IMPUREZA DONADORA (D^0) EN DISCOS CUÁNTICOS EMBEBIDOS EN HILOS CUÁNTICOS

CARLOS ARNULFO GÓMEZ OLEJUA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
Junio 2006

IMPUREZA DONADORA (D^0) EN DISCOS CUÁNTICOS EMBEBIDOS EN HILOS CUÁNTICOS

CARLOS ARNULFO GÓMEZ OLEJUA

Trabajo de grado como requisito parcial para optar al titulo de Física

Director

DR. HAROLD PAREDES GUTIÉRREZ

Codirector

Dr. CARLOS LEONARDO BELTRÁN RÍOS

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

Junio 2006

A MIS PADRES,

Graciela del Pilar Olejua y Luis Fernando Gomez, quienes con sus esfuerzo y apoyo me brindaron la oportunidad de alcanzar esta meta.

A MI HERMANA

Angelica Gomez

Y A TODA MI FAMILIA

AGRADECIMIENTOS

El autor expresa sus agradecimientos :

Al Grupo de Física Computacional en Materia Condensada, FICOMACO:

Al Dr. Harold Paredes Gutiérrez, por aceptar ser el director de mi tesis .
Al Dr. Carlos Leonardo Beltrán Ríos, quien tuvo un aporte muy significativo en la construcción de este trabajo .
Al Dr. Ilia D. Mikhailov, profesor que no solo me brindo las herramientas necesarias, sino que también es un ejemplo a seguir por su profesionalismo y disciplina.
A los profesores Javier Betancurt, Jairo Marin, Francisco Garcia.
A mis compañeros Oscar Acevedo, Fredy Rodriguez, Hamilton Carrillo
William Amado, William Gutierrez, Juan Carlos Piña, Al GIRG
A Jesus Galvan, por toda su colaboración
A Oscar Vera, amigo incondicional
A Janeth Fernández, por hacer parte de mi vida.

TÍTULO : IMPUREZA DONADORA (D^0) EN DISCOS CUÁNTICOS EMBEBIDOS EN HILOS CUÁNTICOS. *.

AUTOR: CARLOS ARNULFO GÓMEZ OLEJUA **

PALABRAS CLAVES : Impureza neutra D^0, Energía de enlace de impureza E_b.

DESCRIPCIÓN : En este trabajo se analiza el efecto de la variación de las dimensiones de un disco cuántico de material GaAs, embebido en un hilo cuántico de (GaAl)As, sobre el valor de la energía de enlace de una impureza donadora neutra (D^0) centrada en el interior del disco. Este modelo se reduce a una Heteroestructura con un doble confinamiento tanto en la dirección radial como en la dirección de crecimiento. El cálculo se realiza bajo la aproximación de la masa efectiva. El desarrollo matemático realizado en este trabajo se basó en el principio variacional, y se utilizó el método de dimensión fractal. Se obtuvieron valores de la energía de enlace en función de ciertos parámetros geométricos tales como el radio y ancho del disco cuántico. Estos parámetros fueron tenidos en cuenta en sus casos límite, donde las dimensiones del disco se modificaron de tal manera que éste se aproximó a un pozo cuántico ($R >> L$), o en caso contrario se aproximó a un hilo cuántico ($L >> R$); con lo cual se tuvo la posibilidad de comparar los resultados obtenidos en trabajos previos. De acuerdo a los resultados, se aprecia la eficiencia de la técnica utilizada, y también se observa la fuerte dependencia del valor de la energía de enlace de la impureza con respecto a las dimensiones del disco cuántico.

*Trabajo de Grado.

**Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Harold Paredes Gutiérrez (Director).

Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Codirector).

Title : DONOR IMPURITY (D^0) IN QUANTUM DISKS EMBEDDED IN QUANTUM WIRE *.

AUTOR: CARLOS ARNULFO GOMEZ OLEJUA **

KEY WORDS :donor impurity D^0, energy binding of impurity E_b.

DESCRIPTION : In this work we analyze the effect of the variation in the dimensions of a GaAs Quantum Disk, which is embedded in a (GaAl)As Quantum Wire, on the binding energy value of a neutral donor impurity (D^0) centered inside the disk. This model is reduced to an heterostructure with a double confinement both in radial direction and growth direction. The computation is carried out by means of effective mass approximation. The mathematical approach made in this work was based on variational principle and fractal dimension method was used. We obtained values of the binding energy as a function of certain geometrical parameters such as quantum disk radius and width. These parameters were taken into account in their limits where the disk dimensions were modified in such a way that it approached to a quantum well ($R >> L$) and, otherwise, it approached to a quantum wire ($L >> R$); with which we had the chance to compare the results obtained in previous works. According to the results, we appreciate the efficiency of the technique carried out, and we also observe the strong dependence of the impurity binding energy value with regards to the quantum disk dimensions.

*Senior thesis project.

**Facultad de Ciencias, Escuela de Física, Harold Paredes Gutiérrez (Director).

Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Codirector).

TABLA DE CONTENIDO

ÍNDICE DE FIGURAS **8**

1. INTRODUCCIÓN **9**

2. GENERALIDADES **12**

2.1. IMPUREZAS 12

2.2. APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA 15

2.3. MODELO TEÓRICO 16

2.4. ELECTRON LIBRE 18

3. FUNDAMENTOS TEÓRICOS **20**

3.1. PRINCIPIO VARIACIONAL DE SCHRÖDINGER 20

3.2. MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL 21

3.3. MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO 25

4. APLICACIÓN DEL MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL EN EL SISTEMA 27

4.1. MODELO DE CONFINAMIENTO 27

4.2. JACOBIANO 28

4.3. BARRIDO TRIGONOMÉTRICO EN EL SISTEMA 29

5. ANÁLISIS DE RESULTADOS 32

5.1. ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA D^0 EN UN QW . . . 32

5.2. ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA D^0 EN UN QWW . 33

5.3. ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA D^0 EN UN DISCO CUÁNTICO 34

5.4. ENERGÍA DE ENLACE EN FUNCIÓN DEL ANCHO DEL DISCO 35

5.5. ENERGÍA DE ENLACE EN FUNCIÓN DEL RADIO DEL DISCO 37

5.6. GRÁFICA 3D 38

CONCLUSIONES 39

BIBLIOGRAFÍA 40

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. Donadora D^0 13

2.2. Aceptora 14

2.3. Disco cuántico embebido en un hilo cuántico 16

2.4. Esquema de la barrera de potencial en la heterojuntura. 16

5.1. Energía de enlace de una D^0 centrada en un QW. 33

5.2. Energía de enlace de una D^0 centrada en un QWW. 34

5.3. Energá de enlace de una D^0 centrada en Discos Cuánticos. 35

5.4. Energía de enlace de una D^0, centrada en un Disco embebido en un Hilo cuántico en función del ancho, para diferentes radios del hilo . . 36

5.5. Energía de enlace de una D^0, centrada en un Disco embebido en un Hilo cuántico en función del Radio, para diferentes anchos. 37

5.6. Energía de enlace 3D, en función de sus parámetros geométricos (R) y (L). 38

1 INTRODUCCIÓN

Mediante el uso de las técnicas actuales de crecimiento de semiconductores como la epitaxia por haces moleculares (MBE), la deposición química de compuestos órganometálicos al vapor y litografía por haces de electrones [1-2] se pueden conseguir estructuras de baja dimensionalidad, a escalas nanométricas, donde se observan efectos cuánticos del confinamiento causado por la diferencia en las brechas de energía entre las bandas de valencia y de conducción de los materiales que forman la heteroestructura. Como resultado de esta diferencia en las junturas de los materiales el movimiento de los electrones y los huecos en la dirección de crecimiento del cristal es restringido, pero pueden moverse libremente en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento. Este sistema es entonces un sistema bidimensional y en la dirección de crecimiento se forma un pozo cuántico (conocido como QW por las siglas de su nombre en inglés). De la misma forma si se restringe el movimiento en dos direcciones se obtienen heteroestructuras casi unidimensionales, conocidas como Hilos Cuánticos (QWW), y en las tres direcciones espaciales las conocidas como cero dimensionales ó puntos Cuánticos (QD). Estas heteroestructuras representan un amplio campo de investigación tanto teórico como experimental en el área de los semiconductores.

El perfeccionamiento de las técnicas actuales nos permite agregar portadores de carga en los semiconductores, al introducir una impureza en el semiconductor. La impureza conduce a la aparición de nuevos niveles, estos niveles se encuentran a pequeñas distancias por debajo de la banda de conducción cambiando las propiedades físicas del

semiconductor. Uno de los pioneros en la investigación de las propiedades electrónicas de impurezas en Heteroestructuras fue Bastard [3], en un trabajo ampliamente referenciado, donde se calcula la energía de enlace de una impureza donadora neutra D^0, centrada en un pozo cuántico de barrera infinita usando un método variacional. Motivando una gran cantidad de trabajos teóricos posteriores [4, 12], donde se utilizaron aparte del método variacional [4, 9] otros métodos tales como: expansión en series [10], métodos perturbativos [11] y el método de montecarlo [12],etc.

Estos métodos fueron aplicados para el calculo de los estados electrónicos de portadores de carga en heteroestructuras semiconductoras conocidas, en presencia de campos externos y diferentes tipos del potencial de confinamiento. Por ejemplo, Bryant [4] estudio la energía de enlace para una impureza en un QWW de geometría cilíndrica de GaAs, rodeado por $Ga_{1-x}Al_xAs$, también en un trabajo posterior, analizó el comportamiento de la energía de enlace para una D^0 en un hilo cuántico con un potencial de confinamiento infinito en dirección radial, bajo la acción de un campo magnético actuando en la dirección axial [5]. Zhu y colaboradores. [8], calcularon la energía de enlace de una D^0 y una D^- confinadas en un punto cuántico de simetría esférica. Pang y colaboradores. [12] utilizaron el método de MonteCarlo para analizar el problema de una D^- en diferentes tipos heteroestructuras semiconductoras en presencia de un campo magnético. En estos trabajos se encuentra la dependencia de los estados electrónicos de la impureza, en especial del estado base con la dimensión de la estructura (QW,QWW,QD), con el tamaño y la magnitud del campo externo.

Durante la última década se ha usado el modelo de la dimensión fraccional[13, 14], basados en el concepto introducido por Mandelbrot [15]. Este método se ha utilizado exitosamente para describir las propiedades de impurezas y excitones en heteroestructuras. En el Método de la Dimensión Fraccional, las interacciones anisotrópicas en un espacio tridimensional se tratan como isotrópicas en un espacio con dimensión no entera, asociado con el grado de anisótropia. Con este método se analizó el

estado base de un excitón en un pozo cuántico [13]. Lefevre y colaboradores. [14] utilizaron el método para el estudio de sistemas hidrogenoides en QWs y QWWs de $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$, analizando algunos estados excitonicos y espectros de absorción.

Posteriormente el Grupo de Física Computacional en Materia Condensada FICOMACO, de la Escuela de Física de la Universidad Industrial de Santander, con base en el principio variacional de Schrödinger y utilizando la técnica de derivación funcional, elaboró un método para calcular la energía de enlace, procedimiento conocido como Dimensión Fractal. Utilizando este método se publicaron una serie de trabajos [16] en los cuales se calculo la energía de enlace del estado base para excitones e impurezas donadoras D^0 y D^-, donde se demostró la alta precisión del método para diferentes tipos de heteroestructuras con diferentes tipos de confinamiento.

Recientemente, se han utilizado otro tipo de heteroestructuras semiconductoras, como las superredes de nano hilos (NWSls), [17], y nano hilos modulados (NMW) [18]. En estos trabajos se muestran estas heteroestructuras como un nuevo campo de investigación con grandes aplicaciones en la tecnología, tales como guías de onda unidimensionales, láser y diodos emisores de luz entre otras.

Motivado por el gran número de trabajos teóricos y algunos trabajos experimentales en heteroestructuras semiconductora convencionales (QWs,QWWs,QDs, etc) se analiza en este trabajo, la energía de enlace del estado base para una impureza neutra D^0 en un Disco cuántico, de ancho $\mathbf{L}$, embebido en un hilo cuántico cilíndrico, de radio $\mathbf{R}$ (ver figura 2.3). Esta Heteroestructura constituye una simplificación de un NMW y presenta fácil manipulación geométrica: Variando el radio ($\mathbf{R}$) del hilo podemos llegar a simular un pozo cuántico QW ($\mathbf{R}>>\mathbf{L}$), y en un caso análogo variar el ancho del Disco ($\mathbf{L}$) para simular un hilo cuántico QWW ($\mathbf{L}>>\mathbf{R}$). Los cálculos se realizarán dentro de la aproximación de la masa efectiva, utilizando el Método Variacional de Dimensión Fractal. Los resultados de nuestro modelo se compararán con los reportados en trabajos previos.

2 GENERALIDADES

2.1 IMPUREZAS

Una impureza A es un átomo que se introduce a una red formada de átomos B, ocupando un sitio de la misma que normalmente estaría ocupado por un átomo de la red. El átomo A forma enlaces con los átomos B circunvecinos dejando un portador libre interactuando débilmente con él; el átomo A se encuentra inmóvil debido a que está fuertemente enlazado a sus átomos vecinos.

Por ejemplo sustancias tales como arsenénico, antimonio u otros elementos, pertenecientes al grupo V de la tabla periódica, son impurezas de sustitución en cristales puros de silicio, germanio o de cualquier otro elemento perteneciente al grupo IV. Los átomos del grupo V tienen cinco electrones de valencia, cuatro de ellos se usan para formar enlaces covalentes con átomos circunvecinos y el quinto se enlaza débilmente al átomo de impureza, sólo mediante fuerzas electrostáticas (ver figura 2.1), por eso se puede ionizar con facilidad mediante la agitación térmica de la red, a temperaturas ordinarias, para proporcionar una conducción electrónica adicional. Entonces, el átomo de impureza que queda se convierte en un ion positivo, el cual se encuentra inmóvil, debido a que está fuertemente unido a cuatro átomos vecinos por medio de los enlaces covalentes normales.

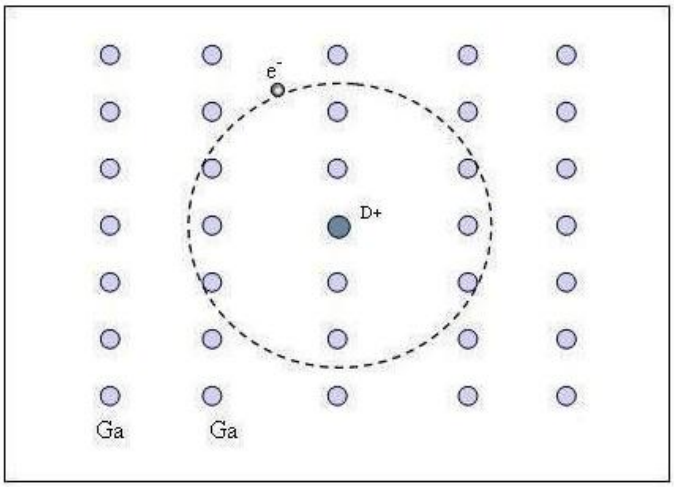

Figura 2.1: Donadora D^0

En cristales que contienen este tipo de impurezas existen más electrones que huecos. Estas impurezas recibe el nombre de donadora, D^0. Los cristales de este tipo se denominan semiconductores tipo n, designados así porque la mayoría de los portadores de carga son electrones.

Si en lugar de los átomos del grupo V se introducen en la red átomos de impureza del grupo III (Al,Ga,In,etc), se observará un efecto muy distinto. Estos átomos tienen sólo tres electrones de valencia que se usan para formar enlaces covalentes con tres átomos cercanos; pero el cuarto enlace siempre carece de un electrón. En efecto, existe un *hueco* adicional que se crea en la estructura del enlace covalente en el átomo de la impureza. Este hueco puede emigrar fácilmente alejándose del sitio del la impureza debido a que un electrón adicional del enlace covalente cercano puede emigrar al sitio de la impureza y llenar el cuarto enlace de par de electrones (ver figura 2.2).

La energía necesaria para la migración del hueco lejos del sitio de la impureza es del orden de la energía que se requiere para eliminar el electrón adicional de un átomo donador. En consecuencia, excepto a temperaturas muy bajas, todos los huecos serán migratorios y todos los átomos de impurezas del grupo III tendrán la naturaleza de iones negativos inmóviles. En cristales que contienen predominantemente este tipo de

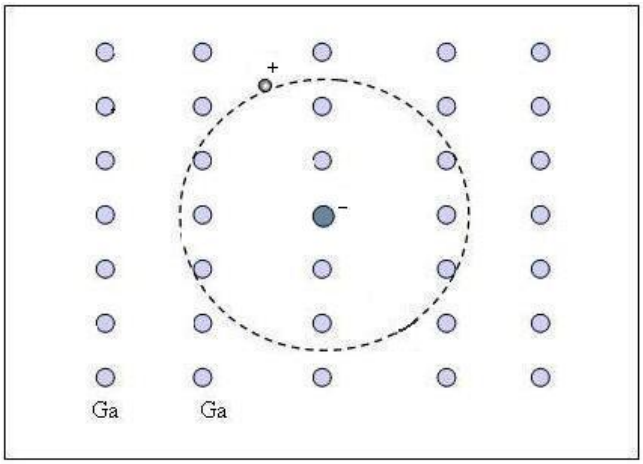

Figura 2.2: Aceptora

impurezas se tienen más huecos que electrones, aunque siempre habrá algunos electrones que se originan debido a la excitación térmica. Estas impurezas recibe el nombre de Aceptora. y los cristales con este tipo de impurezas se denominan semiconductores tipo p, dado que los portadores de carga mayoritarios son positivos.

Cuando en un cristal semiconductor existen impurezas de ambos tipos, la conductividad es mayor que la referente a un semiconductor puro a la misma temperatura, debido a los portadores de carga adicionales originados por los átomos de impurezas, y mientras más grande es la concentración de impurezas, mayor es la conductividad.

2.2 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

Debido a que la impureza rompe la simetría traslacional del cristal, el problema de un electrón en un cristal es más complicado que en un cristal ideal, ya que el electrón además de sentir el potencial cristalino siente el potencial de atracción que no tiene simetría alguna, haciendo imposible resolver la ecuación de Schrödinger de manera exacta. La aproximación utilizada comúnmente para resolver este tipo de problemas es la aproximación de masa efectiva (AME), la cual hace uso, de una banda de energía de forma parabólica en los semiconductores y que por tanto el portador en ella se comporta como un portador libre con masa efectiva. Esta aproximación, plenamente justificada [19], es muy útil para estudiar las propiedades de los electrones bajo cualquier perturbación externa débil.

Como en el compuesto GaAs una de las ventajas es que su estructura de bandas es aproximadamente parabólica en el fondo de la banda, entonces su masa efectiva m^*, es aproximadamente isotrópica e independiente de la energía, esto significa que el efecto del potencial cristalino es cambiar la masa del electrón en el vacío por una masa efectiva. De este modo, la ecuación de Schrödinger para una impureza donadora neutra en una heterojuntura semiconductora está dada por la expresión:

$$\left[-\frac{h^2}{m^*}\Delta^2 + V(r) - \frac{e^2}{\varepsilon\,\vec{r}}\right]\psi(r) \;=\; E\psi(r) \tag{2.1}$$

la expresión anterior puede utilizarse, para impurezas confinadas en pozos cuánticos, y posteriormente su aplicabilidad se extendió a otro tipo de Heteroestructuras, tales como QWWs y QDs, entre otras.

2.3 MODELO TEÓRICO

Nosotros consideramos una impureza donadora neutra D^0 confinado en un Disco cilíndrico de Radio **R** y de ancho **L**, como se puede apreciar en la figura 2.3.

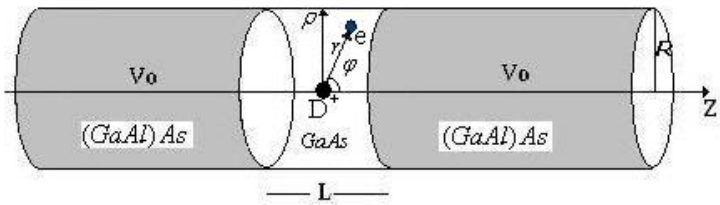

Figura 2.3: Disco cuántico embebido en un hilo cuántico

Debido al cambio de materiales y a la diferencia en la brecha de energía ΔE se crea un pozo de potencial, en la dirección de crecimiento, la altura de la barrera del pozo depende de la concentración de aluminio; a mayor concentración de aluminio mayor es la discontinuidad (ΔG) , ver la figura 2.4, entre los bordes de las bandas de conducción y de valencia en las interfaces entre GaAs y GaAlAs. La altura de la barrera de potencial para el electrón esta dada por $V_e = 0{,}65 * (1{,}115x + 0{,}37x^2)$ [20], siendo x la concentración de Aluminio.

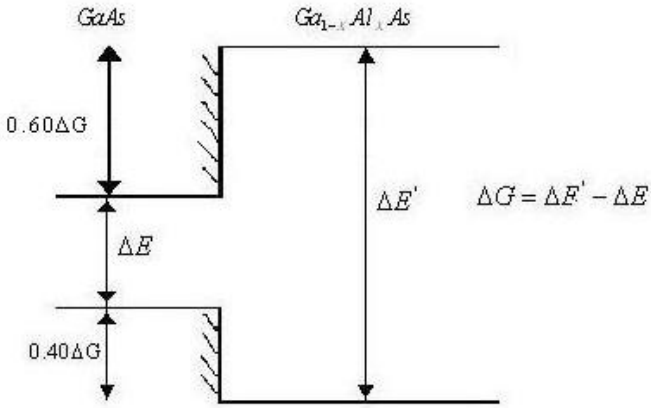

Figura 2.4: Esquema de la barrera de potencial en la heterojuntura.

La energía del estado base de la donadora neutra en el QWW, con potencial de confinamiento en Z, pueden ser encontrada mediante la solución de la ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \tag{2.2}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(\rho, z) - \frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r} - \vec{\xi}|}, \tag{2.3}$$

los vectores $\vec{\xi}$ y $\vec{r}$ son las posiciones del ion y electrón respectivamente, medidas respecto al centro del pozo, donde reemplazamos el potencial de atracción de la donadora $U = -|e|V_s$ con $V_s = +\frac{|e|}{\varepsilon r}$

Utilizando la aproximación de la masa efectiva, considerando la masa efectiva m^* y la constante dieléctrica ε de ambos materiales iguales, reescribimos el hamiltoniano (2.3) en unidades adimensionales, dividiendo la ecuación por el Rydberg efectivo $Ry^* = \frac{e^2}{2a_0^*\varepsilon}$; siendo a_0^* el radio de bohr efectivo, $a_0^* = \frac{\varepsilon h^2}{m^* e^2}$, obteniendo.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \frac{2}{|\vec{r} - \vec{\xi}|}, \tag{2.4}$$

donde $\hat{H}_0$ es el hamiltoniano para el electron libre

$$\hat{H}_0 = -\nabla^2 + V(\rho, z) \tag{2.5}$$

Cabe resaltar que los datos del Rydberg efectivo y radio de bohr efectivo se calcularon tomando los parámetros del material para el GaAs, donsde $m^* = 0{,}067m_e$ y $\varepsilon = 12{,}53$.

Con este hamiltoniano adimensional se calcula la energía de enlace para una impureza D^0, por métodos computacionales, con ayuda del método de Barrido Trigonométrico.

2.4 ELECTRON LIBRE

Para resolver el problema de autovalores para el electrón sin la presencia de la donadora en el sistema es necesario resolver el hamiltoniano $\hat{H}_0$:

$$\hat{H}_0 f_0 = E_0 f_0. \tag{2.6}$$

Al reescribir el hamiltoniano en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z), obtenemos una ecuación diferencial de segundo orden:

$$-\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}(\rho\frac{\partial}{\partial\rho})f_0 - \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial f_0}{\partial\varphi} - \frac{\partial^2 f_0}{\partial z^2} + V(\rho, z)f_0 = E_0 f_0. \tag{2.7}$$

Aprovechando que la ecuación anterior es completamente separable, se propone la función de onda f_0 como el producto de sus funciones:

$$f_0 = P(\rho)\phi(\varphi)Z(z),$$

donde ϕ debido a la simetría azimutal se toma como:

$$\phi(\varphi) = e^{-im\varphi}.$$

Separando la ecuación (2.7) se obtienen dos ecuaciones diferenciales

*Ecuación diferencial en (ρ)

$$\frac{\partial^2 P}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial\rho} + (E_\rho - \frac{m^2}{\rho^2})P = 0, \tag{2.8}$$

*Ecuación diferencial en (Z)

$$\frac{1}{Z}\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} - V_z = -E_z. \tag{2.9}$$

En la ecuación en la dirección radial (ρ), si $x = \sqrt{E_\rho}\rho$. tenemos

$$\boxed{\rho^2\frac{\partial^2 P}{\partial\rho^2}+\rho\frac{\partial P}{\partial\rho}+(x^2-m^2)P=0} \tag{2.10}$$

ECUACIÓN DE BESEL

tiene como solución

$$P(\rho)=AJ_m(x)+BN_m(x) \tag{2.11}$$

Si $x\to 0$ entonces el la función $Nm(x)\to\infty$ luego el coeficiente B es igual a cero.

Donde m es el numero cuántico angular y para el estado base que es el estado de nuestro interés es igual a cero ($m=0$).

De la ecuación diferencial en (z) tenemos

$$\frac{d^2Z}{dz^2}+(E_z-V_z)Z=0$$

Ecuación que tiene como solución

$$Z(z)=\begin{cases} BCos(K_z z) & ,\text{si } |z|<L/2 \\ \\ BCos(KzL/2)e^{-\gamma(|z|-L/2)} & ,\text{si } |z|>L/2 \end{cases}$$

$$k_z\ =\ \sqrt{E_z\ -\ V_z} \qquad \gamma=\sqrt{V_0-E_z}$$

Para calcular las constante A y B se utiliza la condición de normalización

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\psi\,d\Omega=1$$

$$A=\frac{\sqrt{2}}{RJ_1(K_\rho R)}.$$

$$B=[\frac{L}{2}+\frac{Cos(K_zL/2)}{\gamma}+\frac{Sen(K_zL)}{2K_z}]^{-L/2}.$$

3 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

3.1 PRINCIPIO VARIACIONAL DE SCHRÖDINGER

En general, los problemas de la Mecánica Cuántica no son exactos y una de las aproximaciones más usadas es el principio variacional, el cual utilizamos para minimizar el Hamiltoniano dado por la ecuación (2.4). Este Hamiltoniano no es separable, debido a la presencia del término de interacción electrostática entre el electrón y el ion, por lo cual se hace necesario utilizar métodos aproximados. Si minimizamos el funcional.

$$F[\psi] =< \psi|\hat{H} - E|\psi > \tag{3.1}$$

donde $\hat{H}$ y E son el Hamiltoniano y la energía del sistema, respectivamente, y ψ es una función de prueba. Minimizando el funcional $F[\psi]$ respecto a la función de prueba se obtiene

$$\delta F[\psi] =< \delta\psi|\hat{H} - E| > + < \psi|\hat{H} - E|\delta\psi >= 0 \tag{3.2}$$

puesto que $(\hat{H} - E)$ es autoadjunto, se tiene que:$< \psi|\hat{H} - E|\delta\psi >=< \delta\psi|\hat{H} - E|\psi >$

Entonces la ecuación (3.2) puede ser escrita como

$$2 < \delta\psi|\hat{H} - E| >= 0 \tag{3.3}$$

Y considerando que esta condición es valida para toda $\delta\psi$, debe cumplirse que

$$|\hat{H} - E|\psi >= 0$$

Por lo tanto, el problema variacional $F[\psi] =< \psi|\hat{H} - E|\psi >$, es equivalente a la ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{3.4}$$

Este es el principio variacional de Schrödinger y su ventaja radica en que se puede utilizar una función de prueba. la función de prueba puede estar expresada en términos de otra función; lo cual permite elegir una función más precisa para describir mejor al sistema físico en cuestión.

3.2 MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL

El Método de dimensión fractal se propone como un método sencillo para el cálculo de la energía de enlace para impurezas en heteroestructuras con diferentes potenciales de confinamiento, diferentes posiciones de la impureza y en presencia de campos externos entre otros, esto permite una simplificación en los cálculos. La ecuación de onda para el estado base de una impureza, en un espacio anisotrópico, es reducida a una ecuación similar a la del átomo de hidrógeno en un espacio efectivo isotrópico. Mikhailov y colaboradores. [16] encontraron que el Jacobiano de la transformación, para la ecuación de onda renormalizada, esta dado por la distribución radial de la densidad de carga correspondiente al estado base del electrón libre en la heteroestructura. Para dar una interpretación geométrica a este resultado se considera la densidad de carga como un objeto fractal y se analiza un sistema de cajas esféricas, con el centro en la posición de la donadora. Siguiendo el procedimiento de Mandelbrot [15], se define la dimensión de este objeto como un parámetro de escalamiento que relaciona la carga dentro de las cajas con su radio. Se encontró que el Jacobiano de volumen para el objeto, que determina la dimensión fractal, coincide con el Jacobiano de la ecuación de onda renormalizada. Esta es la razón por la cual se llamó a este procedimiento variacional método de dimensión fractal. En este procedimiento la dimensión fractal depende no sólo de la geometría de la heteroestructura sino también de la distancia

electrón-ión.

El método de la dimensión fractal propone una función de onda para la donadora como el producto entre la función para el electrón libre, f_0, y una función envolvente $\phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|)$, la cual posee simetría esférica, introducida para describir la modificación de la distribución de probabilidad electrónica, producida por la interacción de Coulomb, entre la impureza y el electrón. La función de onda para la donadora se expresa entonces como:

$$\psi_{D^0}(\vec{r}) = f_0\phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|) \tag{3.5}$$

La función f_0 junto con la Energía E_0 se obtuvieron a partir de la solución del problema de valores propios para el electron libre, ver sección 2.4, dado por

$$\hat{H}_0 f_0 = E_0 f_0 \tag{3.6}$$

Resuelta la ecuación de schrödinger para el electrón libre en el sistema, se conoce su función de onda y la energía del estado base de la partícula. Posteriormente se procede a resolver la ecuación de schrödinger para el sistema en presencia de la donadora, la cual rompe con la simetría, por lo tanto no se puede resolver analíticamente. La ecuación de Schrödinger para el sistema con la impureza presente esta dada por

$$\hat{H}_{D^0}\psi_{D^0} = E_{D^0}\psi_{D^0} \tag{3.7}$$

Siendo $\hat{H}_{D^0}$ y E_{D^0} el Hamiltoniano del sistema con la donadora presente y la energía de la donadora, respectivamente. Utilizando la expresión para $\psi_{D^0}(\vec{r})$ se obtiene

$$\hat{H}\left(\psi_0\,\phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|)\right) = E_{D^0}(\psi_0\,\phi(|\vec{r} - \vec{\xi}|)) \tag{3.8}$$

El problema consiste ahora en encontrar la función de correlación que satisfaga el principio variacional de Schrödinger, con lo que se consigue una minimización de la energía para el sistema en su estado base.

Minimizando el funcional:

$$F[\phi] =< f_0\phi|\hat{H}_{D^0} - E_{D^0}|f_0\phi > \tag{3.9}$$

y utilizando el hamiltoniano adimensional para la donadora $\hat{H}_{D^0} = \hat{H}_0 - 2/r$ se obtiene

$$F[\phi] =< f_0\phi| - \nabla^2 + V - 2/r - E_{D^0}|f_0\phi > \tag{3.10}$$

con lo cual el funcional dado por la ecuación anterior se componen de 2 integrales múltiples

$$F[\phi] = I_1 + I_2 \tag{3.11}$$

siendo

$$I_1 =< f_0\phi| - \nabla^2|f_0\phi >= - < (V - E_0)f_0^2\phi^2 > - < \phi\nabla(f_0^2\nabla\phi) > \tag{3.12}$$

e

$$I_2 =< V - 2/r - E_{D^0}|f_0^2\phi^2 > \tag{3.13}$$

reescribiendo el funcional (3.10) en terminos de I_1 e I_2 se obtiene

$$F[\phi] = \int_0^\infty d\overrightarrow{r}\left[f_0^2(r)[\phi^{'}(r)^2 + (E_0 - 2/r - E)\phi^2(r)]\right]. \tag{3.14}$$

Después de una corta manipulación algebraica se llega a

$$F[\phi] = \int_0^\infty J(r_0)\left[\phi^{'2}(r) + (E_0 - 2/r - E_{D^0})\phi^2\right]dr_0 \tag{3.15}$$

Donde el jacobiano, $J(r_0)$, esta dado por

$$J(r_0) = \int_{-r}^{r} f_0^2(\overrightarrow{r})\delta((\vec{r}) - \vec{r_0})d\vec{r} \tag{3.16}$$

El funcional dado por la ecuación (3.15) es de la forma

$$F[\phi] = \int \mathcal{L}(\phi, \phi^{'}, r)dr \tag{3.17}$$

El problema de minimizar el funcional anterior equivale a resolver la ecuación de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dr}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi'}\right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0 \tag{3.18}$$

Por lo cual a partir de la ecuación (3.15) se obtiene

$$-\frac{1}{J(r)}\frac{d}{dr}\left[J(r)\frac{d\phi(r)}{dr}\right] + V_c\phi(r) = (E_{D^0} - E_0)\phi(r), \tag{3.19}$$

$$E_b = (E_0 - E_{D^0}). \tag{3.20}$$

La ecuación anterior se resolverá usando método de barrido trigonométrico.

3.3 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO

El método de barrido trigonométrico es un método numérico de alta precisión que permite resolver ecuaciones diferenciales de la forma.

$$-\frac{1}{S(r)}\frac{d}{dr}\left[S(r)\frac{d\phi(r)}{dr}\right]+V_c\phi(r)=(E_b-E_0)\phi(r) \tag{3.21}$$

En este método se utilizan coordenadas polares de Poincaré para reducir la ecuación de segundo orden a una de primer orden.

Realizando el cambio de variables.

$$\phi(r)=A(r)cos\theta(r) \quad \phi^{'}(r)=A(r)sen\theta(r) \tag{3.22}$$

Donde $A(r)$ y $\theta(r)$ representan la amplitud y la fase de las curvas de Poincaré en coordenadas en coordenadas polares.

Sustituyendo en la ecuación diferencial (3.21) se obtiene la ecuación de primer orden, para θ, dada por

$$\theta^{'}(r)=-\left[sen^2\theta(r)+h(r)sen\theta(r)cos\theta(r)+q(r)cos^2\theta(r)\right], \tag{3.23}$$

donde

$$h(r)=\frac{S^{'}(r)}{S(r)} \quad \text{y} \quad q(r)=\ E_b\ -\ V_c.$$

Ecuación que puede resolverse numéricamente utilizando cualquier método convencional, como el método de Rungge-Kutta para diferentes valores de la energía, motivo por el cual se considera la energía como un parámetro adicional, y por esto se dice que $\theta^{'}(r,E_b)$.

Por otra parte, la amplitud es utilizada para determinar la función de onda; y está dada por la expresión:

$$A(r) = exp\left[\int_0^r (1 - q(r))sen\theta(r)cos\theta(r) - h(r)sen^2\theta(r)dr\right] \tag{3.24}$$

Tanto la función $\theta(r)$ como $A(r)$ decrecen con el aumento de (r); por tal razón la función de onda radial se anula, y se obtiene un nodo radial. Como $\psi(r, E_b)$ cuando $r \longrightarrow \infty$, la curva de Poincaré debe terminar en algún punto sobre la ordenada.

4 APLICACIÓN DEL MÉTODO DE DIMENSIÓN FRACTAL EN EL SISTEMA

Para calcular la energía de enlace del estado base de una impureza donadora neutra D^0 en un pozo cuántico embebido en un hilo cuántico por el método variacional de Dimensión Fractal, es necesario minimizar el funcional (3.9) del sistema, teniendo en cuenta el potencial de confinamiento del sistema.

4.1 MODELO DE CONFINAMIENTO

El potencial de Confinamiento de la heteroestructura mostrada en la figura 2.3, esta dado por:

$$V(\rho, z) = \begin{cases} V_\rho \begin{cases} 0 & ,\text{si } \rho < R \\ \infty & ,\text{si } \rho > R \end{cases} \\ \\ V_z \begin{cases} 0 & ,\text{si } |z| < L/2 \\ V_0 & ,\text{si } |z| > L/2 \end{cases} \end{cases}$$

Si reemplazando $V(\rho, z)$ en el funcional (3.9) obtenemos

$$F[\phi] =< f_0(\rho, z)\phi| - \nabla^2 + V(\rho, z) - \frac{2}{r} - E_{D^0}|f_0(\rho, z)\phi > \tag{4.1}$$

La ecuación (4.1) es el funcional que al minimizar se obtiene la ecuación de Euler-Lagrange (3.20) como se demostró en el procedimiento del Método de Dimensión Fractal. Ecuación diferencial con la cual se puede calcular el valor de la energía de enlace del estado base de la impureza, y para la cual es necesario conocer el jacobiano.

4.2 JACOBIANO

Continuando con el procedimiento descrito antes para el Método de Dimensión Fractal, es necesario conocer el jacobiano del sistema, el cual viene dado por:

$$J(r) = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_0^{\infty} \rho d\rho \, f_0^2(\rho, z)\delta\left(\sqrt{\rho^2 + z^2} - r\right) \tag{4.2}$$

Donde se es necesario conocer la función para el electron libre o desacoplado en el sistema $f_0(\rho, z)$.

$$f_0(\rho, z) = \begin{cases} f(\rho) \begin{cases} AJ_0(\sqrt{E_\rho}\rho) & \text{, si } \rho < R \\ 0 & \text{, si } \rho > R \end{cases} \\ \\ f(z) \begin{cases} BCos(K_z z) & \text{, si } |z| < L/2 \\ BCos(K_z L/2)e^{-\gamma(|z|-L/2)} & \text{, si } |z| > L/2 \end{cases} \end{cases}$$

El jacobiano que se obtiene al reemplazar la función $f_0(\rho.z)$, representa la probabilidad de encontrar el electrón en caja esférica de radio r y r+dr, y para nuestro sistema presenta la siguiente forma:

$$J(r) = 2\pi r \left\{ \int_{L/2}^{-L/2} J_0^2(\sqrt{E_\rho}\rho_0) Cos^2(K_z z) dz + 2\int_{L/2}^{\infty} J_0^2(\sqrt{E_\rho}\rho_0) \exp^{-2\gamma(|z|-L/2)} dz \right. \quad (4.3)$$

$$\text{donde } \rho_0 = \sqrt{r^2 - z^2}.$$

El Jacobiano (4.3) es necesario resolverlo para reemplazar en la ecuación diferencial de Euler-Lagrange (3.20).

4.3 BARRIDO TRIGONOMÉTRICO EN EL SISTEMA

Con el propósito de resolver la ecuación diferencial

$$-\frac{1}{J(r)}\frac{d}{dr}\left[J(r)\frac{d\phi(r)}{dr}\right] + V_c\phi(r) = (E_{D^0} - E_0)\phi(r),$$

la cual nos permite encontrar un valor aproximado de la energía de enlace de la impureza D^0 en el sistema, se utilizara el método de Barrido Trigonométrico, descrito en la sección 3.3.

Es conveniente expresar el jacobiano como $J(r) = r^2 P(r)$, donde $P(r)$ se toma como la integral escrita en la ecuación (4.3), para luego obtener la relación $J^{'}(r)/J(r)$, necesaria para continuar el procedimiento descrito en el Método de Barrido Trigonométrico.

Escogemos

$$w(r) = \frac{J^{'}(r)}{J(r)} = \frac{2}{r} + (lnP(r))^{'} \quad q(r) = [\frac{2}{r} + E_b] \quad (4.4)$$

Con el fin de reescribir la ecuación diferencial (3.20) de la forma.

$$\phi^{''}(r) + w(r)\phi^{'}(r) + q(r)\phi = 0 \quad (4.5)$$

Con la intención de obtener las condiciones de contorno necesarias para resolver el problema de Cauchy , analizamos el comportamiento de la ecuación anterior para cuando $r \longrightarrow 0$ y $r \longrightarrow \infty$, .

Primero se analiza cuando $r \longrightarrow 0$, donde notamos que los términos que presentan indeterminación en la ecuación (4.5), son.

$$\frac{2}{r}\phi^{'}(r) + \frac{2}{r}\phi(r) = 0 \tag{4.6}$$

entonces, cuando $r \longrightarrow 0$, obtenemos la siguiente relación en las coordenadas de poincaré (coordenadas utilizadas por el método de barrido para reducir el orden de la ecuación diferencial).

$$\frac{\phi^{'}(0)}{\phi(0)} = \frac{sen\theta(0)}{cos\theta(0)} = -1$$

entonces

$$\theta(0) = tan^{-1}(-1). \tag{4.7}$$

En el caso cuando $r \longrightarrow \infty$, la función $\phi \longrightarrow 0$

se encuentra que.

$$\phi(\infty) = A(\infty)cos\theta(\infty) = 0 \quad \longrightarrow \quad \theta(\infty) = -\pi/2 \tag{4.8}$$

Estas condiciones iniciales encontradas son necesarias, junto con la ecuación diferencial de primer orden [3.23], para obtener el valor de la energía de enlace de la impureza donadora neutra D^0 por método numérico (Barrido Trigonometrico).

En resumen debemos resolver la ecuación diferencial

$$\theta^{'}(r) = -\left[sen^2\theta(r) + w(r)sen\theta(r)cos\theta(r) + q(r)cos^2\theta(r)\right] \tag{4.9}$$

Con condiciones de frontera

$$\theta(0) = tan^{-1}(-1) \qquad \theta(\infty) = -\pi/2 \tag{4.10}$$

5 ANÁLISIS DE RESULTADOS

Los cálculos realizados en este trabajo se obtuvieron con valores del radio de bohr efectivo $a_0^* = 9{,}91nm$ y el Rydberg efectivo $Ry^* = 5{,}78mev$ y para una altura de la barrera de potencial en el eje axial de $V_e \approx 43Ry^*$

5.1 ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA D^0 EN UN QW

Primero calculamos el valor de la energía de enlace para una impureza donadora neutra centrada en un pozo cuántico (QW) de materiales GaAs-(GaAl)As, con el fin de comparar los resultados y la efectividad del programa realizado, también se analiza el efecto del ancho sobre la energía de enlace. Los resultados que se obtuvieron se compararon con los disponibles en la literatura. Cabe resaltar que en las gráfica todos los valores de energía y de longitud son dados en unidades de Rydberg efectivo Ry^* y de Radio de Bohr a_0^* respectivamente.

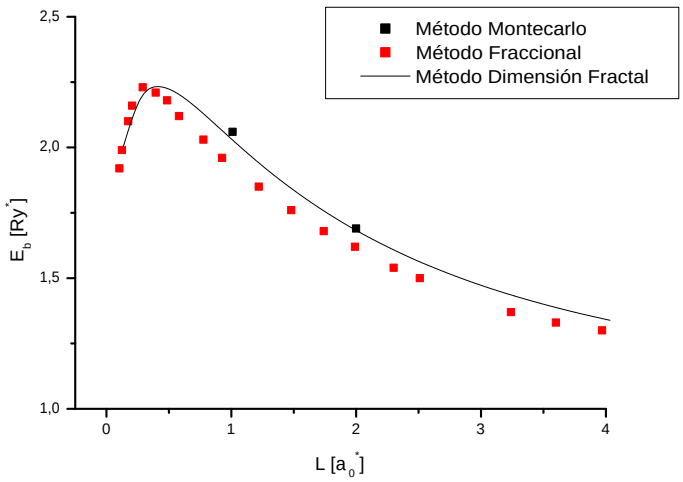

Figura 5.1: Energía de enlace de una D^0 centrada en un QW.

En la gráfica 5.1 se muestra la energía de enlace de la D^0 en función del ancho (L). Este calculo se realizo como un caso particular en el sistema donde el radio del hilo es mucho mayor que el ancho del disco tomando (R>>L), con el fin de disminuir el efecto del confinamiento en la dirección radial y así acercarnos a un QW de confinamiento finito de material GaAs-(GaAl)As. Se observa que nuestro resultado pueden considerarse como muy bueno, comparado con los obtenidos por los otros métodos, tomando en cuenta que el cálculo realizado por Pang y colaboradores. [12] puede considerarse como exacto, debido a la alta precisión del método Montecarlo.

5.2 ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA D^0 EN UN QWW

Se realiza una comparación similar para un Hilo Cuántico Cilíndrico, con el fin de comprobar los resultados para el caso particular, en donde se considera el ancho del disco mucho mayor que el Radio del hilo con ($L >> R$), de manera que se desprecie el confinamiento en el eje del hilo, simulando en nuestro modelo un QWW.

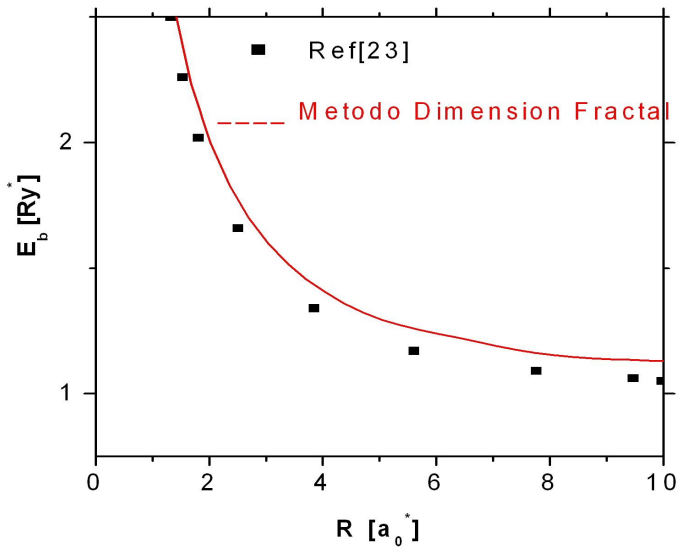

Figura 5.2: Energía de enlace de una D^0 centrada en un QWW.

En la gráfica 5.2, se muestra la energía de enlace E_b de la impureza D^0 centrado en el QWW cilíndrico de GaAs con barrera infinita en dirección radial, y analiza el efecto del radio en la energía de enlace. Observamos que nuestro calculo da un resultado comparable con el obtenido por Villamil et al. [7].

5.3 ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA D^0 EN UN DISCO CUÁNTICO

También se realiza la comparación de resultados obtenidos para discos con confinamiento infinito tanto radial como en la dirección de crecimiento, con los obtenidos por Gang et al [9], donde se analiza el comportamiento de la energía de enlace en función del Radio, para diferentes valores en el ancho del disco (**L**).

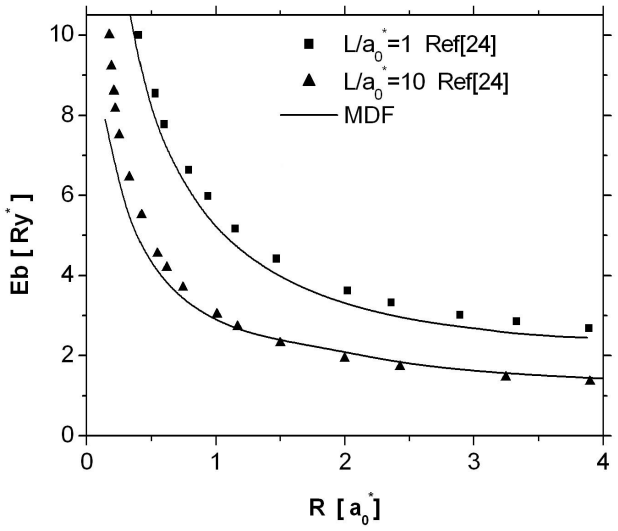

Figura 5.3: Energá de enlace de una D^0 centrada en Discos Cuánticos.

Como se puede apreciar en las gráficas presentadas hasta ahora los resultados obtenidos en este trabajo presentan un comportamiento similar a los que se pueden encontrar en la literatura, obtenidos por otros métodos.

5.4 ENERGÍA DE ENLACE EN FUNCIÓN DEL ANCHO DEL DISCO

Con base al buen comportamiento de las energías de enlace para una D^0 en la comparaciones realizadas hasta el momento, limites ($\mathbf{R} >> \mathbf{L}$) y ($\mathbf{L} >> \mathbf{R}$), se procede a calcular la energía de enlace para diferentes valores de del radio del disco (R), analizando el comportamiento en función del ancho del disco (L) para cada uno de ellos.

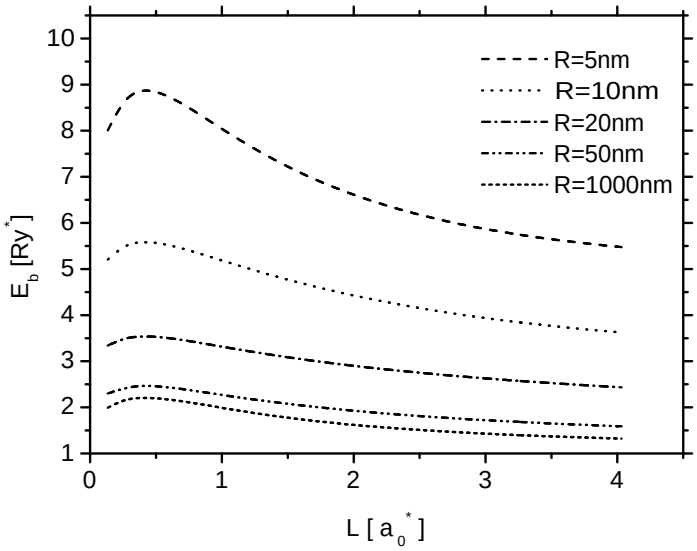

Figura 5.4: Energía de enlace de una D^0, centrada en un Disco embebido en un Hilo cuántico en función del ancho, para diferentes radios del hilo

En la gráfica 5.4 se observa un incremento en el valor máximo de la energía de enlace, a medida que disminuye el valor del radio en el hilo cuántico, incremento causado por un mayor confinamiento en la dirección radial.

Para valores pequeños del ancho $L < 1a_0^*$ el valor de la energía de enlace se incrementa hasta su punto máximo y luego esta sufre una disminución, que varia para los diferentes valores del radio, proceso análogo al observado en un pozo cuántico con potencial finito (observese figura 5.1), que se encuentra relacionado con un valor limite en el valor de energía del estado base del electron libre en la dirección axial, donde la función sufre un desborde.

5.5 ENERGÍA DE ENLACE EN FUNCIÓN DEL RADIO DEL DISCO

Una gráfica similar se realizo de la energía de enlace para diferentes valores del ancho del disco cuántico (L) en función del radio del hilo cuántico (R)(Ver figura).

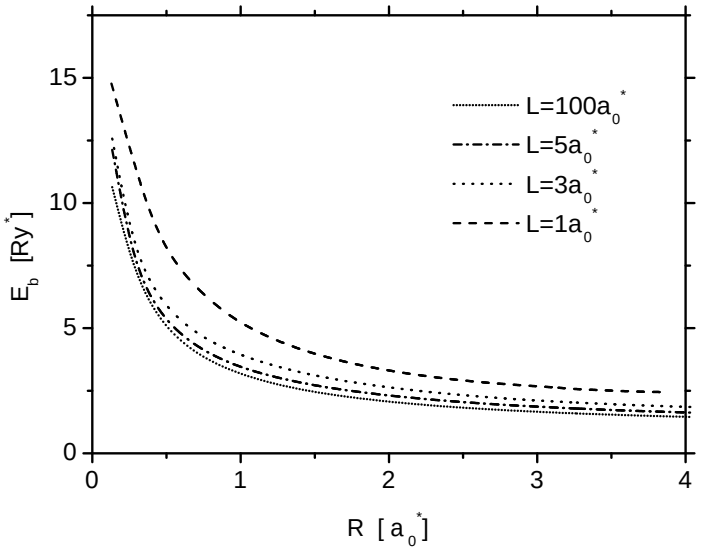

Figura 5.5: Energía de enlace de una D^0, centrada en un Disco embebido en un Hilo cuántico en función del Radio, para diferentes anchos.

Similar a la figura(5.4), se encontró un aumento en los valores de la energía de enlace a medida que se disminuye el valor del radio del hilo. Comportamiento debido a un mayor confinamiento en la dirección radial. Para valores de $R < 1a_0^*$, el incremento en la energía es significativo, y no sufre ningún tipo de disminución, comportamiento esperado por tener un confinamiento radial infinito en el sistema, por lo que no se encuentra un valor limite en la energía del estado base para el electrón en la dirección radial.

5.6 GRÁFICA 3D

La figura (5.6), tiene como fin recolectar la información de las figuras (5.4 - 5.5), en un gráfica en tres dimensiones, que permite analizar el comportamiento de la energía a medida que se realiza la variación de los parámetros geométricos (R) y (L) simultáneamente.

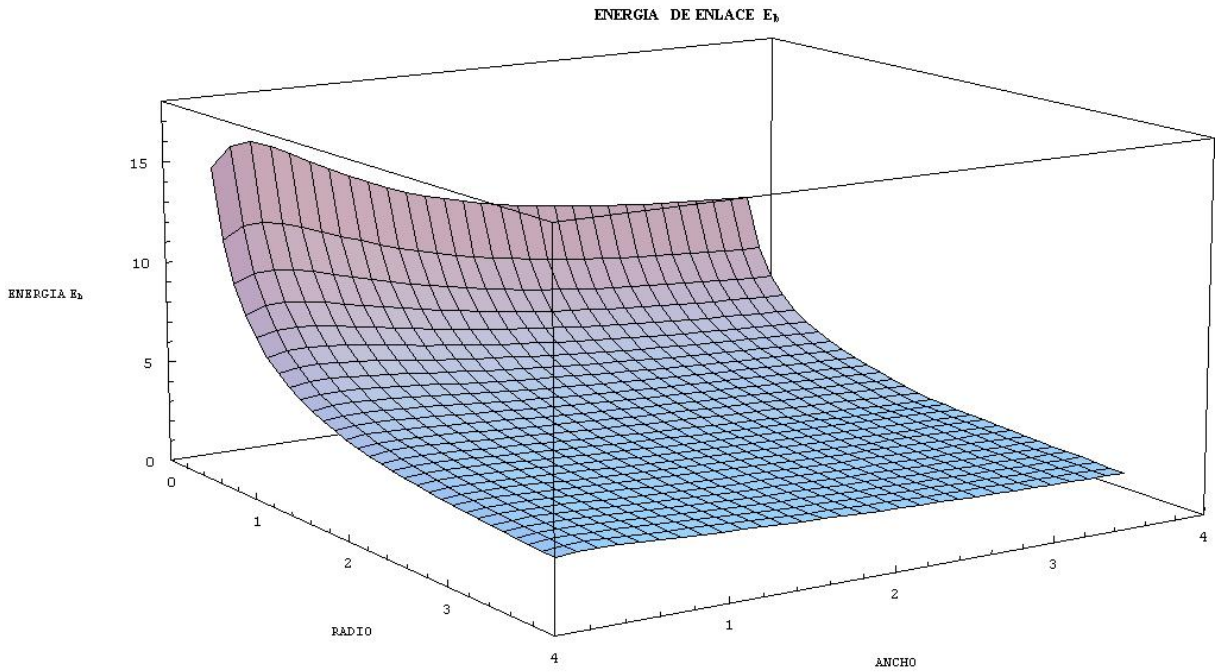

Figura 5.6: Energía de enlace 3D, en función de sus parámetros geométricos (R) y (L).

CONCLUSIONES

Se presento y se uso el método de dimensión fractal, como un procedimiento variacional simplificado para calcular la energía de enlace de impurezas donadora neutra confinadas en heteroestructuras semiconductoras.

Usando el método de Dimensión Fractal se logró reproducir los resultados de la energía de enlace del estado base para impurezas D^0 centradas, en heteroestructuras como QWs, QWWs y discos Cuánticos. Los resultados obtenidos mostraron gran eficiencia en comparación con métodos variacionales convencionales.

Por otra parte se presentaron gráficas de energía de enlace para una D^0 en función de los parámetros geométricos del disco cuántico, donde se pudo apreciar el incremento en la energía de enlace ha medida que se disminuyen las dimensiones. Se observo la diferencia en el comportamiento de la energía de enlace para confinamiento finito e infinito. Se sintetizo esta información obtenida en una gráfica 3D, donde se encuentra una mayor información de la energía de enlace de la impureza para diferentes tamaños del disco, mostrando una dependencia general con el tamaño del disco cuántico.

Como trabajo posterior se pretende analizar la influencia en la energía de enlace de la impureza D^0 de un campo magnético o eléctrico aplicado en la dirección axial., también de la posición de la donadora en el disco, y por último obtener los siguientes estados energéticos.

BIBLIOGRAFÍA

[1] J. Cibert, P. M. Petroff, G. J. Dolan, S. J. Pearton, A. C. Gossar, and J. H. English, Appl, Phys.lett. (49),1275 (1986).

[2] Jhon H. Davis, *The Physics of low Dimensional Semiconductors - an Introduction.*, Cambridge University Press(1998), p 80.

[3] G. Bastard, Phys. Rev. B **24**,4714(1981).

[4] Bryant. G.W., Phys. Rew.B **29**, 6632 (1984).

[5] Bryant. G. W., Phys. Rew. B **31**, 7812 (1985).

[6] S.Fraizzoli,P.Bassani,and R. Buckzko,Phys.Rev. B**41**, 5096 (1990).

[7] P. Villamil,N. Porras-Montenegro,J.Phys.Condens Matter.**10**, 10599 (1998).

[8] J. L. Zhu, J. H. Zhao and J. J. Xiong,Phys.Rev. B **50**, 1832 (1994).

[9] Gang Li,S.V.Branis,K.K.Bajaj,phys. Rev.B **47**, 15735 (1993).

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

[11] A. GonzalezJ and I. Mikhailov, int. J. Mod. Phys. B**11**, 3469 (1997).

[12] T.Pang and S.G.Louie,Phys.Rev.lett **65**, 1635 (1990).

[13] M. de Dios-Leyva, A.Bruno-Alfonso, A.Matos-Abiagu, and L.E oliveira,J. Phys.Condens Matter **9**,8477-8488 (1997).

[14] Lefevre, P. Christol. , H. Mathieu., phys. Rev. B **61**, 13104 (2000).

[15] B. B .Mandelbrot *the Fractal Geometry of Nature* (freeman, san francisco,(1982).

[16] I. D. Mikhailov and F. J. Betancur, Phys.Rev. B **67**; Phys.Stat.Sol.234(b).590(2002); Phys.stat.Sol.(c)0,747-753 (2003).

[17] M.S.Gudiksen, L.J.Lauhom, J.Wang, D.C. Smith, and C.M. Leiber, Nature (London). Rev**415**, 617 (2002).

[18] L.C. Lew Yan Voon,M.Willataen,J.Appl.Phys. Rev**93**, 9997 (2003).

[19] John P. Mckelvey, *fisica del Estado Solido y de Semiconductores* Limusa 3^{ra}(1989)

[20] k.k.Bajaj and Ronal L. Greene,phys.Rev. B **31**913(1985).