincidencia entre nuestros resultados (línea sólida) y los resultados obtenidos por Zhu (diamantes sólidos) [73], quien encontró la solución exacta de este problema, usando el método de expansión en series. Obsérvese que a medida que el radio del punto disminuye, la energía de enlace aumenta hasta que alcanza un máximo de $8.13Ry^*$ cuando el radio llega al valor crítico $R_c \approx 0.33a_0^*$. Para valores menores que este radio crítico, la energía de enlace disminuye hasta $1Ry^*$, esto se debe a que la función de onda se desborda hacia fuera del punto, restaurando su carácter tridimensional.

Para el caso de un D^- centrado en un punto cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con un potencial de confinamiento rectangular, calculamos la energía de enlace como función del radio del QD. En la referencia [32] Zhu y colaboradores, presentaron resultados de cálculos variacionales para este problema, para los cuales se usó una función de prueba tipo Chandrasekhar con tres parámetros variacionales. En la tabla 3, presentamos nuestros resultados para la energía de enlace $E_b(D^-)$ y son comparados con los resultados de la referencia [32].

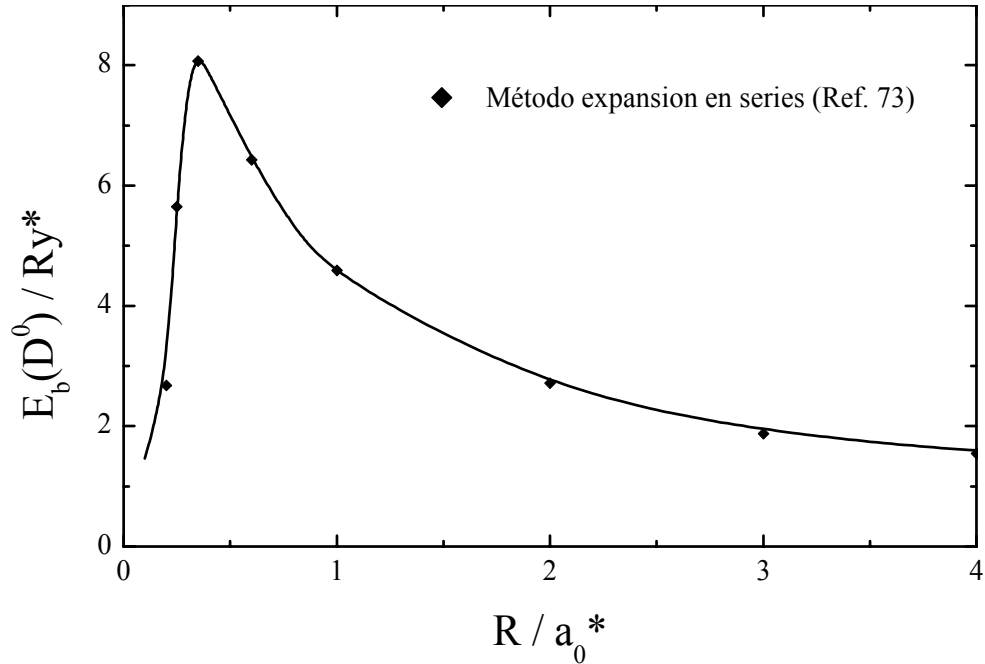


Fig. 26. Energía de enlace de un D^0 centrado en un punto cuántico esférico de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As con potencial rectangular ($\lambda / R = 0.001$). Los diamantes sólidos representan los resultados obtenidos en la referencia [73]

Tabla 3. Comparación entre nuestros resultados para la energía de enlace de un D^- en un QD esférico con potencial rectangular y los resultados del calculo variacional [32]. Todas las energías están expresada en Ry*.

R (Å)	0.10	0.20	0.24	0.25	0.28	0.30	0.34	0.60	1.00	10.0
Nuestros resultados	0.0520	0.123	0.73	1.23	2.20	2.41	2.50	1.81	1.31	0.137
Resultados de ref. [32]	0.0526	0.128	0.70	1.17	2.15	2.36	2.41	1.75	1.25	0.143

En esta tabla se puede ver que nuestros resultados están en muy buena concordancia con los correspondientes resultados presentados en la referencia [32]. También se ve que cuando el radio del punto es pequeño ($R \rightarrow 0$) o grande ($R \rightarrow \infty$), la energía de enlace tiende a los valores límite en el volumen, el cual corresponde a $0.0518 Ry^*$ para una función de prueba tipo Chandrasekhar y a $0.0506 Ry^*$ para la aproximación de Hylleraas. En el límite de débil confinamiento (impureza en el volumen), nuestros resultados son más bajos que aquellos de la referencia [32], esto se debe a que en este límite, la función de prueba tipo Hylleraas, con tres parámetros da una peor aproximación con el mejor resultado conocido ($0.0555 Ry^*$) [13] que la función de prueba tipo Chandrasekhar con tres parámetros. Por el contrario, para valores intermedios del radio, cuando el confinamiento es significativo, nuestros resultados son 2-3% más altos, por lo tanto en este caso la función triparamétrica tipo Hylleraas da mejores resultados que la función de prueba tipo Chandrasekhar.

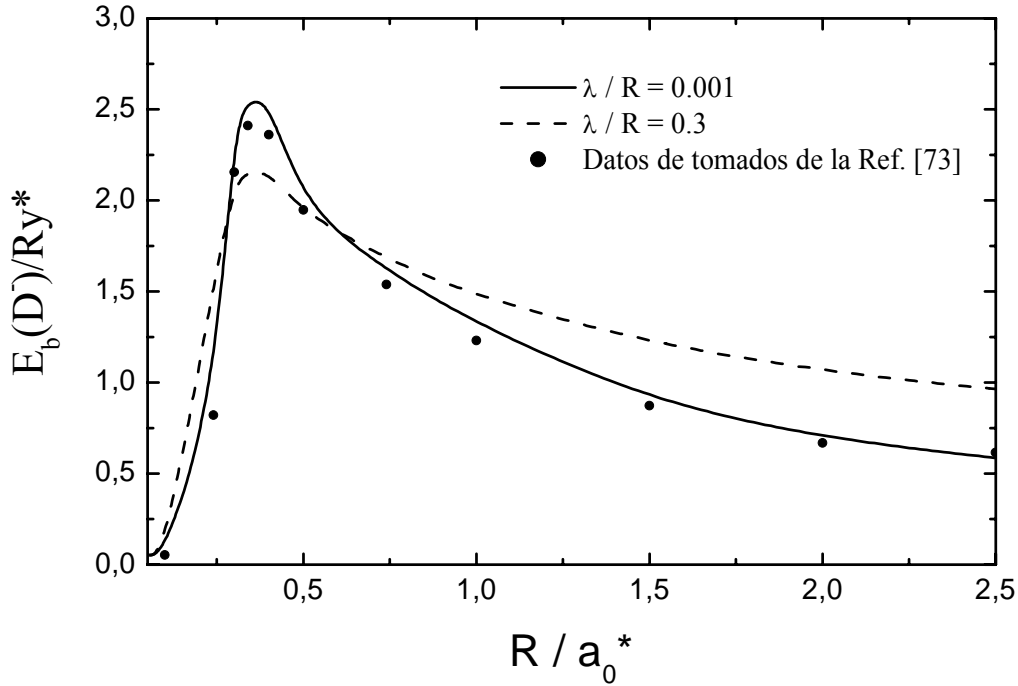


Fig. 27. Energía de enlace para el estado base de un D^- centrado en un punto cuántico esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con dos diferentes formas de potencial: rectangular ($\lambda/R = 0.001$) y suave ($\lambda/R = 0.3$). Los círculos sólidos representan los resultados obtenidos en la referencia [73]

En la figura 27 también presentamos nuestros resultados para la energía de enlace $E_b(D^-)$, como función del radio de un QD de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un potencial rectangular ($\lambda/R = 0.001$) (línea sólida) y un potencial suave ($\lambda/R = 0.3$). Los círculos sólidos representan los resultados de la referencia [73]. Se ve una buena concordancia entre los dos métodos.

3.1.3.2 Un D^0 y un D^- descentrados en QDs. En esta sección presentaremos algunos resultados de aplicación de nuestro método de dimensión fractal para analizar los efectos de la forma del potencial sobre la energía de enlace para el estado base de impurezas D^0 y D^- en puntos cuánticos esféricos con los modelos de potencial presentados en la figura 15(b) y 15(c).

En la siguiente figura presentamos la energía de enlace como función de la posición ξ , de un D^0 confinado en un QD de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de radio $R = 3.0a_0^*$, y con tres diferentes modelos de potencial, correspondientes a $\lambda = 0.01, 1.0$ y $3.0 a_0^*$, todos estos potenciales con una altura $V = 40 Ry^*$.

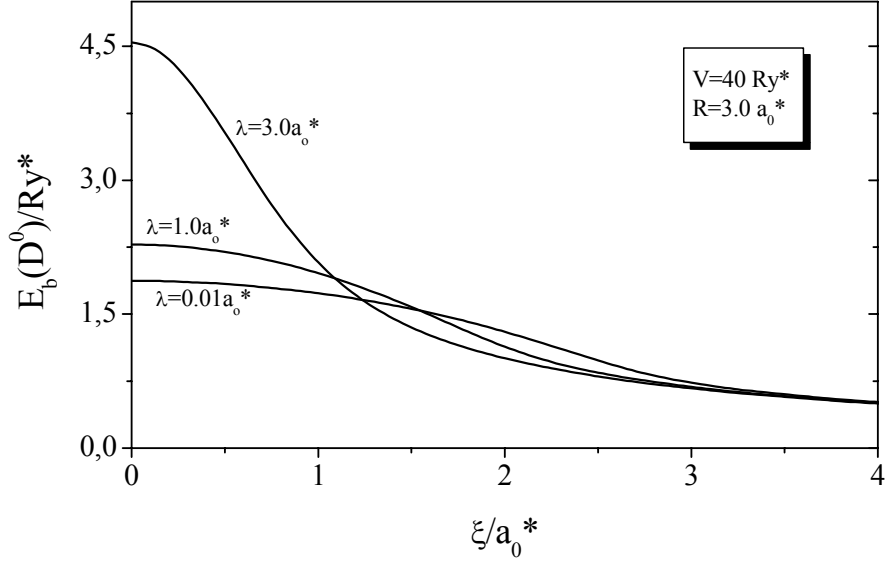


Fig. 28. Energía de enlace como función de la posición ξ , de un D^0 confinado en un QD de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As de radio $R = 3.0a_0^*$, y con tres diferentes modelos de potencial, correspondientes a $\lambda = 0.01, 1.0$ y $3.0 a_0^*$ (ver figura 15(b)).

En esta figura, se ve que el aumento del ancho de la región de transición (aumento de λ), produce un incremento de las energías de enlace del D^0 . Esto se debe al hecho de que entre mayor sea el espesor de la región de transición, más fuerte será el confinamiento dentro del punto. Por consiguiente, cuando el ion está en el centro del punto, el potencial parabólico ($\lambda = 3.0 a_0^*$) produce el mayor confinamiento y por tanto mayor energía de enlace, seguido por el potencial suave ($\lambda = 1.0 a_0^*$), mientras que el potencial rectangular ($\lambda = 0.01 a_0^*$) corresponde al confinamiento más bajo. Por el contrario, cuando el ion se desplaza hacia la barrera, el orden de estas curvas se invierte y se observa un cruce de las curvas en ($\xi \approx 1.0 a_0^*$). Finalmente, cuando el ion está localizado en la barrera $\xi \geq 3.0a_0^*$, todas las curvas dan prácticamente la misma energía de enlace, y los efectos de la forma de potencial sobre estas energías, llega a ser insignificante.

En la figura 29 presentamos la energía de enlace de un D^0 como función del desplazamiento ξ , medido desde el centro de un QD esférico y con el modelo de potencial definido en la ecuación (3.17) (ver figura 15(c)). Observamos que a medida que el ion impureza se desplaza hacia la barrera, la energía de enlace inicialmente crece y luego disminuye. También se puede ver que la posición de máximo de las curvas, se desplaza a medida que aumenta el valor del radio del núcleo repulsivo, y además se puede ver que la posición de cada máximo coincide aproximadamente con el punto medio entre el radio interno y el radio externo $(R_e + R_i)/2$, donde el confinamiento es mayor. Se ve que cuando el radio del núcleo repulsivo crece de 0 a $1.0a_0^*$ la altitud de este máximo inicialmente

cae, y luego cuando el radio aumenta de $1.0a_0^*$ a $3.0a_0^*$ el máximo de cada curva crece rápidamente. Esto se debe al hecho de que para pequeños valores del radio del núcleo, el electrón está localizado más probablemente en la región central del punto, y por consiguiente la separación electrón-ion crece cuando el ion se desplaza hacia la barrera y esto hace que la energía de enlace disminuya. Por el contrario, para grandes valores del radio del núcleo, el electrón no puede penetrar en la región central y se localiza más probablemente en el punto medio entre las dos barreras, de manera que cuando el ion está localizado en la misma posición, la separación electrón-ion llega a ser muy pequeña lo cual aumenta la energía de enlace.

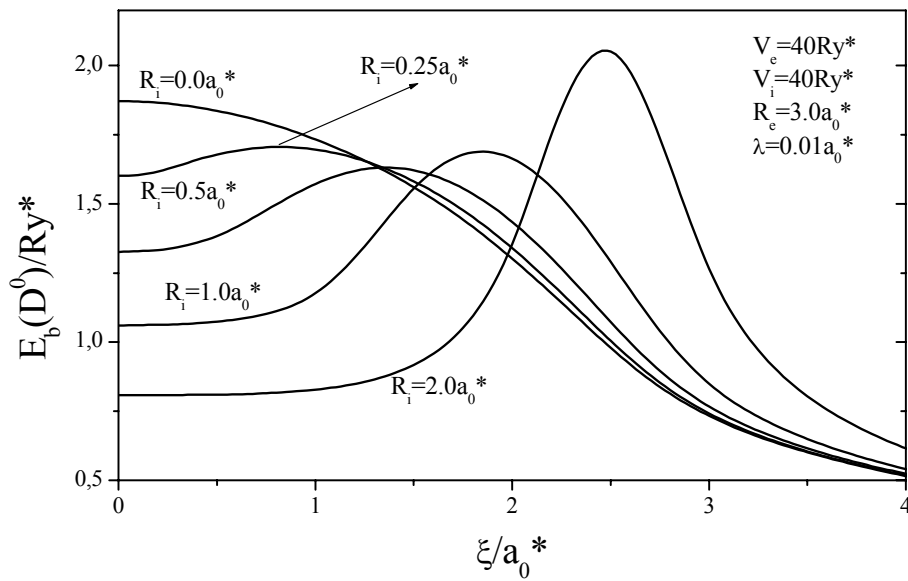


Fig. 29. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función de la posición del ion en QD esférico *strain-induced self-assembled*. Con potencial rectangular y para diferentes radios del núcleo repulsivo.

En la figura 30 mostramos los resultados para la energía de enlace como función de la posición ξ , de un D^- en un QD esférico sin núcleo repulsivo, con un potencial rectangular y para dos diferentes valores del radio del punto. Se ve que la energía de enlace decrece suavemente cuando el ion se desplaza del centro hacia la barrera. Como ya lo hemos dicho, este comportamiento se debe a que los electrones tienden a estar localizados en el centro del punto debido al fuerte confinamiento sin importar que el ión se desplace hacia las barreras. Por consiguiente, un incremento de ξ produce un aumento de la separación electrón-ion y la energía de enlace disminuye.

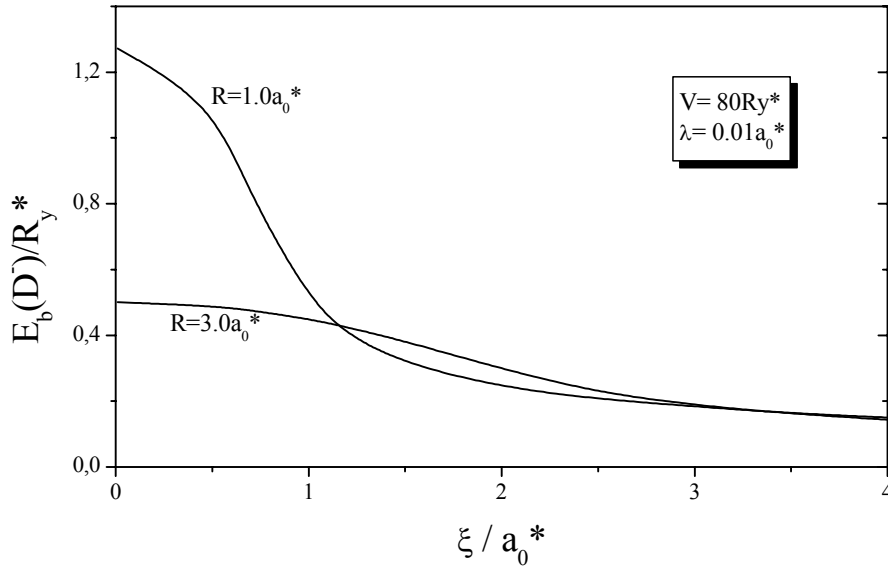


Fig. 30. Energía de enlace para el estado base de un D^0 como función de la posición ξ , del ion en QD esférico con potencial rectangular y para diferentes radios del punto

3.2 DENSIDAD DE ESTADO DE IMPUREZAS D^0 Y D^- EN DIFERENTES HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

Como se demostró anteriormente la energía de impurezas poco profundas en heterojunturas semiconductoras depende fuertemente de la posición de la impureza, las centradas tienen niveles más profundos que las que están situadas cerca de la juntura o en la barrera. Por eso un conjunto de impurezas distribuidas aleatoriamente dentro de una heterojuntura produce un conjunto de niveles energéticos cada uno de los cuales corresponde a la energía de una impureza individual determinada por su posición en la heterojuntura. Es imposible analizar cada uno de estos niveles independientemente y por eso en la teoría de espectros, para describir espectro energético de un conjunto de impurezas se utiliza la función de distribución de estos niveles llamada la densidad de estados (DOS). La función de DOS es una representación del espectro en forma de histograma. Además la densidad de estados es una característica necesaria para analizar los espectros de absorción y de fotoluminiscencia relacionados con las impurezas en heterojunturas semiconductoras y entra directamente en la regla oro de Fermi.

En una serie de publicaciones se analizó el espectro de donadoras neutras en pozos, hilos y puntos cuánticos. Oliveira y Falicov [116] calcularon la energía de enlace de un D^0 en función de posición de impureza en un pozo cuántico de barrera infinita en el marco del modelo de Bastard y utilizando estos resultados encontraron la densidad de los estados para

un conjunto de impurezas distribuidas en forma aleatoria. Los resultados de los cálculos les permitieron dar una correcta descripción de los datos experimentales. López-Gondar y co-investigadores [117], y Weber [118], calcularon la densidad de estados de impurezas poco profundas en pozos cuánticos bajo la influencia de un campo eléctrico longitudinal. Ellos encontraron que la densidad de estados en este caso exhibe tres picos de singularidades, similares a las singularidades de Van Hove, correspondientes a las energías de enlaces asociadas con impurezas situadas en los dos extremos del pozo y en la posición en la cual la energía tiene un máximo. Porras-Montenegro y co-investigadores, calcularon la densidad de estados de un D^0 en puntos cuánticos esféricos [119] y en hilos cuánticos con sección transversal rectangular [90].

En todos los cálculos anteriores se consideró el modelo de confinamiento con las barreras en forma rectangular. Sería interesante analizar como influye la forma de potencial en la densidad de estados de impurezas. Además en el caso de puntos y hilos no se analizó el efecto de un núcleo repulsivo que como será demostrado posteriormente puede conducir a la aparición de unas singularidades adicionales de tipo Van-Hove. Los resultados de nuestros cálculos (ver secciones 3.1.2.2 y 3.1.3.2) nos permiten analizar estos efectos y adicionalmente extender el análisis de la densidad de estados para las impurezas D^- , lo cual es novedoso, ya que hasta donde conocemos estos problemas todavía no se han resuelto.

3.2.1 Densidad de estados de impurezas D^0 y D^- en un hilo cuántico cilíndrico. Asumiendo que la sección transversal circular del QWW no es muy pequeña, podemos considerar que la distribución de las impurezas es homogénea, de manera que podemos encontrar el número de donadoras dN localizadas dentro de un anillo de radios ζ_ρ y $\zeta_\rho + d\zeta_\rho$ como:

$$dN = 2n\pi\zeta_\rho d\zeta_\rho = \frac{2n\pi\zeta_\rho}{\left|dE(\zeta_\rho)/d\zeta_\rho\right|} dE \quad (3.26)$$

donde n es la densidad de impurezas por unidad de área de la sección transversal y $E = E_b(\zeta_\rho)$ es la energía de enlace de la donadora, la cual depende de la posición. La

densidad de estados por unidad de energía definida como $g(E) = \frac{1}{n} \frac{dN}{dE}$ esta dada por

$$g(E_b) = 2\pi\zeta_\rho(E_b) \left| \frac{d\zeta_\rho(E_b)}{dE_b} \right| = 2\pi\zeta_\rho(E_b) \left| \frac{dE_b(\zeta_\rho)}{d\zeta_\rho} \right|^{-1} \quad (3.27)$$

Para calcular la función (3.27) usamos la interpolación cúbica inversa para las curvas $E = E_b(\zeta_\rho)$ presentadas en la figuras 23 y 24, y los resultados del cálculo para la densidad de estados son mostrados en las siguientes figuras.

En la Fig. 31 presentamos la densidad de estados de impurezas donadoras neutras en un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes formas de potencial. El lado derecho de nuestra curva para un modelo de potencial rectangular ($\lambda = 0.01a_0^*$) está en buena concordancia con los resultados obtenidos previamente por Porras-Montenegro y co-investigadores [110]. Para un modelo con potencial rectangular, nuestros resultados en el

lado izquierdo de las curvas son un poco diferentes de aquellos obtenidos previamente por otros autores, debido a que en nuestros cálculos incluimos todas las posiciones de la impureza en la barrera, lo cual proporciona la cola que tiende a infinito cuando $E_b \rightarrow 0$.

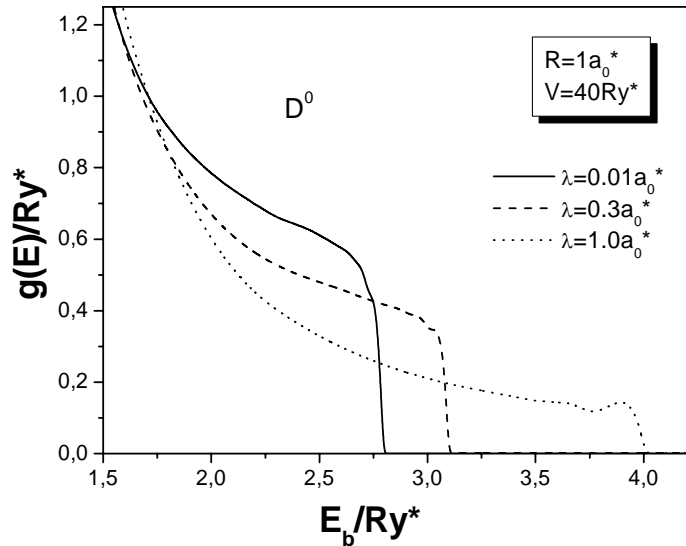


Fig. 31. Densidad de estados de impurezas D^0 en un QWW cilíndrico de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As, con los tres modelos de potencial presentados en la figura 15(b)

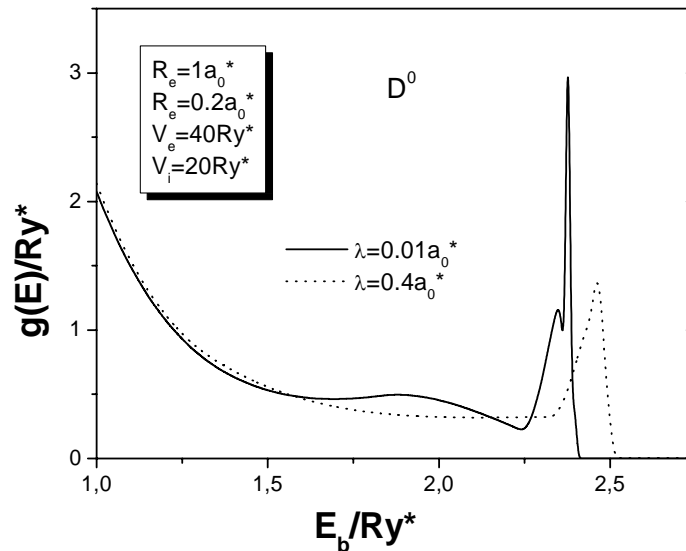


Fig. 32. Densidad de estados de impurezas D^0 en un QWW cilíndrico de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As, con un núcleo repulsivo y para dos de los tres modelos de potencial presentados en la figura 15(c)

Adicionalmente en esta figura se puede observar un sucesivo desplazamiento del umbral al lado derecho de la densidad de estados hacia mayores valores de la energía cuando se incrementa el ancho de la región de transición λ . De esta manera el menor umbral de las energías lo tiene el potencial rectangular, seguido por el potencial suave mientras que el mayor umbral corresponde al potencial parabólico. Las curvas de las densidades de estados de impurezas para un modelo con núcleo repulsivo, se presentan en la figura 32, en donde

se ve que el núcleo repulsivo produce una esencial modificación de las curvas, lo cual se relaciona con la aparición de singularidades y estructura fina cerca del umbral en el lado derecho. Estas singularidades se deben al inusual comportamiento de la curva de la energía de enlace en función de la posición de la impureza (Fig. 24), donde la parte esencial de la curva correspondiente es casi horizontal y el valor de su derivada $dE(\xi_\rho)/d\xi_\rho$ es muy pequeño.

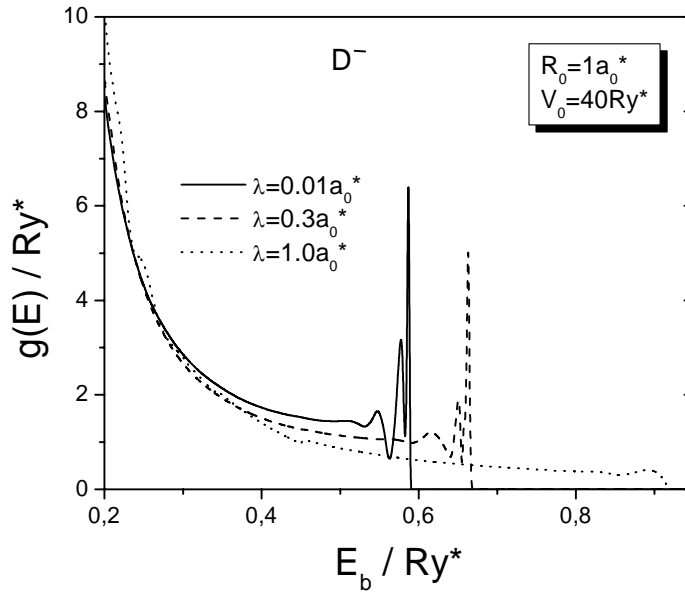


Fig. 33. Densidad de estados de impurezas D^- en un QWW cilindrico de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As, con los tres modelos de potencial presentados en la figura 15(b)

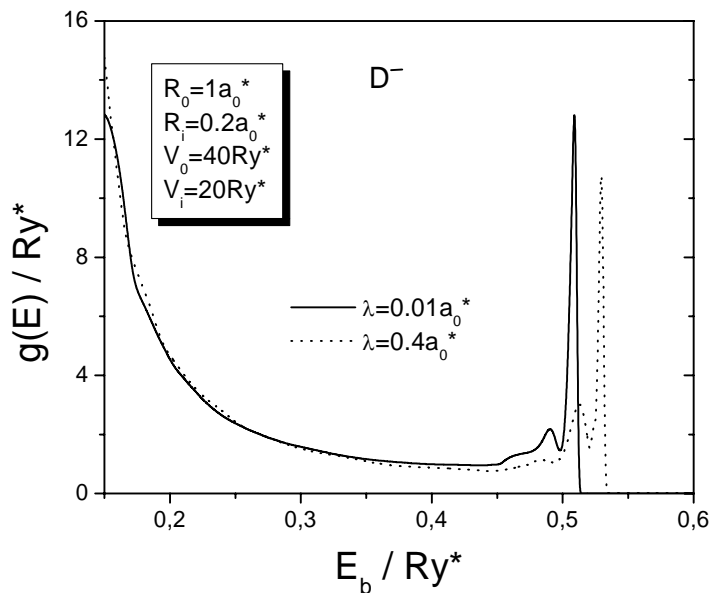


Fig. 34. Densidad de estados de impurezas D^- en un QWW cilindrico de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As, con un núcleo repulsivo y para dos de los tres modelos de potencial presentados en la figura 15(c)

En las figuras 33 y 34, presentamos curvas similares para las densidades de estados de impurezas D^- . Podemos ver picos mas pronunciados en las curvas de densidades de estados para D^- , en comparación con las curvas similares para D^0 . Todas las curvas tienen una singularidad en la región cerca del umbral, debido a la existencia de un máximo en la curva de la energía de enlace del D^- en función de la posición del ión (ver curvas en las figuras 23 y 24). En las curvas para hilo con núcleo repulsivo aparece un pico adicional muy pronunciado, debido a la existencia de un máximo adicional en la dependencia de la energía de enlace con la posición del ion cuando este se localiza entre el núcleo repulsivo y la barrera (ver figura 24).

3.2.2 Densidad de estados de impurezas D^0 y D^- en un punto cuántico esférico. Asumiendo las denotaciones del párrafo anterior el número de las impurezas dentro de un cascaron esférico del radio ξ es igual:

$$dN = n4\pi\xi^2 d\xi = \frac{4n\pi\xi^2}{|dE(\xi)/d\xi|} dE \quad (3.28)$$

Por eso la densidad de estados $g(E_b)$ esta relacionada con la energía de enlace en función de la posición $E_b(\xi)$ de la impureza a través de la fórmula:

$$g(E_b) = 4\pi\xi^2(E_b) \left| \frac{d\xi(E_b)}{dE_b} \right| = 4\pi\xi^2 \left| \frac{dE_b(\xi)}{d\xi} \right|^{-1} \quad (3.29)$$

Siguiendo un procedimiento similar al utilizado para el caso del hilo, obtenemos los resultados que se muestran en la siguiente figura

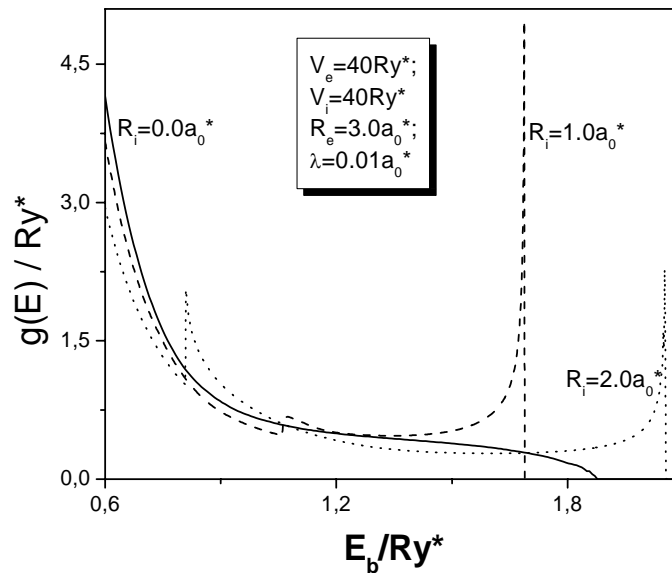


Fig. 35. Densidad de estados de impurezas D^0 en un QD esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un núcleo repulsivo y con potencial rectangular.

En la figura 35 mostramos los resultados de la densidad de estados de impurezas D^0 en un punto cuántico esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ sin (curva sólida) y con un núcleo repulsivo (curvas truncada y punteada) considerando potencial rectangular. En esta figura se puede ver que cuando el radio del núcleo repulsivo aumenta de 0 a $1.0a_0^*$, el umbral en el lado derecho de las curvas de densidades de estados, inicialmente se desplaza hacia las energías más pequeñas, pero cuando el radio del núcleo sigue aumentando de $1.0a_0^*$ a $3.0a_0^*$, este umbral salta hacia energías más grandes. Se puede ver además que el núcleo repulsivo proporciona una esencial modificación de las curvas de la densidad de estado de impurezas, lo cual esta relacionado con la aparición de singularidades cerca del umbral y en la parte media de las curvas. Estas singularidades se deben a la existencia de un mínimo y de un máximo en la curva de la energía de enlace como función de la posición del ión donde la derivada $dE(\zeta)/d\zeta$ es cero (ver figura 29).

En la Fig. 36 se presentan las curvas de las densidades de estados de impurezas D^- en puntos cuánticos esféricos con dos diferentes radios considerando un modelo de potencial rectangular. En esta figura se puede ver que cuanto mas pequeño es el radio del punto, mayor es el umbral de las densidades y menor es altura de la singularidad correspondiente a este umbral. Esto esta de acuerdo a lo que se espera, ya que este umbral corresponde a las impurezas ubicadas cerca del centro del punto, y para pequeños radios hay pocas impurezas que tienen energías de este orden. Mientras que cuando el radio aumenta, el número de impurezas que tienen energías cercanas a la de la impureza centrada crece significativamente y en la curva de la densidad de los estados aparece una singularidad pronunciada cerca del umbral. Por otro lado la densidad de los estados correspondiente a pequeñas energías describe las impurezas que están ubicadas en la región de la barrera o cerca de ella. El número de estas impurezas es mucho mayor que el de las correspondientes dentro del punto. Esto explica la existencia del pico de densidades para bajas energías.

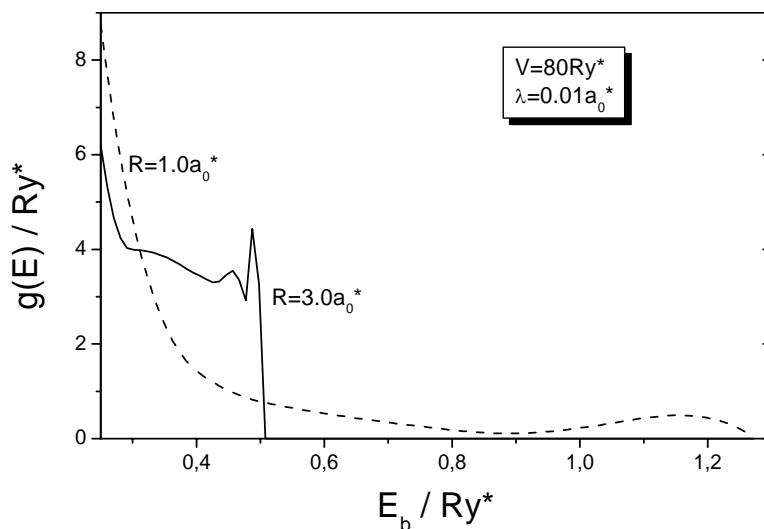


Fig. 36. Densidad de estados de impurezas D^- en un QD esférico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con potencial rectangular.

3.3 VARIACIÓN DE PARÁMETROS ESTRUCTURALES

En esta parte de la tesis extenderemos nuestro método de Dimensión Fractal para analizar los efectos relacionados con la variación de los parámetros del material (masa efectiva y constante dieléctrica) y no-parabolicidad de la banda de conducción. Como ya fue demostrado anteriormente estos factores conducen a un incremento en las energías de enlace de impurezas D^0 en hasta un 20% en QWs [23,83,120,121], hasta un 30% en QDs [5], y para impurezas D^- [23] en hasta un 10% en QWs cuando la longitud de onda de Broglie se hace comparable con el tamaño de la heteroestructura.

Para explicar este efecto hay que tener en cuenta que por ejemplo en heterojunturas de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ la masa efectiva en la barrera es mayor que en el pozo en aproximadamente un 30% y la constante dieléctrica es menor en un 5%. Cuando el tamaño de la heterojuntura se hace suficientemente pequeño, se aumenta la probabilidad de penetración del electrón en la barrera y crece el valor promedio de la masa efectiva del electrón, lo cual lleva a un incremento en la energía de enlace debido a que el Rydberg efectivo el cual es la medida de la energía de enlace, es proporcional a la masa efectiva. Cuando el tamaño de la heterojuntura es grande, la probabilidad de penetración en la barrera es despreciable y por eso el efecto de variación de la masa se hace insignificante.

De manera similar se puede interpretar el efecto de no-parabolicidad de la banda de conducción. En la aproximación de banda parabólica la masa efectiva es una constante, mientras que realmente la curva de dispersión para energías suficientemente grandes (cuando el electrón está ubicado lejos del piso de la banda de conducción) se desvía hacia abajo de la curva parabólica y por eso la masa efectiva real (el valor inverso a la segunda derivada para la curva de dispersión) aumenta con el crecimiento de la energía. Por otro lado, cuando el tamaño de la heterojuntura se disminuye la energía mínima del electrón en el pozo crece debido a la cuantización de los niveles, lo cual produce el aumento de la masa efectiva. Este incremento de la masa efectiva (significativo sólo cuando el tamaño de la heterojuntura es pequeño) conduce al aumento del Rydberg efectivo y de la energía de enlace de las donadoras.

La variación de la constante dieléctrica conduce al efecto de las imágenes. En el caso cuando la constante dieléctrica en la barrera es menor que el valor correspondiente en el pozo, se tiene que para el campo eléctrico cuya fuente es el ión, el signo de las imágenes es negativo y por tanto estas imágenes producen un confinamiento adicional aumentando la energía de enlace. Es evidente que el efecto de las imágenes (las cuales están ubicadas en la barrera) disminuye fuertemente cuando el tamaño de la heterojuntura se hace más grande que el radio de Bohr efectivo.

Todos estos efectos han sido analizados con detalles para donadora neutra confinada en QW [23,83,120,121] y QD esférico [122], pero hasta donde nosotros conocemos hay pocas publicaciones [123,124], las cuales presentan algunos resultados para el caso de donadoras neutras en QWs con sección transversal rectangular, y solo hay cálculos particulares

sobre impureza D^- en un QW usando el método Monte Carlo [124]. Más adelante nosotros demostraremos que estos efectos pueden ser analizados en una forma unificada para todas las heterojunturas dentro del marco del Método de Dimensión Fractal utilizando diferentes técnicas de cálculo. Para analizar los efectos de variación de los parámetros de material, en la primera parte aplicaremos las técnicas perturbativas considerando la variación relativa de los parámetros como un parámetro pequeño y en la segunda parte presentamos una técnica de cálculo directo.

3.3.1 Modelo de confinamiento con parámetros variables y banda de conducción no-parabólica. Dada la dispersión de la banda de conducción $E_c(\vec{k})$, la ecuación diferencial para la función envolvente para un electrón dentro de una heterojuntura de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ con un potencial de confinamiento $V(\vec{r})$ en la aproximación de masa efectiva puede escribirse como:

$$E_c(-i\hbar\nabla)f_0(\vec{r}) + V(\vec{r})f_0(\vec{r}) = E_0f_0(\vec{r}) \quad (3.30)$$

Como fue demostrado en la referencia [125], al despreciar un pequeño desacoplamiento relacionado con la interacción espín-orbita y una débil anisotropía en el plano $k_x - k_y$, la dispersión de la banda de conducción con simetría axial en los materiales compuestos del tipo III-V con brecha directa puede ser representada en la forma:

$$E_c(\vec{k}_{\parallel}, k_z) = \frac{\hbar^2}{2m^*}k^2 + \alpha k^2 + \beta\left(k_{\parallel}^2 k_z^2 + \frac{1}{8}k_{\parallel}^4\right); \quad k^2 = k_{\parallel}^2 + k_z^2, \quad (3.31)$$

donde los parámetros α y β fueron encontrados en las referencias [126,127] a través de un ajuste de la curva de dispersión con los cálculos en el marco del modelo $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. Como estos parámetros son diferentes en el pozo y en la barrera (igual como la masa efectiva del electrón m^*) en adelante vamos a considerarlos como unos parámetros que varían en función de la posición del electrón, $m^* = m^*(\vec{r})$; $\alpha = \alpha(\vec{r})$; $\beta = \beta(\vec{r})$.

Utilizando el radio de Bohr efectivo en el $GaAs$ $a_0^* = \hbar^2 \epsilon / m_{GaAs}^* e^2$, como unidad adimensional de longitud, y el Rydberg efectivo en el $GaAs$ $Ry^* = e^2 / 2\epsilon a_0^*$, como unidad de energía, la curva de dispersión (3.31) se puede representar en la forma:

$$E(\vec{k}_{\parallel}, k_z) = k^2 + E_{var}(\vec{k}_{\parallel}, k_z); \quad E_{var}(\vec{k}_{\parallel}, k_z) = \eta(\vec{r})k^2 + \sigma\tilde{\alpha}(\vec{r})k^4 + \sigma\tilde{\beta}(\vec{r})\left(k_{\parallel}^2 k_z^2 + \frac{1}{8}k_{\parallel}^4\right) \quad (3.32)$$

donde

$$\begin{aligned} \eta(\vec{r}) &= (m^*(\vec{r}) - m_{GaAs}^*) / m^*(\vec{r}); \\ \tilde{\alpha}(\vec{r}) &= \alpha(\vec{r}) / Ry^* (a_0^*)^4; \\ \tilde{\beta}(\vec{r}) &= \beta(\vec{r}) / Ry^* (a_0^*)^4 \end{aligned} \quad (3.32a)$$

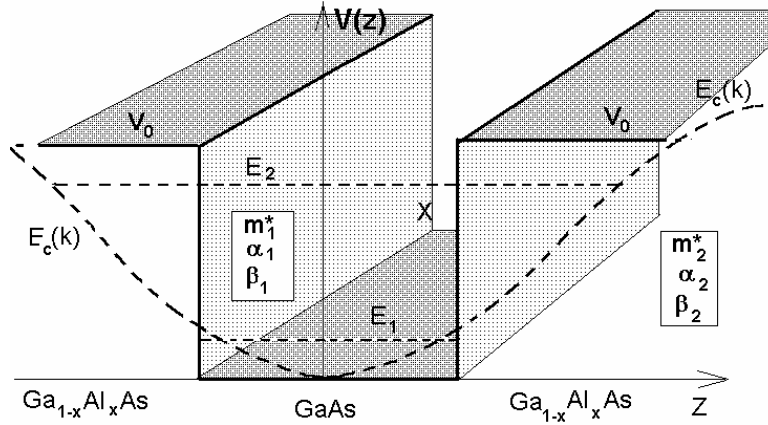


Fig. 37. Representación esquemática de los efectos de noparabolicidad de la banda de conducción y de la variación de masa efectiva en QW. Los valores m_1^*, α_1, β_1 y m_2^*, α_2, β_2 corresponden a los parámetros del material en el pozo y en la barrera respectivamente. La curva de dispersión, $E_c(k)$ no es parabólica y para un ancho grande del pozo (nivel E_1) la masa efectiva es menor que para un ancho pequeño (nivel E_2)

Los valores de estas funciones, tomados de las Ref. [126,127] en el centro del pozo y en las barreras de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ están dadas en la siguiente tabla:

Tabla 4. Parámetros adimensionales del modelo

Parámetro	GaAs	Ga _{0.7} Al _{0.3} As
$(m^* - m_{GaAs}^*)/m^*$	$\eta_1 = 0.0$	$\eta_2 = 0.3$
a_0^*	100Å	
σ	0.001	0.001
$\tilde{\alpha}$ ($Ry^* a_0^{*4}$)	$\tilde{\alpha}_1 = -3.6$	$\tilde{\alpha}_2 = -2.0$
$\tilde{\beta}$ ($Ry^* a_0^{*4}$)	$\tilde{\beta}_1 = -3.9$	$\tilde{\beta}_2 = -2.7$
V	0	261meV=44Ry*

Según la ecuación (3.30) en la aproximación de masa efectiva el Hamiltoniano adimensional para electrón ($\tau=0$) y donadora ($\tau=1$) correspondiente a la curva de dispersión (3.32) utilizando las notaciones (3.32a) puede ser escrito como:

$$H(\tau) = H^{(0)}(\tau) + U_{var}; \quad H^{(0)}(\tau) = -\Delta + V(\vec{r}) - \frac{2\tau}{|\vec{r} - \vec{\xi}|}; \quad (3.33)$$

$$U_{var} = -\nabla[\eta(\vec{r})]\nabla + \sigma\Delta \left[\tilde{\alpha}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\tilde{\beta}(\vec{r}) \right] \Delta - \frac{3}{8}\sigma\Delta_\rho [\tilde{\beta}(\vec{r})] \Delta_\rho - \frac{1}{2}\sigma\Delta_z [\tilde{\beta}(\vec{r})] \Delta_z$$

Como se puede ver de la Tabla 4 los parámetros del modelo sufren un salto en las juntas en una forma abrupta o en una forma suave dentro de una capa transitoria. Para describir este cambio de los parámetros del modelo con la posición del electrón utilizaremos la función paso introducida en los capítulos anteriores, con la cual:

$$\begin{aligned}\eta(\vec{r}) &= \eta_2 \zeta(\vec{r}); \\ \tilde{\alpha}(\vec{r}) &= \tilde{\alpha}_1 + (\tilde{\alpha}_2 - \tilde{\alpha}_1) \zeta(\vec{r}); \\ \tilde{\beta}(\vec{r}) &= \tilde{\beta}_1 + (\tilde{\beta}_2 - \tilde{\beta}_1) \zeta(\vec{r}); \\ V(\vec{r}) &= V_0 \zeta(\vec{r})\end{aligned}\tag{3.33a}$$

donde la función $\zeta(\vec{r})$ se define para QW y cilíndrica QWW como:

$$\zeta(\rho, z) = \begin{cases} \theta(-z, -L/2, W) + \theta(z, L/2, W); & \text{para QW} \\ \theta(\rho, R, W); & \text{para QWW} \end{cases}\tag{3.33b}$$

3.3.2 Método de teoría de perturbaciones. El método más simple para analizar el problema de valores propios del Hamiltoniano (3.33) es utilizar la técnica de teoría de perturbaciones basándose en el hecho de que el primer termino en U_{var} es diferente del cero solo en las barreras donde el electrón aparece con poca probabilidad y los otros términos son proporcionales al parámetro σ cuyo valor es una milésima. Anteriormente ya se encontró que en el orden cero de la teoría de perturbaciones para el Hamiltoniano (3.33) la solución de la ecuación de Schrödinger:

$$H^{(0)}(\tau) \psi^{(0)}(\tau) = E^{(0)}(\tau) \psi^{(0)}(\tau)\tag{3.34}$$

para $\tau = 0$ es la función de onda de electrón desacoplado mientras que para $\tau = 1$ es la función de onda de la donadora neutra:

$$\begin{aligned}\psi^{(0)}(\tau = 0) &= f_0(\vec{r}); \\ \psi^{(0)}(\tau = 1) &= f_0(\vec{r}) \Phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|)\end{aligned}\tag{3.34a}$$

En el primer orden de la teoría perturbaciones respecto a U_{var} la energía es igual a:

$$E^{(1)}(\tau) = E^{(0)}(\tau) + \langle \psi^{(0)}(\tau) | U_{\text{var}} | \psi^{(0)}(\tau) \rangle\tag{3.35}$$

Teniendo en cuenta que la energía de enlace de una donadora se define como $E_b = E(\tau = 0) - E(\tau = 1)$, encontramos que en el primer orden de la teoría de perturbaciones esta es igual a:

$$\begin{aligned}E_b^{(1)} &= E_b^{(0)} + \langle \psi^{(0)}(\tau = 0) | U_{\text{var}} | \psi^{(0)}(\tau = 0) \rangle - \langle \psi^{(0)}(\tau = 1) | U_{\text{var}} | \psi^{(0)}(\tau = 1) \rangle \\ &= E_b^{(0)} + \langle f_0(\vec{r}) | U_{\text{var}} | f_0(\vec{r}) \rangle - \langle f_0(\vec{r}) \Phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|) | U_{\text{var}} | f_0(\vec{r}) \Phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|) \rangle\end{aligned}\tag{3.36}$$

Se puede demostrar que el operador U_{var} esta definido positivamente y por eso el valor promedio de este operador con cualquiera función de onda es positivo. Por lo tanto, los dos términos que contienen este operador en (3.36) son positivos, y ellos son los responsables

del cambio en la energía de enlace producido por los efectos de la variación de masa efectiva y no-parabolicidad de la banda de conducción. Ahora teniendo en cuenta que el último término en (3.36) es menor que el término anterior debido a la presencia del factor adicional $\Phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|)$ que acerca el electrón a la impureza, la energía de enlace de la donadora siempre se incrementa bajo de influencia de los efectos de la variación de la masa efectiva y no-parabolicidad de la banda de conducción.

Para calcular el valor de este incremento hay que evaluar los promedios en (3.36) con las funciones de onda encontrados en los capítulos anteriores para QW y QWW. Utilizando la simetría axial de estos sistemas en el cálculo de los promedios se puede eliminar la integración respecto al ángulo y reducir las formulas para los promedios con el operador U_{var} dado por la expresión (3.33) a integrales dobles. De todas maneras los cálculos de estas integrales son algo tediosos y por eso omitiremos los detalles de este cálculo y solo presentemos algunos resultados obtenidos para QW y QWW.

En la figura.38 se presentan las energías de enlace de las donadoras localizada en el centro de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QWs con diferentes formas de potencial como función del ancho del pozo. Las líneas sólidas en la figura corresponden al modelo de potencial rectangular y en

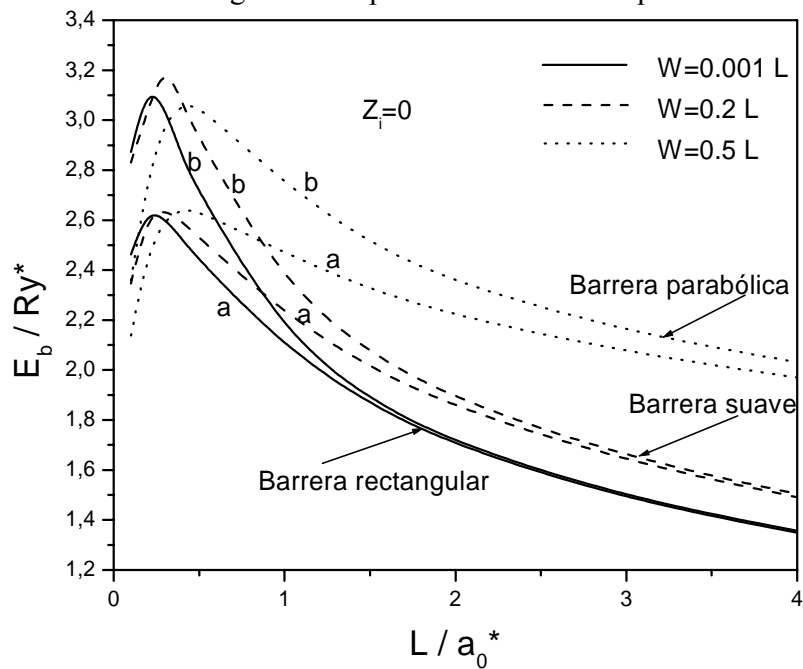


Fig. 38. Energías de enlace de un D^0 centrada como función del ancho de un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes modelos de confinamiento, rectangular ($W=0.001L$, líneas sólidas), con barrera suave ($W=0.2L$, líneas troncadas) y parabólico con barrera finita ($W=0.5L$, líneas punteadas). Las curvas marcadas con el símbolo a son calculadas en el orden cero de la teoría de perturbación y con el símbolo b para el modelo con banda no-parabólica y masa efectiva variable.

ambos casos tanto para la curva a (aproximación cero correspondiente a la masa efectiva no variable y banda de conducción parabólica) como para curva b (aproximación de primer

orden, masa efectiva variable y banda de conducción no-parabólica) están en buena concordancia con los resultados obtenidos anteriormente en el artículo [124].

Como se puede ver de la figura 38 para todos los modelos de confinamiento (potenciales rectangular, suave y parabólico) la diferencia en las energías de enlace se hace despreciable cuando el ancho del pozo es muy grande. Al disminuir el ancho del pozo los efectos de no-parabolicidad de la banda de conducción y variación de la masa efectiva se hacen significativos inicialmente para el modelo con potencial parabólico, después para el potencial suave y por último para el potencial rectangular. Para entender este fenómeno hay que tener en cuenta que para grandes anchos del pozo, los niveles energéticos están cerca del piso de la banda de conducción donde para el potencial parabólico el confinamiento es mas fuerte que para los otros tipos de potenciales y por eso a este potencial corresponden las mayores energías para los cuales los efectos de tunelamiento en la barrera y de no-parabolicidad son más fuertes. Esta es la razón por la cual para los potenciales suaves los efectos de no-parabolicidad y de variación de masa efectiva empiezan a jugar un papel importante cuando el ancho del pozo aun no es tan pequeño. Igualmente el efecto de desbordamiento de los niveles energéticos cuando estos logran el tope correspondiente a la altura de la barrera, para estos potenciales se alcanza para anchos mayores y por lo tanto, como se puede ver de la figura 38, los máximos de las curvas de energías de enlace para los potenciales más suaves siempre están a la derecha con respecto a la de los potenciales menos suaves. Como consecuencia uno puede observar las intersecciones de las diferentes curvas en la figura 38. Según esta figura, el aumento de la energía de enlace para una impureza centrada en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ llega hasta un máximo del 20%.

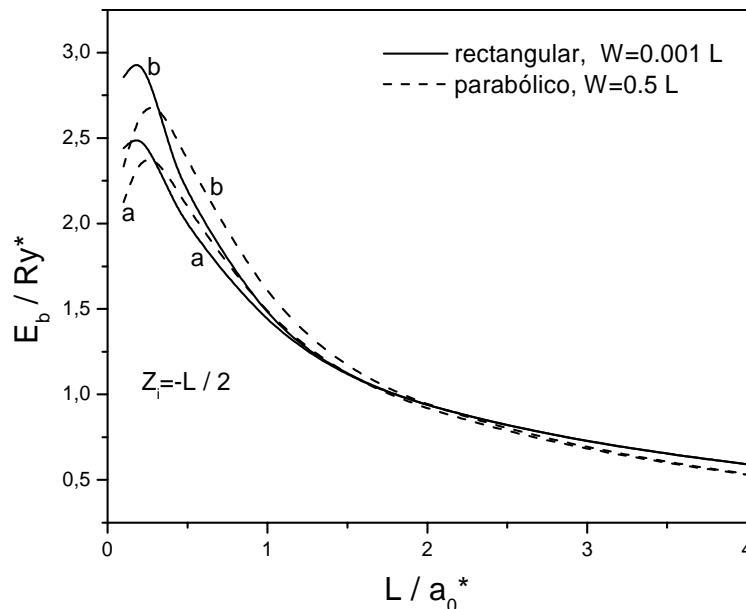


Fig. 39. Energías de enlace de un D^0 descentrado como función del ancho de un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes modelos de confinamiento: rectangular ($W=0.001L$, líneas sólidas), y parabólica con barrera finita ($W=0.5L$, líneas punteadas). Las curvas marcadas con el símbolo a son calculadas en el orden cero de la teoría de perturbación y con el símbolo b para el modelo con banda no-parabólica y masa efectiva variable.

En la figura 39 se presentan los resultados del cálculo de la energía de enlace de las donadoras localizadas en el borde de un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con modelos de potencial rectangular ($W=0.001L$, líneas sólidas) y parabólico ($W=0.5L$, líneas punteadas) como función de ancho del pozo. Se puede ver que los efectos de no-parabolicidad de la banda de conducción y de la variación de la masa efectiva en este caso es similar al caso de las impurezas centradas, pero la magnitud del efecto es menor (para un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ aumenta hasta un máximo del 15%) y el efecto se hace significativo para unos menores anchos del pozo.

En la figura 40 se muestran las energías de enlace de donadoras localizadas sobre el eje de un hilo cuántico cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes formas de potencial como función del radio del hilo. Las líneas sólidas en la figura corresponden al modelo con masa efectiva variable y con banda de conducción no-parabólica (primer orden de aproximación), mientras que las curvas truncadas fueron obtenidas con un modelo simplificado (orden cero de aproximación). Para simular diferentes modelos de confinamiento se utilizaron diferentes parámetros W , para el modelo de potencial rectangular $W = 0.001R$ (R es el radio de QWW) para el potencial suave $W = 0.4R$ y para el potencial parabólico con barrera finita $W = R$. Comparando las curvas en las Figuras 38 y 40 uno puede ver la similitud en los cambios en QWs y QWWs producidos por efectos de la forma del potencial, variación de la masa efectiva y no-parabolicidad de la banda de conducción.

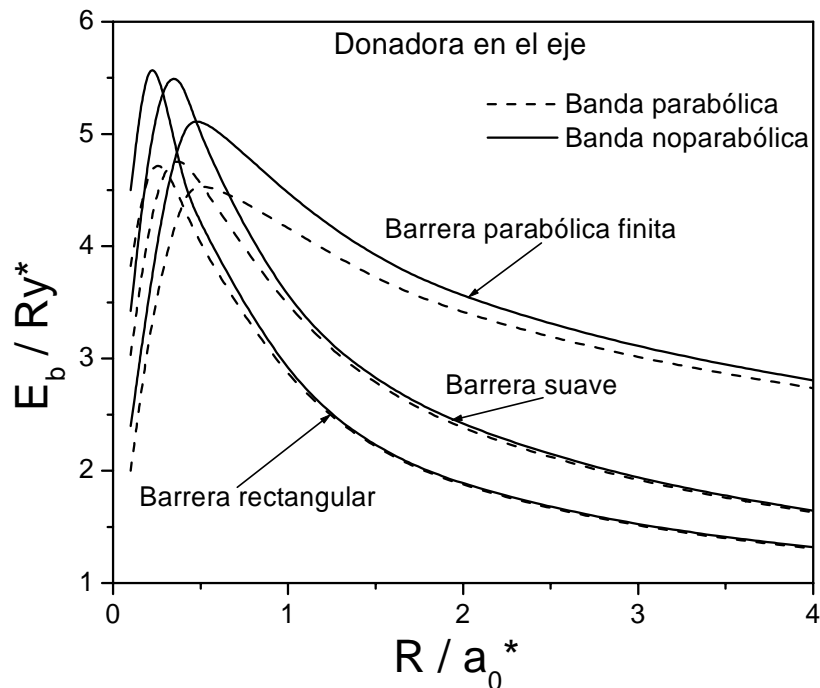


Fig. 40. Energías de enlace de impurezas D^0 localizadas sobre el eje de un QWW cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes modelos de confinamiento: rectangular ($W=0.001R$), con barrera suave ($W=0.4R$) y parabólico con barrera finita ($W=R$) como función del radio del QWW. Las curvas truncadas son calculadas en el orden cero de la teoría de perturbaciones y las sólidas para el modelo con banda no-parabólica y masa efectiva variable.

En la figura 41 se presentan las energías de enlace de una impureza neutra localizada sobre el eje de un QWws cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con potencial rectangular ($W=0.001L$) como una función del radio de hilo para tres diferentes intensidades de campo magnético ($\gamma = 0,1,2$) orientado a lo largo del eje. Se puede ver que para pequeños radios del hilo cuántico (menores de un radio de Bohr efectivo) el efecto de campo magnético casi no se nota, todas las tres curvas tanto en la aproximación cero como en la aproximación uno prácticamente coinciden. La explicación de este resultado fue dada anteriormente en la sección 3.1.2.1. Por otro lado, para grandes radios del hilo (mayores de dos radios de Bohr efectivo) las curvas se separan, ya que a mayor campo magnético mayor es la energía de enlace. Pero para estos valores de los radios del hilo, los efectos de la variación de la masa y de la no-parabolicidad de la banda de conducción no son grandes ya que las energías del electrón a pesar de la presencia del campo magnético son pequeñas y el campo magnético no aumenta la probabilidad de penetración en la barrera. De todas maneras se puede ver que el efecto de no-parabolicidad en presencia de campo magnético para radios mayores de dos radios de Bohr efectivo se aumenta un poco.

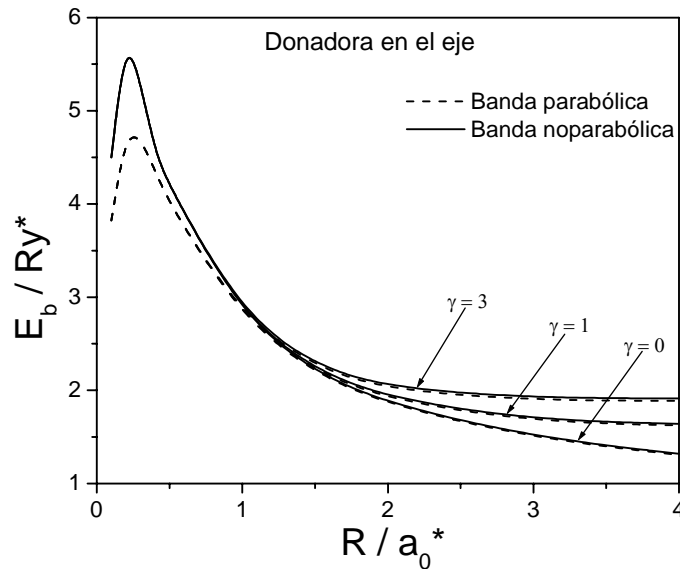


Fig. 41. Energías de enlace de una impureza D^0 localizadas sobre el eje de un QWws cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con potencial rectangular ($W=0.001R$), como función del radio del hilo, para tres intensidades del campo magnético.

En la figura 42 se presentan los resultados del cálculo de las energías de enlace de una impureza neutra confinada en un nanotubo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de forma cilíndrica con radio interno R_{int} , y externo R_{ext} , cuyo potencial lateral se define como:

$$V(\rho) = V_0\theta(-\rho, -R_{int}, W) + V_0\theta(\rho, R_{ext}, W) \quad (3.37)$$

El perfil de la sección transversal de este potencial para el caso $R_{int} = 0.5R_{ext}$ y tres diferentes posiciones de la impureza, en el eje ($\zeta = 0$), en el centro del pozo ($\zeta = (R_{int} + R_{ext})/2$) y en el borde exterior $\zeta = R_{ext}$ para los cuales se calcularon las energías de enlace se presenta en la figura 42. Cuando el radio exterior del nanotubo es

grande (y el radio interior también) el electrón tiene mayor probabilidad de estar ubicado en el centro del pozo y por eso la mayor energía de enlace corresponde a la impureza localizada en es lugar, $\zeta = (R_{int} + R_{ext})/2 = 3R_{ext}/4$ (ver figura 43a). La distancia desde esta posición hasta la impureza localizada en el borde exterior, $R_{ext}/4$ es menor que la distancia hasta la impureza en el eje y por eso la menor energía corresponde a esta última posición de la impureza, seguida por la posición en el borde exterior y la mayor energía la tiene la impureza localizada en el centro del pozo. Cuando el radio exterior de nanotubo empieza a disminuir, también se disminuye el radio interior y cuando $R_{ext} < 2a_0^*$ ya la función de onda empieza a penetrar en la región de la barrera central debido al efecto de tunelamiento (ver figura 43b). Esto conduce a una disminución de la separación entre el electrón y la impureza ubicada sobre el eje, por eso en la figura 42 se observa el primer cruce entre las curvas sólida y punteada cuando $R_{ext} \approx 2a_0^*$.

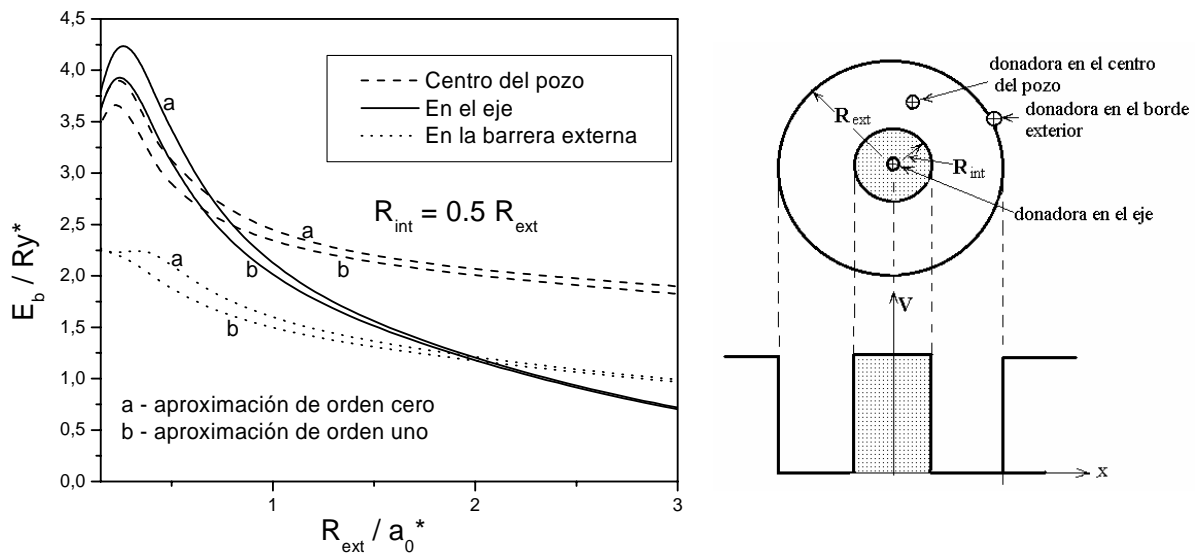


Fig. 42. Energías de enlace de un D^0 como función del radio externo de un nanotubo de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As para el caso $R_{int} = 0.5R_{ext}$ y para diferentes posiciones de la impureza. Las curvas marcadas con el símbolo a son calculadas en el primer orden de la teoría de perturbación y con el símbolo b para el modelo con banda parabólica y masa efectiva no variable.

Finalmente cuando el radio exterior se hace menor a aproximadamente $0.75a_0^*$ la función de onda se desborda desde el pozo hacia barrera interior (ver figura 43c) acercando el electrón a la impureza localizada en el eje y esto conduce al cruce de las curvas sólida y troncada en la figura 42. Mas adelante al disminuir el radio todas las energías de enlace siguen creciendo hasta que la función de onda sufra un segundo desbordamiento, esta vez en la barrera exterior. Como consecuencia de este fenómeno la energía de enlace empieza a caer para todas las posiciones de la impureza cuando el radio exterior se hace menor de $0.25a_0^*$.

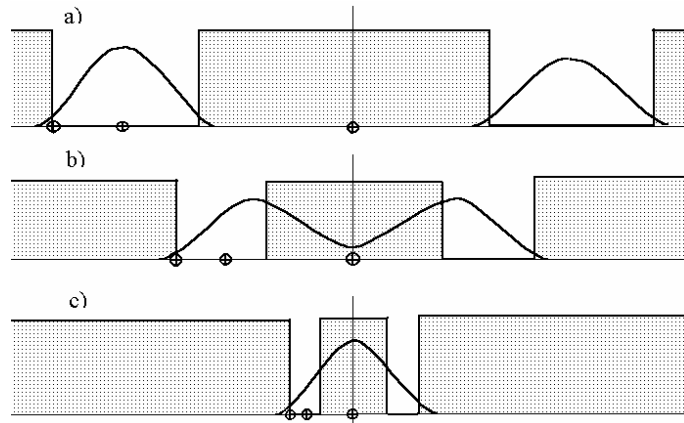


Fig. 43. Representación esquemática de cambio del perfil de función de onda del electrón en nanotubo con la disminución del radio: a) radio grande, b) radio intermedio, c) radio pequeño.

Uno puede ver que los efectos de la variación de la masa efectiva y de no-parabolicidad de la banda de conducción son similares al de un hilo cilíndrico, estos efectos siempre producen un incremento de la energía de enlace que es solo significativo cuando el confinamiento es fuerte.

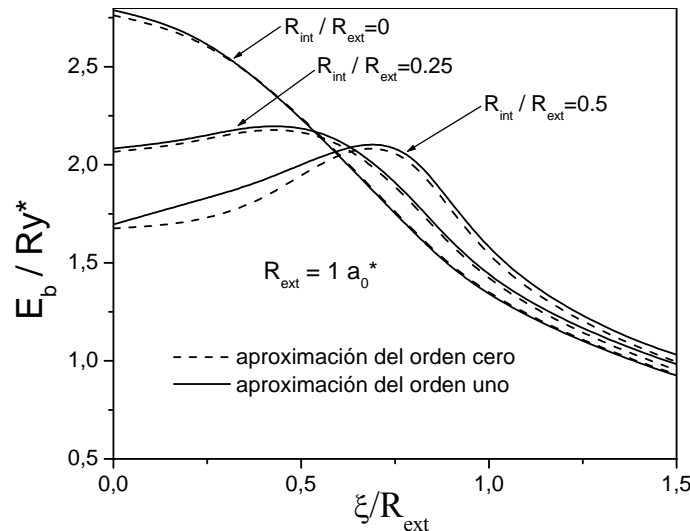


Fig. 44. Energías de enlace de un D^0 en un nanotubo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, para diferentes razones de los radios interior y exterior en función de la distancia entre la impureza y eje de nanotubo.

En la figura 44 presentamos las energías de enlace de donadoras en función de la distancia entre la impureza y eje de simetría para un hilo cilíndrico ($R_{int}/R_{ext} = 0$) y dos nanotubos con diferentes razones de los radios interno y externo $R_{int}/R_{ext} = 0.25$ y $R_{int}/R_{ext} = 0.5$. Uno puede ver que en el hilo cilíndrico la energía de enlace decrece siempre monótonamente debido al aumento de la separación entre electrón y el ión. En este caso la función de onda del electrón tiene el máximo en el eje y por eso cualquier desplazamiento de la donadora hacia la barrera produce un aumento en el valor promedio de la separación electrón-ión. En el caso de los nanotubos la situación puede ser diferente donde en la

mayoría de los casos el máximo de la función de onda del electrón está ubicado en algún lugar entre los radios interno y externo (ver Fig. 43a y 43b). Por esta razón cuando la impureza empieza a desplazarse desde el eje hacia la barrera, inicialmente la separación entre el electrón y el ión disminuye y como consecuencia la energía de enlace crece hasta que la posición de impureza coincide con la posición de este máximo. De allí en adelante el incremento de la distancia desde la impureza hasta el eje empieza a producir un incremento en la separación electrón-ión y la energía de enlace empieza a caer. De esta manera la posición del máximo en las curvas de la energía de enlace en la figura 44 para nanotubos coincide con la posición del máximo de la función de onda del electrón. Se puede observar que entre mayor es la razón de los radios interior y exterior del nanotubo, mayor es la distancia hasta el eje en el que se observa el máximo para las curvas de las energías de enlace. Igualmente como en los casos anteriores los efectos de la variación de la masa efectiva y de la no-parabolicidad de la banda de conducción produce un incremento en las energías de enlace, pero estos incrementos en la figura 44 no son muy grandes debido a que los cálculos presentados corresponden a un radio del hilo suficientemente grande y aun potencial de forma rectangular.

3.3.3 Solución de la ecuación de Poisson en un medio no homogéneo con una variación de la constante dieléctrica. En los párrafos anteriores sobre los efectos de la variación de parámetros, no hemos tenido en cuenta los efectos relacionados con la variación de la constante dieléctrica ϵ . Pero en esta sección tomaremos en cuenta este efecto sobre impurezas confinadas en heterojunturas semiconductoras, ya que como fue demostrado en los artículos [120,83], la variación de ϵ a pesar de que esta no supera un 5%, puede conducir a un aumento de hasta un 10% en la energía de enlace de una donadora en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$. Para considerar el efecto de la variación de la constante dieléctrica, ϵ , uno debe resolver la ecuación de Poisson en un medio no homogéneo. Si se considera que ϵ cambia abruptamente en las barreras de un QW, la ecuación de Poisson se puede resolver en una forma analítica utilizando el método de imágenes. Esta solución exacta para un cambio abrupto ϵ en un QW fue la que se utilizó en los artículos [120,83] para analizar los enlaces de donadoras en QWs. Para el caso de un cambio suave (no abrupto) de ϵ , no se conocen soluciones analíticas de la ecuación de Poisson, así como tampoco se conocen soluciones analíticas para QWW ni para cambios abrupto ni suaves de ϵ en la barrera. En los artículos [125,126] para resolver la ecuación de Poisson en un QWW con una variación abrupta de ϵ , se utilizó el método de la teoría de perturbaciones. En este párrafo nosotros proponemos un método aproximado que permite resolver la ecuación de Poisson en cualquiera heteroestructura en una forma unificada con una variación de ϵ arbitraria con la única restricción de que la diferencia de valores de ϵ en la barrera y en el pozo es suficientemente pequeña.

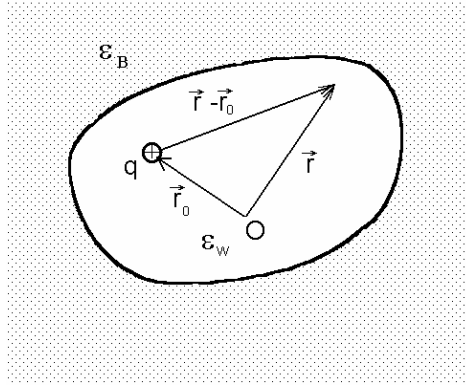


Fig. 45. Representación esquemática de una heterojuntura con la constante dieléctrica variable.

Con este fin, consideremos una carga eléctrica q localizada dentro de un pozo cuántico donde el valor de la constante dieléctrica ε_W es diferente al valor correspondiente en la barrera ε_B ($\varepsilon_W > \varepsilon_B$), pero la diferencia de estos dos valores es mucho menor que ε_W , es decir que, $\varepsilon_W - \varepsilon_B \ll \varepsilon_W$ (ver Fig.37). En este caso la dependencia de la constante dieléctrica con el vector de posición se puede representar en la forma:

$$\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon_W - \varepsilon_W \xi \beta(\vec{r}); \quad \beta(\vec{r}) = [\varepsilon_W - \varepsilon(\vec{r})] / [\varepsilon_W - \varepsilon_B]; \quad \xi = [\varepsilon_W - \varepsilon_B] / \varepsilon_W \ll 1 \quad (3.38)$$

donde la función $\beta(\mathbf{r})$ varía desde cero dentro del pozo hasta uno en la barrera.

El potencial de campo eléctrico producido por la carga q dentro y fuera del pozo puede ser encontrado al resolver la ecuación de Poisson:

$$\nabla[\varepsilon(\vec{r})\nabla]\varphi(\vec{r}) = -4\pi q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (3.39)$$

Sustituyendo (3.38) en (3.39) y utilizando los operadores \mathbf{L} y \mathbf{V} definidos como:

$$\mathbf{L}(\vec{r}) = \varepsilon_W \Delta; \quad \mathbf{V}(\vec{r}) = \varepsilon_W \beta(\vec{r}) \Delta + \varepsilon_W \nabla \beta(\vec{r}) \cdot \nabla = \beta(\vec{r}) \mathbf{L}(\vec{r}) + \varepsilon_W \nabla \beta(\vec{r}) \cdot \nabla \quad (3.40)$$

la ecuación (3.39) se reduce a la siguiente

$$\mathbf{L}(\vec{r})\varphi(\vec{r}) - \xi \mathbf{V}(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = -4\pi q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (3.41)$$

La solución de la ecuación (3.41) para el caso particular $\xi = 0$ (medio homogéneo) es bien conocida y se llama la función de Green para el operador de Laplace en todo el espacio:

$$\mathbf{L}(\vec{r})G(\vec{r} - \vec{r}_0) = -4\pi q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0); \quad G(\vec{r} - \vec{r}_0) = \frac{q}{\varepsilon_W |\vec{r} - \vec{r}_0|} \quad (3.42)$$

Utilizando la relación (3.42) uno puede definir el operador inverso \mathbf{L}^{-1} a través de la función de Green:

$$G(\vec{r} - \vec{r}_0) = -4\pi q\delta(\vec{r} - \vec{r}_0)\mathbf{L}^{-1}(\vec{r}) \quad (3.43)$$

Multiplicando ambas partes de la ecuación (3.41) por la izquierda por este operador inverso y sustituyendo la variable \vec{r} por \vec{r}_1 se obtiene:

$$\varphi(\vec{r}_1) - \xi \mathbf{L}^{-1}(\vec{r}_1)\mathbf{V}(\vec{r}_1)\varphi(\vec{r}_1) = G(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) \quad (3.44)$$

$$\varphi(\vec{r}) = G(\vec{r} - \vec{r}_0) - \frac{\xi}{4\pi q} \int G(\vec{r}_1 - \vec{r}) \mathbf{V}(\vec{r}_1) \varphi(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 \quad (3.45)$$

Usando el método de iteraciones sucesivas se obtiene en el primer orden con respecto al parámetro pequeño ξ el siguiente resultado:

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{r}) &= G(\vec{r} - \vec{r}_0) - \frac{\xi}{4\pi q} \int G(\vec{r}_1 - \vec{r}) \mathbf{V}(\vec{r}_1) G(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) d\vec{r}_1 = \\ &= G(\vec{r} - \vec{r}_0) - \frac{\xi}{4\pi q} \int G(\vec{r}_1 - \vec{r}) \{ \varepsilon_w \nabla_1 \beta(\vec{r}_1) \cdot \nabla_1 \} G(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) d\vec{r}_1 \\ &\quad - \frac{\xi}{4\pi q} \int G(\vec{r}_1 - \vec{r}) \{ \beta(\vec{r}_1) \mathbf{L}(\vec{r}_1) \} G(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) d\vec{r}_1 = \end{aligned}$$

El último término en esta expresión es igual a cero debido a la ecuación (3.42) en los puntos $\vec{r}_1 \neq \vec{r}_0$ y según la igualdad $\beta(\vec{r}_0) = 0$ en el punto \mathbf{r}_0 . Por eso

$$\varphi(\vec{r}) = G(\vec{r} - \vec{r}_0) - \frac{\xi}{4\pi q} \int G(\vec{r}_1 - \vec{r}) \{ \varepsilon_w \nabla_1 \beta(\vec{r}_1) \cdot \nabla_1 \} G(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) d\vec{r}_1 \quad (3.46)$$

$$\varphi(\vec{r}) = \frac{q}{\varepsilon_w |\vec{r} - \vec{r}_0|} + \xi \varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0); \quad \varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = - \frac{q}{4\pi \varepsilon_w} \int \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_0) \nabla_1 \beta(\vec{r}_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}| |\vec{r}_1 - \vec{r}_0|^3} d\vec{r}_1 \quad (3.47)$$

Se puede ver que utilizando la teoría de perturbaciones, en general se puede representar el potencial electrostático como una suma de dos términos, el término Coulombiano y la corrección no-Coulombiana. Este último término se presenta en (3.47) como una integral triple, pero en los casos de heteroestructuras concretas el orden de esta integral se puede reducir utilizando las propiedades de simetría del sistema. Con este fin consideremos los diferentes tipos de heteroestructuras por separado.

a) QW. En el caso de un QW, la función $\beta(\vec{r})$ depende solo de la coordenada z , esto es $\beta(\vec{r}) = \beta(z)$, entonces

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = - \frac{q}{4\pi \varepsilon_w} \int \frac{(z_1 - z_0) \beta'(z_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}| |\vec{r}_1 - \vec{r}_0|^3} d\vec{r}_1 \quad (3.48)$$

pero en esta integral triple la integración con respecto a las dos variables cilíndricas ρ_1 y ϑ_1 puede realizarse analíticamente y el resultado final para la función (3.48) es:

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = \frac{q}{\varepsilon_w} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\beta'(z_1) \theta(z_0 - z_1) dz_1}{\sqrt{\rho^2 + \eta^2(z_0, z, z_1)}} \quad (3.49)$$

donde

$$\eta(z_0, z, z') = |z - z'| + |z' - z_0| \quad (3.49a)$$

$$\theta(z_0 - z') = \frac{(z_0 - z')}{|z' - z_0|} = \begin{cases} 1 & z_0 > z' \\ -1 & z_0 < z' \end{cases} \quad (3.49b)$$

y los vectores de posición son definidos en coordenadas cilíndricas $\{\rho, z, \vartheta\}$ como:
 $\vec{r} = \{\rho, z, 0\}$; $\vec{r}_0 = \{0, z_0, 0\}$

Las fórmulas (3.49) se simplifican para el caso cuando la constante dieléctrica cambia abruptamente, es decir, cuando

$$\beta'(z) = -\delta(L/2 - z) - \delta(z + L/2).$$

En este caso la integral (3.49) se calcula en forma explícita y se obtiene el siguiente resultado:

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = -\frac{q}{\varepsilon_w} \left[\frac{\theta(L/2 - z_0)}{\sqrt{\rho^2 + \eta^2(z_0, z, L/2)}} + \frac{\theta(z_0 + L/2)}{\sqrt{\rho^2 + \eta^2(z_0, z, -L/2)}} \right] \quad (3.50)$$

Nótese que esta fórmula para cambios abruptos de la constante dieléctrica, en donde la derivada $\beta'(z)$ es una función delta coincide con la fórmula conocida de la teoría de imágenes en el primer orden con respecto al parámetro ξ con el aporte de solo dos imágenes.

b) QWW. En este caso la función $\beta(\vec{r}) = \beta(\rho)$ depende solo de la coordenada ρ , entonces

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = -\frac{q}{4\pi\varepsilon_w} \int \frac{(\rho_1 - \rho_0)\beta'(\rho_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}||\vec{r}_1 - \vec{r}_0|^3} d\vec{r}_1 \quad (3.51)$$

Al escoger las coordenadas cilíndricas tal como se muestra en la Fig. 46, la integral (3.51) se puede escribir en la siguiente forma:

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = -\frac{q}{4\pi\varepsilon_w} \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \int_0^{\infty} \rho_1 d\rho_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \frac{(\rho_1 - \rho_0)\beta'(\rho_1)}{D(z_1, \rho_1, \varphi_1)}; \quad (3.52)$$

$$D(z_1, \rho_1, \varphi_1) = \sqrt{\left[(z - z_1)^2 + \rho^2 + \rho_1^2 - 2\rho\rho_1 \cos(\varphi - \varphi_1) \right] \left[z_1^2 + \rho_0^2 + \rho_1^2 - 2\rho_0\rho_1 \cos\varphi_1 \right]^3}$$

donde los vectores de posición son definidos en coordenadas cilíndricas $\{\rho, z, \vartheta\}$ como:
 $\vec{r} = \{\rho, z, \varphi\}$; $\vec{r}_0 = \{\rho_0, 0, 0\}$

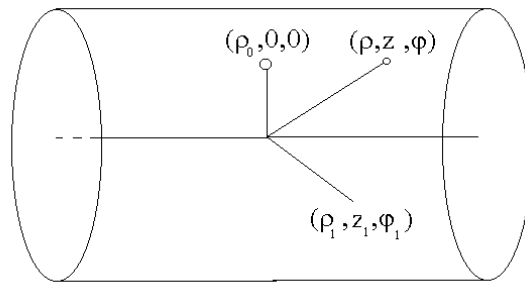


Fig. 46. Coordenadas de tres puntos escogidas para calcular la integral (3.51).

Las fórmulas (3.52) se simplifican para el caso de un cambio abrupto de la constante dieléctrica, es decir, cuando

$$\beta'(\rho) = \delta(\rho - R)$$

En este caso la integral triple (3.52) se reduce a la integral doble:

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_w} \int_{-\infty}^{\infty} dz_1 \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \frac{R(R - \rho_0)}{D(z_1, R, \varphi_1)}; \quad (3.52a)$$

c) QD. Como en este caso la función $\beta(\vec{r}) = \beta(r)$ depende sólo de coordenada r , entonces la fórmula (3.47) se reduce a la siguiente:

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_w} \int \frac{(r_1 - r_0)\beta'(r_1)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}||\vec{r}_1 - \vec{r}_0|^3} d\vec{r}_1 \quad (3.53)$$

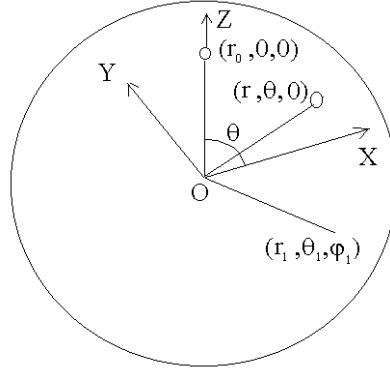


Fig. 47 Coordenadas de tres puntos escogidas para calcular la integral (3.53).

Al escoger las coordenadas esféricas así como se muestra la Fig. 47, la relación (3.53) se puede escribir en forma explícita como la siguiente integral triple:

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_w} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi} \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 \int_0^{\infty} r_1^2 dr_1 \frac{(r_1 - r_0)\beta'(r_1)}{M(r_1, \vartheta_1, \varphi_1)}; \quad (3.54)$$

$$M(r_1, \vartheta_1, \varphi_1) = \sqrt{[r_1^2 + r_0^2 - 2r_0r_1 \cos \vartheta_1][r^2 + r_1^2 - 2rr_1(\cos \vartheta_1 \cos \vartheta + \sin \vartheta_1 \sin \vartheta \cos \varphi_1)]^3}$$

donde los vectores de posición son definidos en coordenadas esféricas $\{r, \vartheta, \varphi\}$ como:

$$\vec{r} = \{r, \vartheta, 0\}; \quad \vec{r}_0 = \{r_0, 0, 0\}$$

Las fórmulas (3.54) se simplifican para el caso de un cambio abrupto de la constante dieléctrica, esto es, cuando

$$\beta'(r) = \delta(r - R)$$

En este caso la integral triple (3.54) se reduce a la integral doble:

$$\varphi_{nc}(\vec{r}, \vec{r}_0) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_w} \int_0^{2\pi} d\varphi_1 \int_0^{\pi} \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 \frac{R^2(R - r_0)}{M(R, \vartheta_1, \varphi_1)}; \quad (3.54a)$$

3.3.4 Cálculo directo para un modelo con parámetros variables y banda de conducción no-parabólica. En heterojunturas de $GaAs/Ga(Al)As$ la masa efectiva, m^* y la constante dieléctrica, ε en la barrera es diferente del valor correspondiente dentro de pozo cuántico debido a que la masa efectiva de electrón, m^* se incrementa y la constante dieléctrica, ε disminuye con la concentración x de Al según las fórmulas;

$$m^*/m_0 = 0.067 + 0.083x; \quad \varepsilon = 12.5 - 2.4x, \quad (3.55)$$

encontradas a través de la interpolación de los datos experimentales en resonancia electrónica [127]. Además para describir los efectos de no-parabolicidad de la banda de conducción sobre los niveles energéticos, utilizaremos el método propuesto en las referencias [83,121] donde se consideró que la masa efectiva del electrón en la banda de conducción en el $GaAs$ en función de la energía está dada a través de la relación:

$$m^*/m_0 = 0.067 + 0.0436E + 0.236E^2 - 0.147E^3, \quad (3.56)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre y E es la energía respecto al piso de la banda de conducción expresada en electrón Volts. De esta manera, reuniendo las fórmulas interpolativas (3.55) y (3.56) y utilizando las notaciones introducidas en los párrafos anteriores podemos definir las dependencias de m^* y ε con el vector de posición \vec{r} del electrón como:

$$m^*(\vec{r}, E)/m_{GaAs}^* = [1 + 1.24x\zeta(\vec{r})] (1.0 + 0.651E + 3.522E^2 - 2.194E^3) \quad (3.57a)$$

$$\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon_w - \varepsilon_w \xi \beta(\vec{r}); \quad \beta(\vec{r}) = \zeta(\vec{r}); \quad \xi = 0.192x, \quad (3.57b)$$

donde $m_{GaAs}^* = 0.067m_0$ y $\varepsilon_w = 12.5$ son la masa efectiva del electrón y la constante dieléctrica en el $GaAs$, x es la concentración de Al en la barrera y la función $\zeta(\vec{r})$ esta definida en (3.33b). En esta parte de la tesis nosotros mostraremos como la teoría de Dimensión Fractal anteriormente desarrollada para un modelo con masa efectiva y constante dieléctrica no variables, puede ser extendida para un modelo más realista donde la masa efectiva depende de la concentración de Al y de la energía y la constante dieléctrica depende de la posición del electrón.

En el marco de la teoría de masa efectiva, el Hamiltoniano para el estado base de un D^- en una heterojuntura de $GaAs/Ga(Al)As$ (tales como QW, SL, QWW, QD, etc.) en presencia de un campo magnético homogéneo $\mathbf{B} = B\hat{z}$, y teniendo en cuenta la variación de masa efectiva puede ser representado como:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\vec{r}_1, Z=1) + \hat{H}_0(\vec{r}_2, Z=1) + \frac{e^2}{\varepsilon_w} \left[\frac{1}{r_{12}} + \xi \varphi_{nc}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right]; \quad (3.58)$$

con

$$\hat{H}_0(\vec{r}_i, Z) = -\nabla_i \left[\frac{\hbar}{2m^*(\vec{r}_i, E)} \nabla_i \right] + V(\vec{r}_i) + \frac{m^*(\vec{r}_i, E) \omega_i^2 \rho_i^2}{2} - \frac{e^2 Z}{\varepsilon_w |\vec{r}_i - \vec{\zeta}|} \left[\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{\zeta}|} + \xi \varphi_{nc}(\vec{r}_i, \vec{\zeta}) \right]; \quad (3.58a)$$

$$\omega_i = eB/m^*(\vec{r}_i, E)c; \quad i=1,2$$

donde el parámetro Z en el Hamiltoniano uní-particular (3.58a) es igual a cero para el electrón libre y a uno para la donadora D^0 , $\vec{\zeta}$ y $\vec{r}_i = (\vec{\rho}_i, z_i)$, ($i=1,2$) representan los vectores de posición del ión y de los electrones 1 y 2 respectivamente. Todos los vectores

son medidos desde el centro de la heterojuntura, $r_{i2} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ y $V(\vec{r})$ es el potencial de confinamiento. Utilizando el radio de Bohr efectivo $a_0^* = \epsilon \hbar^2 / m_{GaAs}^* e^2$ para las longitudes, Rydberg efectivo $Ry^* = e^2 / 2a_0^* \epsilon$ para las energías y $\gamma = e \hbar B / 2m^* c Ry^*$ para la intensidad de campo magnético, el Hamiltoniano (3.58) se reduce a la siguiente forma adimensional:

$$\hat{H} = \hat{H}_0(\vec{r}_1, Z=1) + \hat{H}_0(\vec{r}_2, Z=1) + 2 \left[\frac{1}{r_{12}} + \xi \varphi_{nc}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right]; \quad (3.59)$$

$$\hat{H}_0(\vec{r}_i, Z) = -\nabla_i [\eta(\vec{r}_i, E) \nabla_i] + V(\vec{r}_i) + \frac{\eta(\vec{r}_i, E) \gamma^2 \rho_i^2}{4} - 2Z \left[\frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{\zeta}|} + \xi \varphi_{nc}(\vec{r}_i, \vec{\zeta}) \right]; \quad (3.59a)$$

$i=1, 2$

Aquí la función $\eta(\vec{r}, E)$ se define como:

$$\eta(\vec{r}, E) = m_{GaAs} / m^*(\vec{r}) = \frac{1}{[1 + 1.24x\zeta(\vec{r})] (1.0 + 3.8 \cdot 10^{-3} E + 1.2 \cdot 10^{-4} E^2 - 4.3 \cdot 10^{-7} E^3)} \quad (3.59b)$$

En esta última fórmula las energías ya están expresadas en los Rydberg efectivo de GaAs ($1Ry^* = 0.00583eV$). Siguiendo procedimientos similares a los descritos en las secciones 2.1.1.1 y 2.1.2.1 y utilizando las mismas denotaciones, nosotros proponemos algoritmos similares para encontrar las energías y funciones de onda en el estado base para el electrón libre, el D^0 y el D^- :

1) Para el electrón libre la ecuación de onda con el Hamiltoniano (3.59a) con $Z=0$ es:

$$-\nabla [\eta(\vec{r}, E_0) \nabla] f_0(\vec{r}, E_0) + V(\vec{r}) f_0(\vec{r}, E_0) + \frac{\eta(\vec{r}, E_0) \gamma^2 \rho^2}{4} f_0(\vec{r}, E_0) = E_0 f_0(\vec{r}, E_0) \quad (3.60)$$

para QW, QWW cilíndrico y QD esférico (solo en el caso cero-campo magnético) esta ecuación es separable y esto permite reducir el problema (3.60) a una ecuación diferencial uní-dimensional. Para resolverla nosotros utilizaremos el método de barrido trigonométrico, el cual como demostraremos mas adelante, al coser las dos soluciones en el pozo y en la barrera nos permite encontrar la ecuación trascendente para la energía del estado base E_0 .

2) Para el estado base de un D^0 en una heterojuntura semiconductor, de acuerdo con el procedimiento 2.1.1.1, el problema se reduce a resolver la siguiente ecuación diferencial:

$$-\frac{1}{J_0(r)} \frac{d}{dr} \left[J_1(r, E_{D^0}) \frac{d}{dr} \Phi(r) \right] - \left[\frac{2}{r} + \xi V_{nc}(|\vec{r} - \vec{\zeta}|) \right] \frac{2}{r} \Phi(r) = [E_{D^0} - E_0] \Phi(r) \quad (3.61)$$

donde al igual que antes,

$$J_1(r, E_{D^0}) = r^2 P_1(r, E_{D^0}); \quad J_0(r) = r^2 P_0(r), \quad (3.61a)$$

con

$$P_0(r) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} f_0^2(r \sin\theta \cos\varphi + \zeta_x, r \sin\theta \sin\varphi + \zeta_y, r \cos\theta + \zeta_z) \sin\theta d\theta, \quad (3.61b)$$

$$P_1(r, E_{D^0}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \eta(r, \theta, \varphi, E_{D^0}) f_0^2(r \sin\theta \cos\varphi + \zeta_x, r \sin\theta \sin\varphi + \zeta_y, r \cos\theta + \zeta_z) \sin\theta d\theta$$

donde la función $f_0(x, y, z)$ es la solución del problema (3.60) en coordenadas cartesianas con el origen ubicado en el centro de simetría de la heteroestructura y la función $\eta(r, \theta, \varphi, E)$ esta definida como:

$$\eta(r, \theta, \varphi, E) = \frac{1}{[1 + 1.24x\zeta(r, \theta, \varphi)](1.0 + 3.8 \cdot 10^{-3} E + 1.2 \cdot 10^{-4} E^2 - 4.3 \cdot 10^{-7} E^3)}, \quad (3.61c)$$

$$\zeta(r, \theta, \varphi) = \begin{cases} \theta(-r \cos\theta - \zeta_z, -L/2, W) + \theta(r \cos\theta + \zeta_z, L/2, W); & \text{para } QW \\ \theta(\sqrt{r^2 \sin^2\theta + \zeta_\rho^2} + 2r\zeta_\rho \sin\theta \cos\varphi, R, W); & \text{para } QWW \end{cases}$$

El potencial promediado de las imagines $V_{nc}(r)$ en (3.61) se calcula como una integral doble:

$$V_{nc}(\vec{r} - \vec{\zeta}) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta f_0^2(r \sin\theta \cos\varphi + \zeta_x, r \sin\theta \sin\varphi + \zeta_y, r \cos\theta + \zeta_z) V_{nc}(\vec{r} - \vec{\zeta}, 0) \quad (3.61d)$$

La energía de la donadora E_{D^0} entra en la ecuación (3.61) tanto en la parte derecha como en la izquierda similarmente como en la ecuación para el electrón libre y por eso para resolver el problema (3.61) se puede utilizar un procedimiento similar basado en el método de barrido trigonométrico.

3) De manera similar siguiendo el procedimiento de la sección 2.1.2.1, para el estado base de un D^- en una heterojuntura semiconductor, el problema se reduce a resolver la siguiente ecuación diferencial:

$$-\sum_{i=1,2} \frac{1}{P_0(r_i)} \nabla_i [P_1(r_i, E_{D^0}) \nabla_i \Phi_{D^-}] + \left(-\frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{2}{r_{12}} + V_{nc}(\vec{r} - \vec{\zeta}) \right) \Phi_{D^-} = [E_{D^-} - 2E_0] \Phi_{D^-} \quad (3.62)$$

donde las funciones $P_0(r)$, $P_1(r, E_{D^0})$ y $V_{nc}(\vec{r} - \vec{\zeta})$ son las mismas que en la expresión (3.61).

Para estimar la energía $E(D^-)$ para el estado base de una impureza D^- confinada en una heterojuntura semiconductor, finalmente debemos resolver el problema (3.62). Para esto usamos como función de correlación $\Phi_{D^-}(r_1, r_2, r_{12})$, la misma función dada por la ecuación (3.2), y siguiendo el mismo procedimiento que seguimos para obtener la ecuación (3.3), ahora obtenemos:

$$E(D^-, \alpha, \beta, \eta) = 2E_0 + \frac{I_1 + I_2 + I_3 + I_4}{I_0}, \quad (3.63)$$

donde,

$$\begin{aligned}
I_0 &= \int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P_0\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) P_0\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) R_0(s, t) dt \\
I_1 &= \int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P_0\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) P_1\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) R_1(s, t) dt \\
I_2 &= \int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P_0\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) P_1\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) R_2(s, t) dt \\
I_3 &= \int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s P_0\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) P_0\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) R_3(s, t) dt \\
I_4 &= \int_0^\infty e^{-2\alpha s} ds \int_0^s dt \int_t^s P_0\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) P_0\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) R_4(s, t, u) du
\end{aligned} \tag{3.63a}$$

con

$$R_0(s, t) = (s^2 - t^2) \left[\frac{1}{2}(s^2 - t^2)(1 + \beta t^2)^2 + \frac{2\lambda}{3}(s^3 - t^3)(1 + \beta t^2) + \frac{\lambda^2}{4}(s^4 - t^4) \right] \tag{3.63b}$$

$$\begin{aligned}
R_1(s, t) &= \frac{1}{6}(s^2 - t^2) \left\{ \left[6\lambda^2 + 24\beta t \left(\frac{2}{3}\lambda + \beta t \right) + 3\alpha\lambda(s^2 + t^2) + (24\alpha\beta t + 8\alpha\lambda s + \right. \right. \\
&6\alpha(1 + \beta t^2)) (1 + \beta t^2) - 6\alpha\lambda^2(s + t) \left. \right] (s + t)^2 + 8\alpha\lambda(s + t)(t^2 - 3t - s)(1 + \beta t^2) + \\
&32\lambda\beta s t^2 [1 - \alpha(s + t)] + 16\alpha\lambda t(t - \beta s^3) \left. \right\}
\end{aligned} \tag{3.63c}$$

$$\begin{aligned}
R_2(s, t) &= \frac{1}{6}(s^2 - t^2) \left\{ \left[6\lambda^2 + 24\beta^2 t^2 + 8\alpha(3\beta t + \lambda s)(1 + \beta t^2) \right] (s + t)^2 - \right. \\
&\left[16\beta\lambda + 6\alpha\lambda^2(s + t) \right] (s - t)^2 + \alpha \left[6s + 6t(1 + \beta t^2) + 8\lambda t^2 \right] (s + t)(1 + \beta t^2) + \\
&16\alpha\lambda s t(1 + \beta t^2) - 8\alpha\lambda(s^2 + t^2)(1 + \beta t^2) + 16\alpha\lambda\beta s^2 t(s + t) + 32\alpha\lambda\beta s t^3 \left. \right\}
\end{aligned} \tag{3.63d}$$

$$R_3(s, t) = -2(s - t)(s + t)^2 \tag{3.63e}$$

$$R_4(s, t, u) = 2\epsilon u(s^2 - t^2) \left[\varphi_1\left(\frac{s+t}{2}, \xi\right) + \varphi_1\left(\frac{s-t}{2}, \xi\right) + \varphi_2\left(\frac{s+t}{2}, \frac{s-t}{2}, u\right) \right] \tag{3.63f}$$

Obsérvese que cuando la masa efectiva es constante, esto es cuando $\eta(\vec{r})=1$, las ecuaciones (3.61) y (3.61b) se reducen respectivamente a las ecuaciones (2.10) y (2.17) que se dedujeron anteriormente en la sección 2.1.1.1 y 2.1.2.1

En nuestros cálculos para esta parte nosotros sólo hemos considerado el modelo de confinamiento rectangular. En este caso la ecuación de onda (3.60) para el electrón libre se puede resolverse analíticamente, ya que todos los coeficientes en esta ecuación son seccionalmente constantes. En cada región (dentro y fuera del pozo cuántico) las soluciones de esta ecuación se expresan como combinación lineal de dos soluciones independientes (funciones trigonométricas en el caso de QW y funciones elípticas en el caso de QWW). Al coser estas dos soluciones en las fronteras de las dos regiones se encuentra la ecuación trascendente para la energía del electrón libre, la cual nosotros hemos resuelto numéricamente usando el método de bisección. Los Jacobianos (3.61a) y (3.61b) y el potencial efectivo de las imágenes se cálculo sobre una malla de 200 puntos y después se guardó en la memoria del computador en una forma de polinómios interpolativos usando splines cúbicos. En lo demás, el procedimiento numérico es similar al que se utilizó para el modelo con los parámetros de material no variables.

Primero para verificar la precisión de nuestro método nosotros realizamos los cálculos de las energías de enlace de las impurezas D^0 y D^- localizadas en el centro de un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de ancho 100\AA para diferentes intensidades de campo magnético y comparamos nuestros resultados con los de la Ref. [23] obtenidos a través del método Monte Carlo. Los resultados correspondientes se presentan en la Tabla 3.1. En realidad, estos cálculos de Monte Carlo son únicos que hemos podido encontrar en la literatura donde se tienen en cuenta los efectos relacionados con la variación de masa efectiva, y constante dieléctrica y no parabolicidad de banda de conducción sobre la energía de enlace de D^- .

Tabla 5. Energías de enlace de D^0 y D^- centradas en un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ de ancho 100\AA para diferentes intensidades del campo magnético. En las primeras columnas son resultados de cálculo a través del método de Monte Carlo de la Ref. [23] y en las segundas columnas están nuestros resultados.

	γ	$m_1^* = m_2^*; \epsilon_1 = \epsilon_2$		$m_1^* \neq m_2^*; \epsilon_1 \neq \epsilon_2$		$m_1^* \neq m_2^*; \epsilon_1 \neq \epsilon_2$ y con no- parabolicidad		Expt
		MC	MDF	MC	MDF	MC	MDF	
D^0	0.0	2.09	2.06	2.16	2.13	2.23	2.18
	1.0	2.92	2.89	3.00	2.94	3.13	3.02
	3.0	3.89	3.89	3.94	3.92	4.18	4.07
D^-	0.0	0.29	0.29	0.33	0.30	0.35	0.31
	1.0	0.77	0.78	0.77	0.82	0.83	0.84	0.94
	3.0	1.13	1.14	1.11	1.23	1.22	1.28	1.28

A partir de esta tabla se puede ver que hay una buena concordancia entre nuestros resultados y los cálculos Monte Carlo, teniendo además en cuenta que la franja del error de los cálculos de Monte Carlo anunciado por los autores de la Ref. [23] es $0.02Ry^*$. Como uno pudiera esperar nuestras energías de enlace para D^0 ó coinciden con los resultados de Monte Carlo ó están un poco por debajo debido a que nuestro procedimiento es en su fondo un procedimiento variacional. Esto también es la razón de porque nuestros resultados para

la energía de enlace del D^- coinciden o son superiores de los resultados de Monte Carlo. En este caso hay que recordar que la energía de enlace de un D^- se calcula como la diferencia entre las energías del electrón libre (que se encuentra exactamente) y la suma de energía de enlace de D^0 y la energía total de D^- . De manera que si se subestima la energía de enlace del D^0 , entonces se sobrestima la energía de enlace de D^- .

En las Fig.48 y 49 se presentan los resultados de cálculo de las energías de enlace de D^0 y D^- centrados en un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función del ancho del pozo para tres modelos de confinamiento: para el modelo con los parámetros de material (masa efectiva y constante dieléctrica) no variables (curvas sólidas), variables (curvas truncadas) y con los parámetro variables y banda de conducción no parabólica (curvas punteadas).

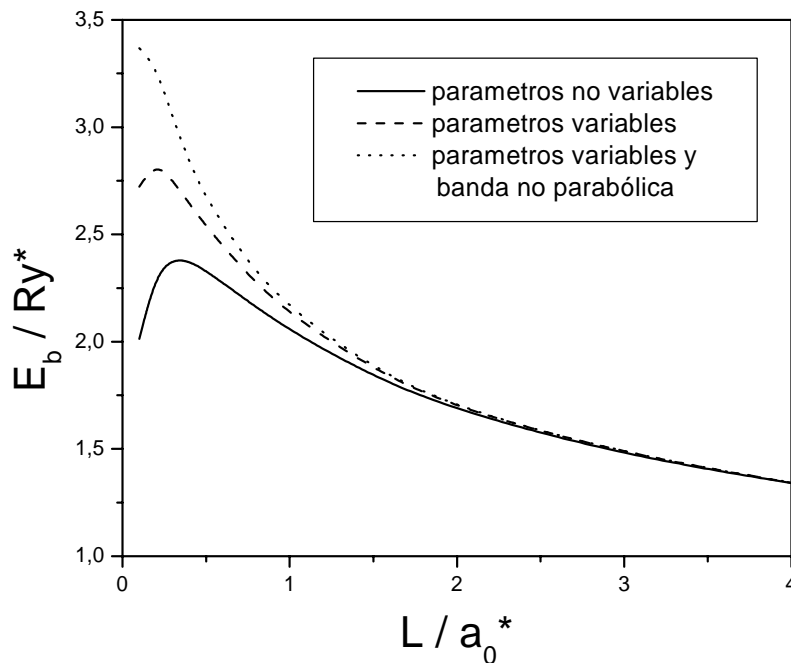


Fig. 48. Energía de enlace de un D^0 centrado en un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función del ancho, calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva truncada) y con los parámetro variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).

En estas figuras se puede ver la similitud de los cambios de las energías de enlace de D^0 y del D^- debido a los efectos de variación de los parámetros y de no-parabolicidad de la banda de conducción. En ambos casos el aumento significativo de las energías de enlace se observa cuando el ancho del pozo se hace menor que el radio de la órbita de la impureza un semiconductor en el bloque correspondiente al estado base, un radio de Bohr efectivo para D^0 y dos radio de Bohr para D^- . Aquí recordemos que la impureza D^- en un semiconductor en el bloque en el estado base tiene dos orbitas, interior (“inner”) con el radio aproximadamente igual a un radio de Bohr efectivo, y exterior (“outer”) con el radio aproximadamente igual a dos radios de Bohr efectivo. El máximo del aumento de la energía de enlace debido a los efectos mencionados en las Fig. 48 y 49 se observa para los

anchos del pozo correspondientes al momento del desbordamiento de las funciones de onda en la barrera.

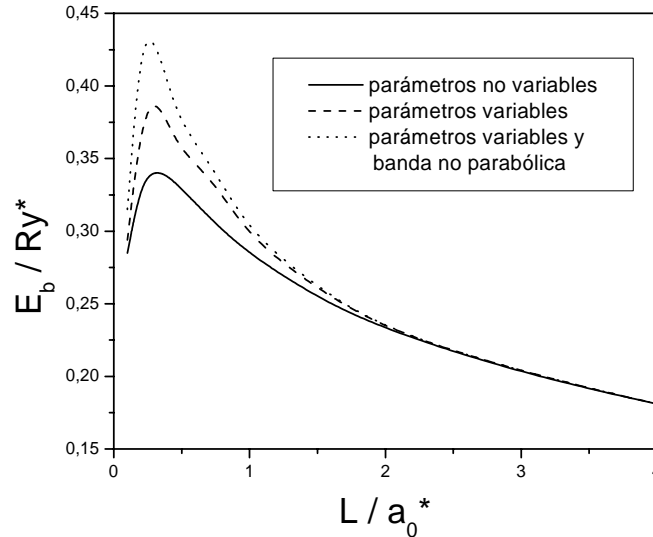


Fig. 49. Energía de enlace de un D^- centrado en un pozo de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función del ancho del pozo calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva troncada) y con los parámetro variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).

El aumento de la energía de enlace del D^0 en la Fig. 48 debido a los efectos de variación de los parámetros en el máximo es de orden de 15% y del efecto de no-parabolicidad de la banda de conducción es otro 15%. Los efectos similares sobre la energía de enlace de D^- en la figura 49 en el máximo de la curva son un poco más débiles y son aproximadamente de orden 10% ambos caso. Adicionalmente se puede ver claro en la figura 48 que la posición del máximo de la curva se desplaza hacia valores menores de ancho del pozo debido a los efectos de variación de los parámetros y de no-parabolicidad de la banda de conducción. Este resultado esta en acuerdo con lo que fue encontrado anteriormente para impurezas donadoras neutra en pozos cuánticos al analizar los efectos relacionados con la variación de masa efectiva.

En las figuras 50 y 51 se presentan lo resultados de cálculo de la energías de enlace de D^0 y D^- en un QWW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ en función de la posición de la impureza para dos diferentes radios de hilo cuántico, $0.5a_0^*$ y $0.35a_0^*$ y para tres modelos de confinamiento: para el modelo con los parámetros de material, masa efectiva y constante dieléctrica no variables (curvas sólidas), variables (curvas troncadas) y con los parámetros variables y banda de conducción no parabólica (curvas punteadas). Para una impureza donadora neutra en la figura 50 se puede ver que con el desplazamiento desde el centro, los efectos relacionados con la variación de los parámetros de material y no-parabolicidad de la banda de conducción se disminuyen rápidamente y se hacen prácticamente despreciables cuando la impureza esta ubicada en la barrera. Para las impurezas ubicadas dentro de hilo cuántico estos efectos son más significativos cuando el radio del hilo es menor.

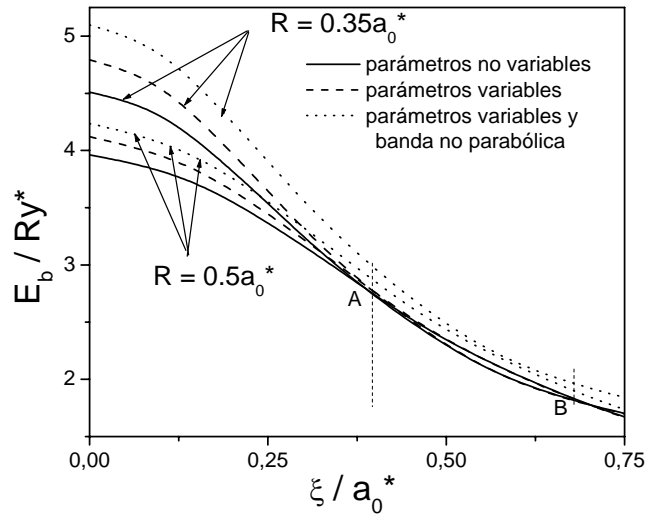


Fig. 50. Energía de enlace de un D^0 centrado en un QWW de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As en función de la posición de impureza para dos diferentes radios de hilo cuántico, $0.5a_0^*$ y $0.35a_0^*$ calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva troncada) y con los parámetros variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).

Tanto en la figura 50 como en la 51, en los puntos A y B se observan los cruces de las curvas correspondientes a las energías de enlace calculadas sin tener en cuenta los efectos de variación de los parámetros y noparabolicidad (curvas sólidas).

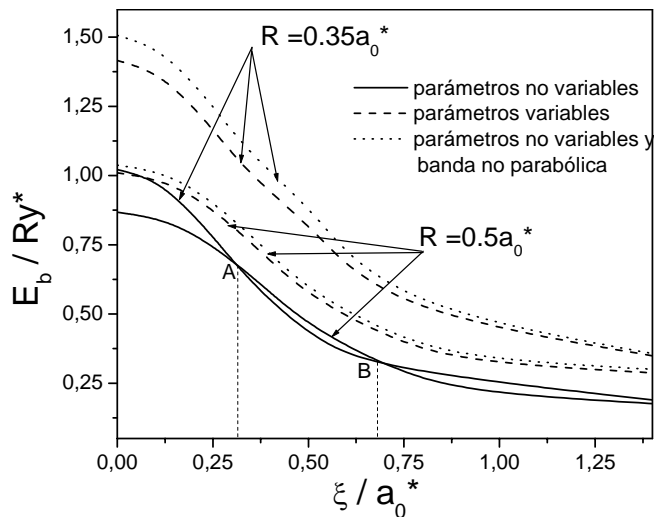


Fig. 51. Energía de enlace de un D^- centrado en un QWW de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As en función de la posición de impureza para dos diferentes radios de hilo cuántico, $0.5a_0^*$ y $0.35a_0^*$ calculada para los modelos con los parámetros de material no variables (curva sólida), variables (curva troncada) y con los parámetros variables y banda de conducción no parabólica (curva punteada).

Esta inversión está relacionada con el hecho de que cuando el desplazamiento de la impureza desde el eje de simetría de hilo es menor de $0.35a_0^*$ la impureza todavía está ubicada dentro de ambos hilos, pero al sobrepasar este valor, la impureza ya está en la

barrera del hilo con el menor radio, mientras que en el hilo con el radio $0.5a_0$ * esta dentro del pozo cuántico y por eso esta confinada más fuertemente. Cuando el desplazamiento sobrepasa el valor $0.5a_0$ * ya las impurezas están en las barreras en ambos casos y por eso los niveles energéticos se invierten por segunda vez. Además comparando las curvas en las figuras 50 y 51, uno puede ver que la influencia de los efectos de variación de parámetros y de no-parabolicidad en QWW sobre las impurezas D^- es mucho mas fuerte que sobre las impurezas D^0 , si el máximo aumento de la energía de enlace en el primer caso es de orden 50%, en el segundo caso es de orden 25%.

3.4 ESTADOS EXCITADOS DE IMPUREZAS D^0 Y D^- EN DIFERENTES HETEROJUNTURAS SEMICONDUCTORAS

En esta parte de la tesis extendemos el método de Dimensión Fractal para analizar los estados excitados de impurezas D^0 y D^- confinadas en heterojunturas semiconductoras, y para definir la dimensión fractal para estos estados como función del tamaño de la heterojuntura y la posición de la impureza.

El análisis de los estados excitados de impurezas en heterojunturas semiconductoras es más complicado que para el caso del estado base, debido a varios factores. Primero, no es fácil clasificar los niveles energéticos tal como se hace en la teoría atómica, debido a que la presencia del potencial de confinamiento rompe parcial o completamente la simetría del espacio. Segundo, debido a la condición subsidiaria de que las funciones de ondas de estos estados deben ser ortogonales con las funciones de ondas de los estado más bajos es mucho más difícil escoger las funciones de prueba para diferentes estados de tal manera que sean automáticamente ortogonales, lo cual es fácil cuando existe algún tipo de simetrías. Finalmente, los diferentes tipos de interacciones en presencia de los potenciales de confinamiento hacen que los estados uni-particulares se mezclen, y como consecuencia de esto, en cualquier cálculo riguroso uno debe considerar como funciones de base todos los estados uni-particulares lo cual implica cálculos tediosos.

Para evitar estas complicaciones y desarrollar el cálculo de algunos estados excitados, proponemos hacer las siguientes consideraciones: Como nuestro objetivo principal es encontrar procedimientos sencillos, no tendremos en cuenta la mezcla de estado uni-particulares, ya que para ello tendríamos que usar el conocido método de diagonalización exacta, el cual es algo tedioso y hasta ahora sólo ha sido desarrollado para un modelo de potencial parabólico con barrera infinita. De esta manera, tendremos dos opciones para considerar el problema de estados excitados en una forma sencilla. La primera opción consiste en utilizar las simetrías parciales que quedan a pesar de la presencia del confinamiento y con base en ellas, tratar de construir el Método de Dimensión Fractal en una forma más o menos rigurosa. Este es el caso, por ejemplo, de una impureza en un pozo

cuántico (o doble pozo o SL), problema en el cual el operador \hat{L}_z conmuta con el Hamiltoniano y por eso el número cuántico magnético es un buen número cuántico para clasificar algunos estados excitados. En la sección 3.4.1 hacemos uso de esta primera opción, y presentamos la extensión del método de Dimensión Fractal para calcular algunos niveles energéticos de impurezas D^0 ubicadas en cualquier lugar dentro de un QW y centradas en un QWW cilíndrico y también se analiza el efecto del cambio de la dimensión para los estados excitados al desplazar las impurezas desde el centro del pozo.

Como segunda opción tenemos que, en aquellas heterojunturas en las que no existe ningún tipo de simetrías clasificaremos los niveles energéticos solo aproximadamente en el marco del método variacional. Las funciones de onda de estos estados no son exactamente funciones propias del Hamiltoniano sino sólo una aproximación que tenga una de las simetrías similares a los átomos hidrogenoides, y para ellos se utilizan denotaciones como por ejemplo “2p-like” y “3d-like”. Para este caso, entre todas las posibles funciones de prueba con una simetría particular, buscaremos funciones del tipo $r\Phi(r)Y_{m,l}(\vartheta, \varphi)$, siendo $\Phi(r)$ una función que minimiza la energía variacional. Este tipo de cálculos para impurezas descentradas en QDs se presentan en el párrafo 3.4.2.

Para el caso del D^- , el problema es más complicado pero afortunadamente existen casos en los cuales la condición de ortogonalidad se satisface automáticamente, si la forma de la función de prueba se toma de acuerdo con el carácter del estado a calcular. De manera que siguiendo un procedimiento similar y teniendo en cuenta las mismas consideraciones que en la sección 3.4.1, algunos estados excitados de una impureza D^- descentrada en un QW y centrada en QWW cilíndrico pueden ser clasificados y bien definidos. En la sección 3.4.3 extendemos el método de dimensión fractal para estos casos.

3.4.1 Cálculo de estados excitados de un D^0 en heterojunturas semiconductoras con simetría axial. De manera similar a como se hizo en la sección 2.1.1, aquí también consideremos el problemas de una impureza D^0 ubicadas en una posición $\vec{\xi}$, dentro de un QW y centrada en un QWW de GaAs-(Ga,Al)As. Tal como ya se explico en las secciones 2.1.1, para aplicar el método de Dimensión Fractal primero debemos encontrar las energía del electrón libre y luego las de la impureza donadora neutra. El procedimiento de cálculo es similar al descrito para el estado base, con la diferencia de que ahora etiquetamos las funciones de onda con el número cuántico del estado a calcular. Por tanto a continuación sólo describiremos brevemente como resolvemos cada problema en cada una de las heteroestructuras que consideraremos.

Debido a la simetría cilíndrica del potencial de confinamiento, el operador \hat{L}_z , conmuta con el Hamiltoniano para este problema, de manera que podemos asignar a los estados propios de este Hamiltoniano, el número cuántico magnético m (valores propios del operador \hat{L}_z) y así las funciones de onda para un electrón dentro de una heterojuntura semiconductor con simetría axial y potencial de confinamiento separable, $V(\vec{r}) = V_z(z) + V_\rho(\rho)$ pueden representarse en la forma:

$$f_m(\vec{r}) = f_z(z)R_m(\rho)\exp(im\varphi) \quad (3.64)$$

donde la función $f_z(z)$ correspondiente a la más baja energía E_z es solución de la siguiente ecuación diferencial:

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial z^2} + V_z(z)\right]f_z(z) = E_z f_z(z) \quad (3.65)$$

y la función $R_m(\rho)$ satisface la ecuación

$$-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{dR_m(\rho)}{d\rho} + \left(V_\rho(\rho) + \frac{m^2}{\rho^2}\right)R_m(\rho) = E_\rho^{(m)} R_m(\rho); \quad E_m = E_\rho^{(m)} + E_z \quad (3.66)$$

cuya solución puede obtenerse en forma analítica en los casos de modelos con un potencial rectangular o parabólico, y numéricamente usando el método de barrido trigonométrico en otros casos. En el caso particular de un QW, $R_m(\rho) = \rho^m$ y por tanto $E_\rho^{(m)} = 0$, y en el caso de QWW, $f_z(z) = 1$ y $E_z = 0$.

Como función de prueba para los niveles correspondiente a una impureza D^0 confinada en una heterojuntura semiconductor con simetría axial, proponemos la siguiente función tipo Bastard:

$$\Psi_m(\vec{r}) = f_m(\vec{r} + \vec{\xi})\Phi_m(r) \quad (3.67)$$

donde la función $f_m(\vec{r})$ es la función de onda del electrón libre en el estado m , la cual está dada en (3.64), y $\Phi_m(r)$, es una función envolvente que sólo depende de la distancia entre el electrón y el ión y describe el cambio del estado m del electrón libre debido a la interacción con el ión.

Transfiriendo el origen de coordenadas a la posición del ión y usando el principio variacional de Schrödinger, con esta función de prueba, podemos escribir la ecuación de Schrödinger para el D^0 descentrado, como un problema variacional para el siguiente funcional:

$$F[\Phi_m] = \int_0^\infty J_m(r) \left\{ \left[\frac{d\Phi_m(r)}{dr} \right]^2 - \frac{2}{r} \Phi_m^2(r) + [E_m - E_m(D^0)] \Phi_m^2(r) \right\} dr \rightarrow \min \quad (3.68)$$

donde E_m es la energía del estado base del electrón libre, la cual está determinada por la ecuación (3.66), y el Jacobiano $J_m(r)$, está dado por la siguiente expresión:

$$J_m(r) = 4\pi r^2 P_m(r); \quad P_m(r) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin\theta d\theta f_m^2(r \cos\theta + \xi_z) \quad (3.69)$$

Calculando la derivada funcional en la ecuación (3.68), obtenemos la siguiente ecuación unidimensional de Euler-Lagrange para la función $\Phi_m(r)$:

$$-\frac{1}{J_m(r)} \frac{d}{dr} \left[J_m(r) \frac{d}{dr} \Phi_m(r) \right] - \frac{2}{r} \Phi_m(r) = [E_m(D^0) - E_m] \Phi_m(r) \quad (3.70)$$

Siguiendo un procedimiento similar al hecho en la sección 2.1.3.1, finalmente llegamos a la siguiente ecuación para la dimensión fractal para estados excitados:

$$D^*(r) = 1 + \frac{d \ln J_m(r)}{dr} = 3 + \frac{d \ln P_m(r)}{dr} \quad (3.71)$$

usando las relaciones (3.69) y (3.71) podemos analizar el comportamiento asintótico de la dimensión fractal de una donadora en un pozo cuántico, para pequeñas y grandes separaciones entre el electrón y el ión. Cuando $r \rightarrow 0$, $P_m \rightarrow f_z^2(\xi) r^{2|m|}$ y por consiguiente D^* en la vecindad del ión en el estado m es igual a $D^*(r) \rightarrow 3 + 2|m|$. En el otro límite cuando $r \rightarrow \infty$, $P_m \rightarrow r^{2|m|-1}$ y por lo tanto, $D^*(r) \rightarrow 2 + 2|m|$. De esta manera, la dimensión fractal decrece monótonamente de $3 + 2|m|$ a $2 + 2|m|$, lo cual es un isomorfismo para el número cuántico magnético m , un aumento de uno en m produce un incremento de dos en la dimensión fractal. Este resultado es conocido en la teoría dimensional Scaling para números enteros de la dimensión D como isomorfismo del momento angular [129].

En la siguiente figura presentamos los resultados del cálculo de la dimensión fractal $D^*(r)$ para los estados 1s y 2p de un D^0 en un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ con diferentes anchos y con un modelo de potencial rectangular. La función de onda para el electrón libre para este modelo se conoce en forma analítica, por consiguiente el Jacobiano (3.69) y la dimensión fractal (3.71) se pueden calcular directamente.

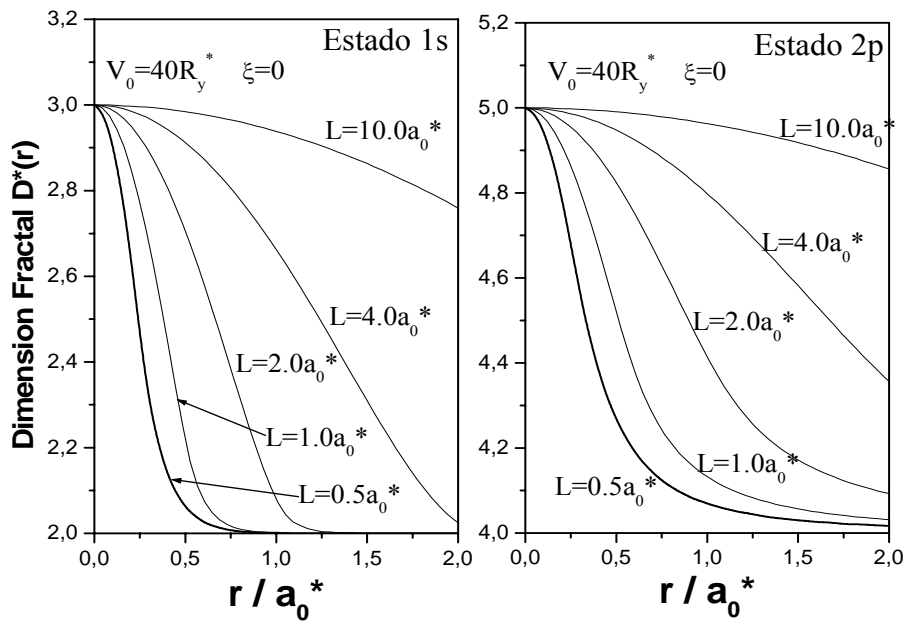


Fig.52. Dimensión fractal como función de la separación electrón-ion para los estados 1s y 2p de una impureza D^0 centrada en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QW con diferentes anchos.

En esta figura se puede ver que para todos los casos, la dimensión $D^*(r)$ decrece monótonamente de 3 a 2 para el estado 1s y de 5 a 4 para el estado 2p, con la particularidad de que entre mayor es el ancho del pozo, $D^*(r)$ decrece más suavemente. Como habíamos dicho anteriormente, la dimensión fractal esta relacionada con la distribución de la densidad electrónica en el QW, de manera que analizando con más detalle la distribución en este caso, uno puede dar una interpretación al comportamiento de $D^*(r)$. Para pequeñas separaciones entre el electrón y el ion, la interacción Coulombiana es dominante y la influencia del confinamiento es insignificante, y como consecuencia la distribución de carga en la vecindad de ion, en este caso es similar a la de un átomo hidrogenoide, es decir, la distribución de carga dentro de una esfera de radio R crece proporcional a R^3 para el estado 1s y como R^5 para el estado 2p tal como debe ser para un objeto fractal de tres y cinco dimensiones respectivamente. Con el incremento de la separación electrón-ión, la influencia del confinamiento crece y cuando la interacción Coulombiana llega a ser insignificante, la distribución de carga es similar a la de un electrón libre en el QW. Por consiguiente para grandes separaciones electrón-ión cuando el radio de la esfera llega a ser considerablemente más grande que el ancho del pozo, la carga dentro de esta esfera crece como $\sim R^2$ para el estado 1s y como $\sim R^4$ para el estado 2p tal como sería para un objeto fractal de dos y cuatro dimensiones respectivamente.

Resultados similares para diferentes posiciones de la donadora en un QW de ancho $1a_0^*$ ($\cong 100 \text{ \AA}$) se muestran en la figura 53, donde se puede ver que el comportamiento $D^*(r)$ cambia esencialmente cuando el ión se desplaza del centro hacia la barrera. Se ve que curvas monótonamente decreciente se transforman subsecuentemente en curvas que inicialmente crecen, luego pasan por un valor máximo mayor que 3 y sólo después de este pico decrece monótonamente a 2. Entre mayor es el desplazamiento desde el centro del QW, mayor es el valor máximo de la dimensión fractal. La razón del incremento de la región fractal en la parte inicial de las curvas, es que, debido al fuerte confinamiento a lo largo del eje de crecimiento del pozo, el electrón tiende a estar localizado en el centro del QW. Cuando el ión está localizado cerca de la barrera la distribución de carga para el estado 1s llega a ser similar a la distribución para el estado $2p_z$, por lo tanto la carga dentro de la esfera de radio R crece como $\sim R^5$ similarmente al estado 2p. De esta forma, la distribución de la densidad de carga y la dimensión fractal experimentan transformaciones como si el número cuántico magnético estuviera creciendo.

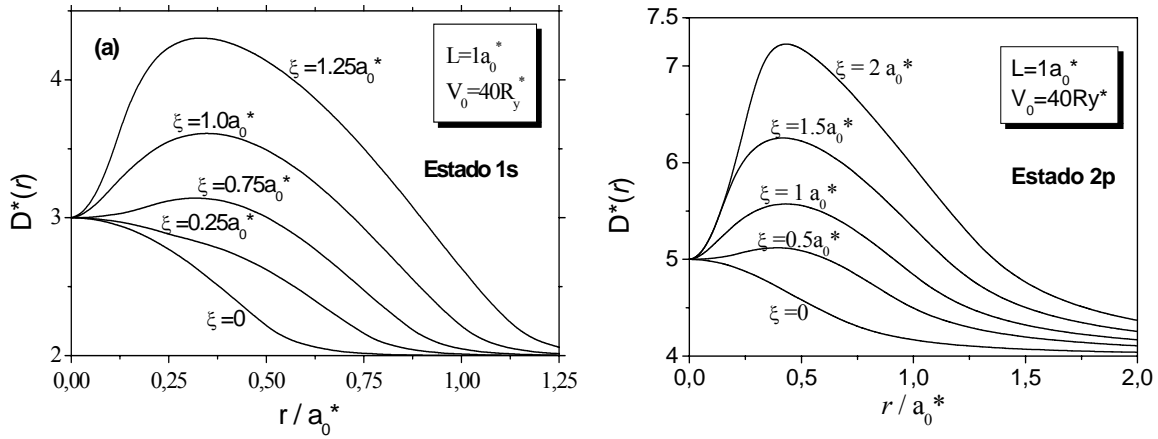


Fig. 53. Dimensión fractal como función de la separación electrón-ion para los estados (a) 1s y (b) 2p de una impureza D^0 descentrada en un pozo cuántico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ QW y para diferentes posiciones del ion.

En la figura 53 presentamos los resultados de cálculo de la energía de enlace del estado base y primer estado excitado para un D^0 en un QW de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$ como función de la posición del ion.

La precisión de nuestro resultado (líneas sólidas) para la energía de enlace del D^0 la chequeamos comparando con resultados obtenidos usando el método Monte Carlo [23], y encontramos que la diferencia es del orden del 1%. En la figura 54 adicionalmente presentamos la energía de enlace para los estados 1s y 2p (líneas truncadas) calculada usando la aproximación $E_b = 4/(\bar{D}-1)^2$ donde \bar{D} es el valor medio de la dimensión fractal, calculada a partir de los resultados presentados en la figura 1, usando la ecuación (2.25) descrita en la sección 2.1.3.1. Encontramos una fórmula de interpolación para el valor medio de la dimensión fractal \bar{D} , como una función de la posición de la donadora ξ , para el estado 1s llegamos a $\bar{D} = 2.4 + 0.8\xi$ y a $\bar{D} = 4.1 + 0.6\xi$ para el estado 2p. Se ve una buena concordancia entre los resultados del cálculo por medio del método de dimensión fractal (líneas continuas) y los obtenidos a través de la fórmula de interpolación (líneas truncadas).

Para el caso de un hilo cuántico consideramos una impureza donadora D^0 centrada en un hilo cuántico cilíndrico de $GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As$, con un modelo de potencial rectangular y un

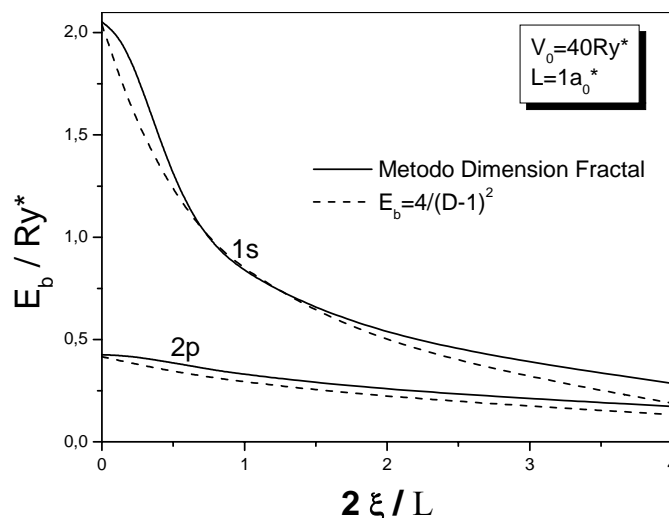


Fig. 54. Energía de enlace como función de la distancia de la posición del ion hasta el centro de un QW de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As QW (a) para el estado 1s y (b) para el estado 2p.

potencial escalón que da lugar a un hilo coaxial (en la sección 3.1.2.1 ya analizamos la energía de enlace del estado base para estos modelos). En la figura 55 presentamos los resultados de la energía de enlace para el estado 2p donde se puede ver que hay una buena concordancia entre nuestros resultados con un modelo de potencia rectangular y aquellos presentados en la referencia [89]. También se puede ver la ausencia del segundo pico en las curvas para la energía de enlace del estado 2p en el caso de un QWW coaxial, lo cual si se observa en el caso del estado base en la figura 18. Obsérvese que el confinamiento adicional de las orbitas del estado 2p llevan a un aumento de la energía de enlace en el estado 2p_z, y a un disminución de la energía de enlace en el estado 2p_x.

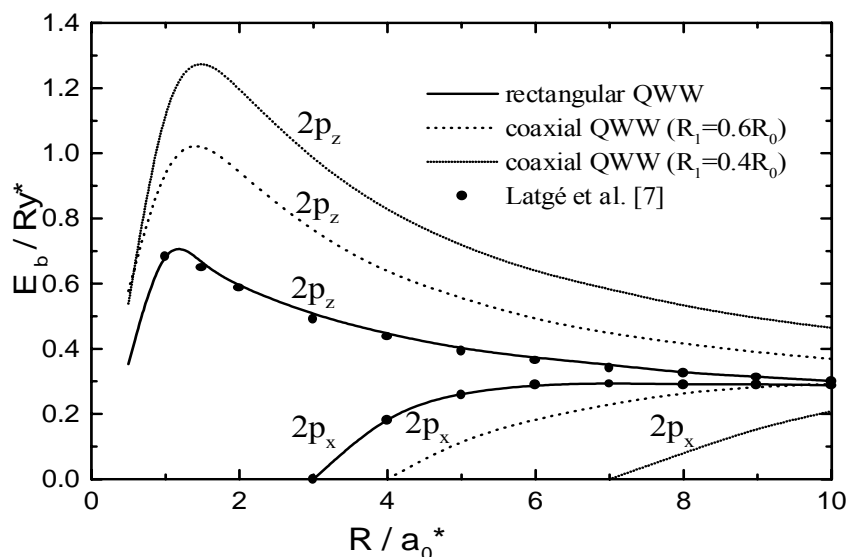


Fig. 55. Energía de enlace para el estado 2p de un D⁰ centrado en un QWW en función del radio de este, para dos modelos de potencial: potencial rectangular (líneas sólidas) y doble escalón (líneas punteadas).

3.4.2 Cálculo de estados excitados de un D^0 en un punto cuántico esférico. Para el caso de una heterojuntura con simetría esférica, el potencial de confinamiento sólo depende de la distancia al centro, es decir que $V(\vec{r}) \equiv V(r)$. Por tanto, para calcular los estados excitados de una impureza D^0 ubicada en la posición $\vec{\xi}$ dentro de un punto cuántico esférico, consideremos como función de prueba la siguiente función tipo Bastard:

$$\Psi_{D^0}^{lm}(\vec{r}) = f_0(\vec{r} + \vec{\xi}) \Phi_{D^0}^{lm}(r) r^l Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \quad (3.72)$$

donde $f_0(\vec{r})$ es la función de onda para el estado base del electrón en el SQD, $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = P_{lm}(\cos \vartheta) e^{im\varphi}$ son armónicos esféricos y P_{lm} son polinomios de Legendre, y $\Phi_{D^0}^{lm}$ es una función envolvente que depende sólo de la separación electrón-ión. Esta función de prueba llega a ser exacta cuando el radio del SQD y la distancia del ión a la barrera son grandes.

Siguiendo un procedimiento similar al descrito anteriormente para heterojunturas con simetría axial, finalmente llegamos a que el Jacobiano en este caso esta dado por:

$$J_{lm}(r) = 4\pi r^{2+2l} \wp_{lm}(r); \quad \wp_{lm}(r) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 f_0^2(\sqrt{r^2 + \zeta^2 - 2r\zeta x}) P_{lm}^2(x) dx \quad (3.73)$$

donde $\wp_{lm}(r)$ es el armónico esférico del valor promedio de la densidad de carga dentro de una esfera con centro en la localización del ión.

En este caso encontramos que la relación entre la dimensión fractal y el Jacobiano esta dada por la expresión:

$$D_{lm}^*(r) = 1 + r \frac{d \ln J_{lm}(r)}{dr} = 3 + 2l + r \frac{d \ln P_{lm}(r)}{dr} \quad (3.74)$$

expresión que se simplifica cuando consideramos la impureza ubicada en el centro del punto ($\xi = 0$), ya que en este caso tenemos:

$$J_{lm}(r) = 4\pi r^{2+2l} f_0^2(r); \quad D_{lm}^*(r) = 3 + 2l + 2r \frac{d \ln f_0(r)}{dr} = D_{00}^*(r) + 2l \quad (3.74a)$$

de donde podemos concluir que la dimensión fractal de los estados con diferente momento angular de una donadora centrada en un SQD, son las misma del estado base incrementadas en $2l$. Este resultado clave esta en concordancia con el bien conocido isomorfismo de la teoría Dimensional Scaling para el momento angular, el cual establece que si $l \rightarrow l+1$ equivale a $D \rightarrow D+2$ [129]. Este isomorfismo desaparece cuando la donadora esta descentrada debido a que cambia la simetría del sistema.

En la figura 56 presentamos los resultados para la dimensión fractal de algunos estado excitados y para el estado base en diferentes posiciones de la impureza, para el caso de un modelo de SQD con un potencial rectangular de altura infinita. En esta figura se puede ver que el comportamiento de las curvas es similar al comportamiento en el caso de simetría axial.

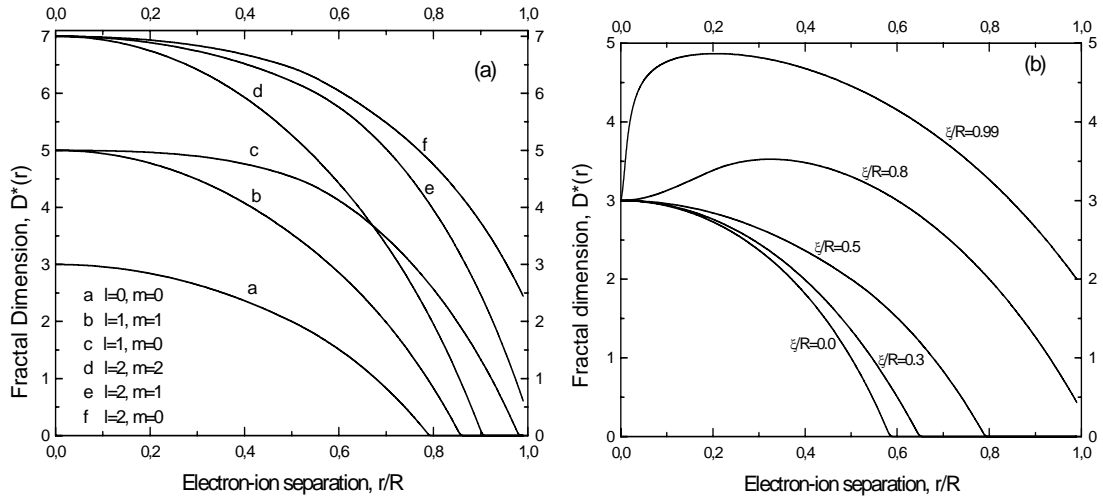


Fig. 56. Dimensión Fractal como función de la separación electrón-ion en un QD con barrera infinita: (a) Para el estado base y algunos estados excitados de un D^0 ubicado en la posición $\xi = 0.5R$ y (b) para el estado base en diferentes posiciones

3.4.3 Cálculo de estados excitados de un D^- en diferentes heterojunturas semiconductoras. Para estimar la energía de enlace de los estados 2^1P y 2^3P con $m=\pm 1$ para un D^- en una heterojuntura semiconductor usaremos la función de prueba utilizada por Breit-Eckart para analizar estos estados para el átomo de He en el bloque:

$$\begin{aligned} \psi_{1s2p}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= [f_{1s}(\vec{r}_1)f_{2p}(\vec{r}_2) \pm f_{1s}(\vec{r}_2)f_{2p}(\vec{r}_1)]K(\cos\Theta) \\ &= [e^{-\alpha r_1}e^{-\beta r_2}r_2P_{1,m}(\cos\vartheta_2)e^{im\varphi_2} \pm e^{-\alpha r_2}e^{-\beta r_1}r_1P_{1,m}(\cos\vartheta_1)e^{im\varphi_1}]K(\cos\Theta) \end{aligned} \quad (3.75)$$

donde α , y β son parámetros variacionales $K(\cos\Theta)=1+\eta\cos\Theta$ siendo η otro parámetro variacional, es la función de correlación que depende solo del ángulo entre los vectores \vec{r}_1 y \vec{r}_2 pues los electrones ya están en diferentes órbitas y $r_i, \vartheta_i, \varphi_i$, $i=1,2$ son coordenadas esféricas. Los estados con diferentes $m=0, \pm 1$ en ausencia de campo magnético son degenerados, pero en presencia de campo magnético el estado de menor energía es el estado con $m=-1$, por eso éste será el estado que vamos a analizar.

Para el caso de una heterojuntura, el potencial de confinamiento es muy importante así que tendremos en cuenta esto introduciendo un factor de confinamiento en la función de onda, de manera que escogeremos la función de prueba para el D^- como:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = f_0(\vec{r}_1)f_0(\vec{r}_2)\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2); \quad (3.76)$$

siendo

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (r_1e^{-\alpha r_1}e^{-\beta r_2}\sin\vartheta_1e^{-i\varphi_1} \pm r_2e^{-\alpha r_2}e^{-\beta r_1}\sin\vartheta_2e^{-i\varphi_2})(1+\eta\cos\Theta) \quad (3.77)$$

donde el factor $1+\eta\cos\Theta$ toma en cuenta el efecto de la correlación entre los electrones dentro de la heterojuntura producido por la interacción Coulombiana. El símbolo + en esta ecuación corresponde al estado singlete y el signo - corresponde a el estado triplete. El

ángulo entre los vectores \vec{r}_1 y \vec{r}_2 esta relacionado con las coordenadas esféricas por medio de la relación:

$$\cos \Theta = \cos \vartheta_1 \cos \vartheta_2 + \sin \vartheta_1 \sin \vartheta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \quad (3.78)$$

La ecuación de onda para la función de prueba (3.76) con el Hamiltoniano para este problema puede ser escrita como:

$$F[\Phi] = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 f_0^2(\vec{r}_1) f_0^2(\vec{r}_2) \left\{ |\nabla_1 \Phi|^2 + |\nabla_2 \Phi|^2 - i\gamma \Phi^* \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_2} \right) + (U + 2E_0 - E) |\Phi|^2 \right\} \rightarrow \min \quad (3.79)$$

y la energía variacional que satisface este principio variacional, puede ser encontrada a partir de la relación:

$$E(\alpha, \beta, \eta) = 2E_0 + \frac{I_1(\alpha, \beta)}{I_0(\alpha, \beta)} \rightarrow \min;$$

$$I_1(\alpha, \beta, \eta) = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 f_0^2(\vec{r}_1) f_0^2(\vec{r}_2) \{ T(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) + W(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) \}; \quad (3.80)$$

$$T(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) = |\nabla_1 \Phi|^2 + |\nabla_2 \Phi|^2 - i\gamma \Phi^* \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_2} \right); \quad W(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) = U |\Phi|^2$$

$$I_0(\alpha, \beta, \eta) = \int d\vec{r}_1 \int d\vec{r}_2 f_0^2(\vec{r}_1) f_0^2(\vec{r}_2) N(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi); \quad N(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) = |\Phi|^2$$

Como se puede ver estas integrales son de alto orden, de manera que es difícil hacer un cálculo directo con alta precisión. Sin embargo, nuestro método de Dimensión Fractal nos permite simplificar estos cálculos en forma similar a como lo hicimos para el caso de una donadora neutra. Esta simplificación la logramos reemplazando el valor exacto de las expresiones $f_0^2(\vec{r}_1)$ y $f_0^2(\vec{r}_2)$ por su valor promedio sobre todos los valores de los ángulos, y el producto de este valor promedio con r^2 nosotros lo denotamos como $J(r_1)$ y $J(r_2)$ y lo llamamos Jacobiano de un espacio con dimensión fractal:

$$J(r) = r^2 P(r); \quad P(r) = \int_{|\vec{r}=r} f_0^2(\vec{r}) d\Omega = r^2 \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \vartheta f_0^2(r, \vartheta, \varphi) d\vartheta \quad (3.81)$$

Además tomando en cuenta que los términos, tanto de la energía cinética como de la energía potencial solamente dependen de la diferencia entre los ángulos azimutales $\varphi_1 - \varphi_2$, el orden de las integrales se puede reducir de 6 a 5. En adelante usaremos φ para denotar la diferencia $\varphi_1 - \varphi_2$ y asumimos que esta variable tiene los límites de integración $0 < \varphi < 2\pi$. En este caso la expresión explícita para la energía variacional (3.80) toma la forma:

$$I_0(\alpha, \beta, \eta) = \int_0^\infty P(r_1) r_1^2 dr_1 \int_0^\infty P(r_2) r_2^2 dr_2 \int_0^\pi \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 \int_0^\pi \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 \int_0^{2\pi} N(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) d\varphi$$

$$I_1(\alpha, \beta, \eta) = \int_0^\infty P(r_1) r_1^2 dr_1 \int_0^\infty P(r_2) r_2^2 dr_2 \int_0^\pi \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 \int_0^\pi \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 \int_0^{2\pi} [T(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) + W(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi)] d\varphi \quad (3.82)$$

Integrando sobre todos los ángulos estas ecuaciones se reducen a la forma:

$$I_0(\alpha, \beta, \eta) = \int_0^\infty J(r_1) dr_1 \int_0^\infty J(r_2) \bar{N}(r_1, r_2) dr_2; \quad (3.83)$$

$$I_1(\alpha, \beta, \eta) = \int_0^\infty J(r_1) dr_1 \int_0^\infty J(r_2) [\bar{T}(r_1, r_2) + \bar{W}(r_1, r_2)] dr_2$$

donde

$$\bar{N}(r_1, r_2) = \int_0^\pi \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 \int_0^\pi \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 \int_0^{2\pi} N(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) d\varphi \quad (3.83a)$$

$$\bar{T}(r_1, r_2) = \int_0^\pi \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 \int_0^\pi \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 \int_0^{2\pi} T(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) d\varphi \quad (3.83b)$$

$$\bar{W}(r_1, r_2) = \int_0^\pi \sin \vartheta_1 d\vartheta_1 \int_0^\pi \sin \vartheta_2 d\vartheta_2 \int_0^{2\pi} W(r_1, r_2, \vartheta_1, \vartheta_2, \varphi) d\varphi \quad (3.83c)$$

Después hacer unas transformaciones largas (por eso no lo presentamos aquí) pero sencillas finalmente llegamos a la siguiente expresión para la energía variacional ($r_< = \min(r_1, r_2)$ y $r_> = \max(r_1, r_2)$):

$$E(\alpha, \beta, \eta) = 2E_0 - \gamma + \frac{\int_0^\infty P(r_1) dr_1 \int_0^\infty P(r_2) R_1(r_1, r_2, \alpha, \beta) dr_2}{\int_0^\infty P(r_1) dr_1 \int_0^\infty P(r_2) R_0(r_1, r_2, \alpha, \beta) dr_2}; \quad (3.84)$$

$$R_0(r_1, r_2, \alpha, \beta, \eta) = \frac{r_1^2 r_2^2}{3} \left[(3 + \eta^2) r_1^2 e^{-2\alpha r_1} e^{-2\beta r_2} + (3 + \eta^2) r_2^2 e^{-2\alpha r_2} e^{-2\beta r_1} \pm 4\eta r_1 r_2 e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)} \right]$$

$$R_1(r_1, r_2, \alpha, \beta, \eta) = \bar{T} + W_1 + W_2;$$

$$\bar{T}(r_1, r_2) = \bar{T}_r(r_1, r_2) + \bar{T}_g(r_1, r_2) + \bar{T}_\varphi(r_1, r_2) \quad (3.84a)$$

$$\bar{T}_r(r_1, r_2) = r_1^2 r_2^2 \left\{ e^{-2\alpha r_1} e^{-2\beta r_2} \left[(1 - \alpha r_1)^2 + \beta^2 r_1^2 \right] \left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right) + e^{-2\beta r_1} e^{-2\alpha r_2} \left[(1 - \alpha r_2)^2 + \beta^2 r_2^2 \right] \left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right) \mp \frac{8\eta}{3} e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)} \left[\beta(r_2 + r_1) - 2\alpha \beta r_1 r_2 \right] \right\} \quad (3.84b)$$

$$\bar{T}_g(r_1, r_2) = \left\{ \frac{1}{2} (1 + \eta^2) (e^{-2\alpha r_2 - 2\beta r_1} + e^{-2\alpha r_1 - 2\beta r_2}) + \frac{4\eta^2}{15} (r_1^4 e^{-2\alpha r_1 - 2\beta r_2} + r_2^4 e^{-2\alpha r_2 - 2\beta r_1}) \pm \frac{\pi\eta}{3} e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)} r_1 r_2 (r_1^2 + r_2^2) \right\} \quad (3.84c)$$

$$\begin{aligned} \bar{T}_\varphi(r_1, r_2) = & \left\{ e^{-2\alpha r_1 - 2\beta r_2} \left[\left(\frac{3}{2} + \frac{5}{6} \eta^2 \right) r_1^2 r_2^2 + \frac{2}{5} \eta^2 r_1^4 \right] + \right. \\ & \left. \left[\left(\frac{3}{2} + \frac{5}{6} \eta^2 \right) r_1^2 r_2^2 + \frac{2}{5} \eta^2 r_2^4 \right] e^{-2\alpha r_2 - 2\beta r_1} \pm \eta e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)} r_1 r_2 (r_1^2 + r_2^2) \right\} \end{aligned} \quad (3.84d)$$

$$\begin{aligned} W_1 = & -2(r_1 + r_2) r_1 r_2 \left[\left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right) r_1^2 e^{-2\alpha r_1} e^{-2\beta r_2} + \right. \\ & \left. \left(1 + \frac{\eta^2}{3} \right) r_2^2 e^{-2\alpha r_2} e^{-2\beta r_1} \pm \frac{4}{3} \eta r_1 r_2 e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)} \right]; \end{aligned} \quad (3.84e)$$

$$\begin{aligned} W_2 = & 2r_1 r_2 (r_1^2 e^{-2\alpha r_1 - 2\beta r_2} + r_2^2 e^{-2\alpha r_2 - 2\beta r_1}) * \left\{ \left[1 + 2\eta \frac{r_1^2 + r_2^2}{2r_1 r_2} + \eta^2 \left(\frac{r_1^2 + r_2^2}{2r_1 r_2} \right)^2 \right] r_< - \right. \\ & - \left[\frac{\eta}{r_1 r_2} + \frac{\eta^2 (r_1^2 + r_2^2)}{2r_1^2 r_2^2} \right] \frac{r_<^3 + 3r_1 r_2 r_<}{3} + \frac{\eta^2}{4r_1^2 r_2^2} \frac{r_<^5 + 10r_1^2 r_2^2 r_< + 5r_1 r_2 r_>^3}{5} \left. \right\} \pm \\ & \pm 2r_1 r_2 e^{-(\alpha+\beta)(r_1+r_2)} \left\{ r_<^3 + \frac{\eta}{r_1 r_2} \left(2r_1^2 r_1^2 r_< + \frac{4}{5} r_<^5 \right) + \frac{\eta^2}{r_1^2 r_2^2} \left(\frac{3r_1^2 r_1^2}{5} r_<^3 + \frac{6}{35} r_<^7 \right) \right\} \end{aligned} \quad (3.84f)$$

CONCLUSIONES

En este trabajo de investigación hemos desarrollado un nuevo y simple método para analizar el espectro electrónico de sistemas de una y dos partículas confinadas en heterojunturas semiconductoras. Este método lo usamos para calcular las energías de enlace de impurezas D^0 y D^- , centradas y descentrada en QWs, QWWs y QDs, sin y con un campo magnético aplicado. La precisión de nuestro procedimiento se verificó comparando nuestros resultados con unos similares obtenidos utilizando métodos diferentes como el método variacional y Monte Carlo.

En este método de dimensión fractal, el problema de calcular el espectro electrónico del D^0 y del D^- en una heterojuntura semiconductor, se reduce a un problema similar para átomos hidrogenoides y para un átomo de helio respectivamente, pero en un espacio efectivo con una dimensión fraccionaria variable. Esta dimensión depende de la separación r , entre las partículas y viene dada por la densidad de probabilidad de encontrar a las partículas separadas una distancia r . Nuestro resultado principal es una expresión analítica para la dimensión fractal de la donadora en este espacio efectivo, como función de la separación electrón ión obtenida usando la definición de Mandelbrot.

Una de las características atractivas de nuestro método es su universalidad y la simplicidad de su aplicación para diferentes modelos de confinamiento enmarcados en el mismo procedimiento numérico. Esto nos permite evitar tediosos cálculos, para obtener con alta precisión la energía de enlace en cualquier heterojuntura, una vez que la densidad de probabilidad del electrón libre es conocida.

En conclusión, consideramos que usando nuestro procedimiento variacional, cualquier problema de un sistema de pocas partículas confinado en una heterojuntura semiconductoras, puede reducirse a un problema similar en un espacio efectivo con dimensión fraccionaria variable. De esta manera este método puede ser aplicado para analizar las propiedades de cualquier sistema ligado (Donadoras neutras y negativamente cargadas, aceptoras, excitones, biexcitones, triones, etc.), en diferentes tipos de heterojunturas tales como, SLs, QWs, QWWs, QDs, anillos (QRs), etc. En presencia de cualquier perturbación externa.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] DINGLE, R. Advances in solid state physics: Festkoper probleme, edited by H. J. Queisser (pergamos/Vieweg, Braunschweig, 1975), **5**, p. 21.
- [2] PANTELIDES, T. The electronic structure of impurities and other point defects in semiconductors. Reviews of Modern Physics. **50**, (1978); p. 797.
- [3] ANDO; et al. Electronic properties of two-dimensional systems. Reviews of Modern Physics. **54**, (1982); p. 437.
- [4] HUANG, Daming, CHYI, Jen-Inn and MORKOÇ, Hadis. Carrier effects on the excitonic absorption in GaAs quantum-well structures: Phase-space filling. Phys. Rev. B. **42**, (1990); p. 5147.
- [5] SZWACKA, T. and BLINOWSKI, J. Optical interdonor hopping in multiple quantum wells. Phys. Rev. B **45**, (1992); p. 6043.
- [6] Articles in High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II, Edited by G. Landwehr (Springer-Verlag, Berlin, 1989).
- [7] NGUYEN, N.; et al. Energy levels of a hydrogenic impurity in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs multiple-quantum-well structures. Phys. Rev. B **48**, (1993); p. 14226.
- [8] SHI, J. M.; PEETERS, F. M. and DEVREESE, J. T. Shallow donor impurities in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs superlattices in a magnetic field. Phys. Rev. B **50**, (1994); p. 15182.
- [9] SHAM, J. Lecture notes to the Spring College on Phys. of Low Dimensional semiconductors, Trieste (1990).
- [10] BUTCHER, Paul; MARCH, Norman H. and TOSI, Mario. "Physics of Low-Dimensional Semiconductors Structures", Plenum Press, N. Y. and London (1993).
- [11] BASTARD, G. Phys. Rev. B **24**, (1981); p. 4714.
- [12] HILL, R. N. Phys. Rev. Lett. **38**, (1977); p. 643.
- [13] BETHE, H. A. and SALPETER, E. E. Quantum Mechanics of One-and Two-Electron Atoms, Springer-Verlag, Berlin (1957); p. 154 –157.

- [14] PEKERIS, C. L. Phys. Rev. **112**, (1958); p. 1649; Phys. Rev. **126**, (1962); p.1470.
- [15] LAMPERT, M. A. Phys. Rev. Lett. **1**, (1958); p. 450.
- [16] PHELPS, D. E. and BAJAJ, K. K. Phys. Rev. B **26**, (1982); p. 912; Phys. Rev. B **27**, (1983); p. 4883.
- [17] ARMISTEAD, C. J.; NAJDA, S. P.; MAKADO, P. A.; STRADLING, R. A.; COULTER, P. C. and STILL-MAN, G. E. Solid State Commun. **48**, (1983); p. 51.
- [18] HUANT, S.; NAJDA, S. P. and ETIENNE, B. Phys. Rev. Lett. **65**, (1990); p. 1486.
- [19] HUANT, S. et al., Proc. 20th Internat. Conf. Physics of semiconductors, Thessaloniki, 1990, Ed. E. M. Anastassakis and J. D. Joannopoulos, World Scientific Publ. Co., Singapore 1990 (p.1369).
- [20] HUANT, S.; MANDRAY, A. and ETIENNE, B. Phys. Scr. **45**, (1992) ; p. 145.
- [21] HOLMES, S.; CHENG, J. P.; MCCOMBE, B. D. and SCHAFF, W. Phys. Rev. Lett. **69**, (1992); p. 2571.
- [22] HUANT, S.; MANDRAY, A.; ZHU, J.; LOUIE, S.; PANG, T. and ETIENNE, B. Phys. Rev. B **48**, (1993); p. 2370.
- [23] PANG, T. and LOUIE, S. Negative-donor center in semiconductors and quantum wells. Phys. Rev. Lett. **65**, (1990); p. 1635.
- [24] MUELLER, E. R.; LARSEN, D. M.; WALDMAN, J. and GOODHUE, W. B. Phys. Rev. Lett. **65**, (1992); p. 2204.
- [25] SZWACKA, T.; BLINOWSKI, J. and BETANCUR, F. J. Phys.: Condens. Matter **7**, (1995); p. 4489.
- [26] CHEN, R.; BAJAJ, K. K.; CHENG, J. P. and MCCOMBE, B. D. Phys. Rev. B **51**, (1995); p. 7714.
- [27] ZHU, J. -L. and XU, S. Phys. Rev. B **50**, (1994); p. 12175.
- [28] SHI, J. M.; PEETERS, F. M. and DEVREESE, J. T. Phys. Rev. B **51**, (1995); p. 7714; Phys. Rev. B **57**, (1998); p. 3900.
- [29] ZHU, J. -L.; LIN, D. L. and KAWAZOE, Y. Phys. Rev. B **54**, (1996); p. 16786.
- [30] BETANCUR, F. J.; MIKHAILOV, I. D. and OLIVEIRA, L. E. J. Phys.: Condens. Matter **10**, (1998); p. 7283.

- [31] MIKHAILOV, I. D.; BETANCUR, F. J. and MARIN, J. H. *phys. stat. sol. (b)* **220**, (2000); p. 171.
- [32] ZHU, J. -L.; ZHAO, J. -H.; DUAN, W. -H. and GU, B. -L. *Phys. Rev. B* **46**, (1992); p. 7546.
- [33] RIVA, C.; SCHWEIGERT, V. A. and PEETERS, F. M. *Phys. Rev. B* **57**, (1998); p. 15392.
- [34] HE, X-F.; *Phys. Rev. B* **42**, (1990); p. 11751. *Phys. Rev. B* **43**, (1991); p. 2063.
- [35] STILLINGER, Frank H. Axiomatic basis for spaces with noninteger dimension. *Journal of Mathematical Physics*, **18**, No 6, (1977); p. 1224.
- [36] MATHIEU, Henry; LEFEBVRE, Pierre and CHRISTOL, Philippe. Simple analytical method for calculating exciton binding energies in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B.* **46**, (1992); p. 4092.
- [37] LEFEBVRE, Pierre; CHRISTOL, Philippe and MATHIEU, Henry. Unified formulation of excitonic absorption spectra of semiconductor quantum wells, superlattices, and quantum wires. *Phys. Rev. B.* **48**, No. 23 (1993); p. 17308.
- [38] LEFEBVRE, Pierre. Et al. Confined excitons in semiconductors: Correction between binding energy and spectral absorption shape. *Phys. al Rev. B* **52**, (1995); p. 5756.
- [39] REYES-GOMEZ, E.; MATOS-ABIAGUE, A.; PERDOMO-LEIVA, C. A.; DE DIOS-LEYVA, M. and OLIVEIRA, L. E. *Phys. Rev. B* **61**, (2000); p. 13104. *phys. stat. sol.(b)* **220**, (2000); p. 71; *Physica E* **8**, (2000); p. 239.
- [40] OLIVEIRA, L. E.; DUQUE, C. A.; PORRAS-MONTENEGRO, N. and DE DIOS-LEYVA, M. *Physica B* **302–303**, (2001); p. 72.
- [41] MANDELBROT, B. B. *The Fractal Geometry of Nature*, W. H. Freeman & Co, San Francisco 1988.
- [42] ESAKI, L.; TSU, R. *IBM, J. Res. Dev.*, **14**, (1970); p. 61.
- [43] YU P. and CARDONA, M. “Fundamentals of Semiconductors”, (Springer-Verlag, Berlin, 1996), Capitulo I.
- [44] SINGH, J. “Physics of Semiconductors and their Heterostructures” (Mc. Graw-Hill, Singapore, 1993), Capitulo II.
- [45] CIBERT, J. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **49**, (1986); p. 1275.
- [46] TSUCHIYA, M. et al., *Phys. Rev. Lett.*, **62**, (1988); p. 466.

- [47] LUTTINGER, J. M. and KOHN, W. Phys. Rev. **97**, (1955); p. 869. Phys. Rev. **98**, (1955); p. 915.
- [48] DAVIS, J. “The Physics of low-dimensional semiconductors. An introduction”, Cambridge University Press, (1998); pp. 107-114.
- [49] BURT, G. M. J. Phys. Condens. Matter. **4**, (1992); p. 6651.
- [50] FOREMAN, B.A. Phys. Rev. B **52**, (1995); p. 12241.
- [51] LARSEN, D. M. Explanation of the formation of D^- ions in quantum wells. Physical Rev. B **47**, (1993); p. 16333.
- [52] MARMORKOS, I. K.; SCHWEIGERT, V. A. and PEETERS; F. M. Remote and spatially separated D^- center in quasi-two-dimensional semiconductor structures. Phys. Rev. B **55**, (1997); p. 5065.
- [53] MIKHAILOV, I. D. et al. Model Structure for D^- States in GaAs-(Ga,Al)As Quantum Wells. Physica status solidi (b) Vol. **210** (1998); p. 605.
- [54] McCOMBE, B. D.; Jiang, Z. X. and HAWRYLAK, P. Spectroscopy of neutral and charged donors in semiconductor quantum wells: Many body effects. Physica status solidi (b) Vol. **210** (1998); p. 587.
- [55] CHEN, R. et al. Resonant magnetopolaron effect in D^- centers in quantum wells. Phys. Rev. B **51**, (1995); p. 9825.
- [56] HERBERT, Fox and LARSEN; David. Exact solutions for barrier D^- states at high magnetic fields. Phys. Rev. B **51**, (1995); p. 10709.
- [57] LARSEN, D. M. and McCANN, S. Y. Excited states of the two-dimensional D^- center in magnetic fields. Phys. Rev. B **45**, (1992); p. 3485.
- [58] DZYUBENKO, A. B. and SIVACHENKO, A. Yu. D^- centers in quantum wells: Spin-singlet and spin-triplet magneto-optical transitions. Phys. Rev. B **48**, (1993); p. 14690.
- [59] SHI, J. M. et al. Polaron effect on D^- centers in weakly polar semiconductors. Phys. Rev. B **57**, (1998); p. 3900.
- [60] MUELLER, E. R. Band nonparabolicity and central-cell corrections for D^- centers in GaAs quantum wells. Phys. Rev. B **51**, (1995); p. 2326.
- [61] GREENE, R. L. and BAJAJ, K.K. Effect of magnetic field on the energy levels of a hydrogenic impurity center in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well- structures. Phys. Rev. B **31**, (1985); p. 913.

- [62] GREENE, R. L. and BAJAJ, K.K. Phys. Rev. B **37**, (1988); p. 4604.
- [63] OLIVEIRA, L. E. Phys. Rev. B **38**, (1988); p. 10641.
- [64] BROZAK, G.; MCCOMBE B. and LARSEN, D. Phys. Rev. B **40**, (1989); p. 1265.
- [65] BETANCUR F.J. and MIKHAILOV, I.D. Phys. Rev. B **51**, (1995); p. 4982.
- [66] BRYANT, G. W. Phys. Rev. B **29**, (1984); p. 6632.
- [67] BRANIS, S. V.; LI, G. and BAJAJ, K. K. Phys. Rev. B **47**, (1993); p. 1316.
- [68] MONTES, A.; DUQUE, C.A. and PORRAS-MONTENEGRO, N. J. Appl. Phys. **81**, (1997); p.7890.
- [69] VILLAMIL, Pablo and PORRAS-MONTENEGRO, N. Binding and transition energies of shallow impurities in cylindrical GaAs quantum-well wires under a uniform magnetic field. J. Phys.: Condensed Matter Vol. **10**, (1998); p. 10599.
- [70] DUQUE, C.A.; MONTES, A.; MORALES A.L. and PORRAS-MONTENEGRO, N. J. Phys. Condens. Matter. **9**, (1997); p. 5977.
- [71] PEREZ-MERCHANCANO, S. T. and MARQUES, G. E. Deformed cyclotronic orbits for shallow impurities in cylindrical quantum well wires. Solid State Communications Vol **110**, (1999); p. 209.
- [72] PORRAS-MONTENEGRO, N. and PÉREZ-MERCHANCANO, S. T. Phys. Rev. B **46**, (1984); p. 9780.
- [73] ZHU J. L. Phys. Rev. B **39**, (1989); p. 8780.
- [74] ZHU J. L., XIONG J. J. and GU, B. L. Phys. Rev. B **41**, (1990); p. 6001.
- [75] ZHU J. L.; ZHAO J. H. and XIONG J. J. Phys. Rev. B **50**, (1994); p. 1832.
- [76] EL-SAID, M. J. Physique France, **5**, (1995) ; p.1027.
- [77] EL-SAID, M. Physica B **202**, (1994); p. 202.
- [78] YIP, Y.T. and KOK, W.C. Phys. Rev. B **59**, (1994); p. 15825.
- [79] GONZALEZ A. and MIKHAILOV, I. Int. J. Mod, Phys. B **11**, (1997); p. 3469.
- [80] PEETERS, F. M. and SCHWEIGERT, V. A. Phys. Rev. B **53**, (1996); p. 1468.
- [81] PARTOENS, B.; SCHWEIGERT, V.A. and PEETERS, F.M. Phys. Rev. Lett. **79**, (1997); p. 3990.

- [82] BETANCUR, F. J.; MIKHAILOV I. D. and OLIVEIRA, L. E. Shallow donor states in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots with different potential shapes. *Journal Physics D: Applied Physics*. **31** (1998); p. 3391.
- [83] FRAIZZOLI, S.; BASSANI, F. and BUCZKO, R. Shallow donor impurities in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum-well structures: Role of the dielectric-constant mismatch. *Phys. Rev. B* **41**, (1990); p. 5096.
- [84] SPIROS, V.; BRANIS, Gang Li and BAJAJ, K. K. Hydrogenic impurities in quantum wires in the presence of a magnetic field. *Phys. Rev. B* **47**, (1993); p. 1316.
- [85] PORRAS-MONTENEGRO, N.; LÓPEZ-GODAR, J. and OLIVEIRA, L. E. Binding energies and density of impurity states of shallow hydrogenic impurities in cylindrical quantum-well wires. *Phys. Rev. B* **43**, (1991); p. 1824.
- [86] PORRAS-MONTENEGRO, N.; LATGÉ, A. and OLIVEIRA, L. E. Impurity-related optical absorption spectra of GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs cylindrical quantum-well wires. *Journal of Applied Physics* Vol. **70**, (1991); p. 5555.
- [87] LATGÉ, A.; PORRAS-MONTENEGRO, N. and OLIVEIRA, L. E. Photoluminescence study of shallow acceptor in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs cylindrical quantum-well. *Phys. Rev. B* **45**, (1992); p. 6742.
- [88] PEREZ-MERCHANCANO, S. T. and MARQUES, G. E. Photoluminescence in cylindrical quantum well wires in the presence of shallow impurities and magnetic field. *Physica status solidi (b)* Vol. **212** (1999); p. 375.
- [89] LATGE, A.; PORRAS-MONTENEGRO, N. and OLIVEIRA, L. E. Infrared transitions between hydrogenic states in cylindrical GaAs-(Ga,Al)As quantum-well wires. *Phys. Rev. B* **45**, (1992); p. 9420.
- [90] MONTES, A.; DUQUE, C. and PORRAS-MONTENEGRO, N. Density of shallow-donor impurity states in rectangular cross section GaAs quantum-well wires under applied electric field. *J. Phys.: Condensed Matter* Vol. **10**, (1998); p. 5351.
- [91] HERRICK, David. R. and STILLINGER, Frank. H. Variable dimensionality in atoms and its effect on the ground state of helium isoelectronic sequence. *Phys. Rev. A*. Vol. **11**, (1975); p. 42.
- [92] THILAGAM, A. Two-dimensional charged-exciton complex. *Phys. Rev. B* **55**, (1997); p. 7804.
- [93] THILAGAM, A. Stark shifts of excitonic complex in quantum wells. *Phys. Rev. B* **56**, (1997); p. 4665.
- [94] THILAGAM, A. Exciton-phonon interaction in fractional dimensional space. *Phys. Rev. B* **56**, (1997); p. 9798.

- [95] MATOS-ABIAGUE, A.; OLIVEIRA, L. E. and DE DIOS-LEYVA, M. Fractional-dimensional approach for excitons in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells. *Phys. Rev. B*, **58**, No. 7 (ago. 1998); p. 4072.
- [96] REYES-GÓMEZ, E. et al. Exciton and shallow impurities in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs semiconductor heterostructures within a fractional-dimensional space approach: Magnetic-field effects. *Phys. Rev. B* **61**, (2000); p. 13104.
- [97] REYES-GÓMEZ, E. et al. The fractional-dimensional space approach: Excitons and shallow impurities in semiconductor low-dimensional systems. *Physica status solidi (b)*, **220** (2000); p. 71.
- [98] REYES-GOMEZ, E. et al. Magnetic-field effects on shallow impurities in semiconductor GaAs-(Ga,Al)As quantum wells and superlattices within a fractional-dimensional space approach. *Physica E* **8**, (2000); p. 239.
- [99] MIKHAILOV, I. D. and BETANCUR, F. J. Energy Spectra of Two Particles in a Parabolic Quantum Dot: Numerical Sweep Method. *Physica status solidi (b)*, **213** (1999); p. 325.
- [100] CEN, J.; CHEN, R. and BAJAJ, K.K. *Phys. Rev. B* **50**, (1994); p. 10947.
- [101] GRUNDMAN, M.; STIER, O. and BIMBERG, *Phys. Rev. B* **52**, (1995); p. 12258.
- [102] SIVERNS, P.D.; MALIK, S.; MCPHERSON, G.; CHILDS, D.; ROBERTS, C.; MURRAY, R.; JOYCE, B.A. and DAVOCK, H. *Phys. Rev. B* **58**, (1998); p. R10127.
- [103] TARUCHA, S.; AUSTING, D.G.; HONDA, T.; VAN DER HAGE, R.J. and KOUWENHOVEN, L. P. *Phys. Rev. Lett.* **77**, (1996); p. 3613.
- [104] CIURLA, M.; ADAMOWSKI, J.; SZAFRAN, B. and BEDNAREK, S. *Physica E* **15**, (2002); p. 261.
- [105] BEDNAREK, S.; SZAFRAN, B. and ADAMOWISKI, J. *Phys. Rev. B* **64**, (2001); p. 195303.
- [106] BRYANT, G. W. *Phys. Rev. B* **31**, (1985); p. 7812.
- [107] WEBER, P.; SHULTZ, A. and OLIVEIRA, L. E. *Phys. B* **38**, (1988); p. 2179.
- [108] BROWN, J. W. and SPECTOR, H. N. *J. Appl. Phys.* **59**, (1986); p. 1180; *Phys. Rev. B* **35**, (1987); p. 3009.
- [109] FERREIRA DA SILVA, A. *Phys. Rev. B* **41**, (1990); p. 1684.
- [110] PORRAS-MONTENEGRO, N.; LOPEZ_GONDAR, J. and OLIVEIRA, L. E. *Superlattices and Microstructures*, **9**, (1991); p. 5.

- [111] OLIVEIRA, L. E.; PORRAS-MONTENEGRO, N. and LATGE, A. Phys. Rev. B **47**, (1993); p. 13864.
- [112] DENG, ZH.-Y. and GU, S.-W. J. Phys.: Condens. Matter, **5**, (1993); p. 2261.
- [113] DENG, Zh.-Y.; LAI, T.; GUO J. and GU, S.-W. J. Appl. Phys., **75**, (1994); p. 7389.
- [114] ZHU, J. L.; ZHAO, J. and XIONG, J. J. J. Phys.: Condens. Matter **6**, (1994); p. 5097.
- [115] ZHU J. L. and CHEN, XI. Phys, Rev. B **50**, (1994); p. 4497.
- [116] OLIVEIRA, L. E. and FALICOV, L. M. Phys. Rev. B **34**, (1986); p. 8576.
- [117] LÓPEZ-GONDAR, J.; D'ALBUQUERQUE E CASTRO, J. and OLIVEIRA, L. E. Phys. Rev. B **42**, (1990); p. 7069.
- [118] WEBER, G. Phys. Rev. B **41**, (1990); p. 10043.
- [119] PORRAS-MONTENEGRO, N.; PÉREZ-MERCHANCANO, S. T. and LATGÉ, A. J. Appl. Phys. **74**, (1993); p. 7624.
- [120] MAILHIOT, C.; CHANG, Y. and MCGILL, T. C. Phys. Rev. B **26**, (1982); p. 4449.
- [121] ELABSY, A. M. Phys. Rev. B **46**, (1992); p. 2621.
- [122] GARCIA C. and MIKHAILOV, I. D. Phys. Stat. sol. (b) **220**, (2000); p. 201.
- [123] DENG, Z. and GU, S. W. J. Phys.: Condens. Matter. **5**, (1993); p. 2261.
- [124] DENG, Z.; LAI, T. R.; GUO, J.-K. and GU, S. W. J. Appl. Phys. **75**, (1994); p. 7389.
- [125] CHAUDHURI, S. and BAJAJ, K. K. Phys. Rev. B **29**, (1984); p. 1803.
- [126] ANDREANI, L. and PASQUARELLO, A. Phys. Rev. B **42**, (1990); p. 8928.
- [127] RÖSSLER, U. Solid State Commun. **49**, (1984); p. 943.
- [128] EKENBERG, U. Phys. Rev. B **40**, (1989); p. 7714.
- [129] HERSCHBACH, D. R.; AVERY, J. and GOSCINSKI, O. Dimensional Scaling in Chemical Physics, Kluwer Academic Publishers (1993).

ANEXOS

Anexo A. Publicaciones

Los resultados obtenidos durante el desarrollo de esta tesis se presentaron en diferentes eventos científicos nacionales e internacionales, y están enmarcados en siete (7) publicaciones internacionales y 2 nacionales. Quiero resaltar que los artículos de más reciente publicación, corresponden al trabajo de investigación que desarrolle durante mi pasantía en el grupo dirigido por el doctor Sergio Ulloa, en el Departamento de Física y Astronomía de la Universidad de Ohio, USA.

A continuación se presenta una lista con los títulos de los artículos, las respectivas referencias y el evento a donde fueron presentados.

1 Publicaciones internacionales

- The Binding Energies of Shallow Donor Impurities in GaAs-(Ga,Al)As Coaxial Quantum-Well Wires, Phys. Stat. Sol. (b) **220**, 195 (2000). Presentado en: XV Latinamerican Symposium on Solid State Physics (SLAFES XV), Cartagena, Colombia, Nov. 1-5, 1999.
- Negative-Donor in Graded Quantum Well-Wire: Fractal Dimension Approach Phys. Stat. Sol. (b) **230**, 469-474 (2002). Presentado en: Physics and Technology at the Nanometer Scale (PASI), San Jose, Costa Rica, Junio 24-Julio 3, 2001.
- Off-Center Neutral and Negatively Charged Donor Impurities in Semiconductor Heterostructures: Fractal Dimension Method, Phys. Stat. Sol. (b), **234** N° 2, 590 (2002).
- Stability of D^- in Quantum Wells Under Strong Magnetic Fields, Phys. Stat. Sol. (c), **0** N° 2, 747 (2003). Presentado en: 10th International conference on shallow level center in semiconductor, SLCS10. University of Warsaw, Warsaw, Polonia, Julio (2002).
- Shallow Donor in Semiconductor Heterostructures: Fractal Dimension Approach and the Variational Principle. Phys. Rev. B **67**, 115317 (2003).
- Density of Electronic State In Impurity Doped Quantum Well Wires, Physica B: Condensed Matter, **348**, 66-72 (2004) Presentado en: APS March Meeting 2003, Austin Texas, USA. Marzo 3-7, 2003.

- Density of impurity State In Doped Spherical Quantum Dots. *Physica E*, **23** 102-107 (2004). Presentado en: Physics and Technology at the Nanometer Scale (PASI), Bariloche, Argentina, Junio 2003.

2. Publicaciones nacionales.

- Off-Center Donor Fractal Dimension in Graded Quantum Well Wires, *Rev. Col. Fis.*, Vol 33, N° 2, 144 (2001), Presentado en: XIX Congreso Nacional de Física, Manizales, Sept. 24-28 (2001)
- Donor Binding Energy in Dielectric Graded GaAs-(Ga, Al)As Quantum-Well Wires, *Rev. Col. Fis.*, Vol 34, N° 2, 645 (2001), Presentado en: XIX Congreso Nacional de Física, Manizales, Sept. 24-28 (2001)