2. EFECTO DE LA MORFOLOGÍA Y DEL CAMPO MAGANÉTICO SOBRE EL ESPECTRO ENERGÉTICO DE UNA D^0 Y DE UN IÓN D^- CONFINADOS EN SAQDs

Uno de los avances tecnológicos más importantes en el crecimiento de materiales semiconductores para la industria opto-electrónica, ha sido el de introducir impurezas dentro de la red cristalina. Esta posibilidad permite que el espectro de energía sea diseñado de acuerdo a las potenciales aplicaciones. Los átomos que se introducen en el cristal con un electrón extra a los requeridos para formar los enlaces químicos con los átomos vecinos, se denominan donadores $\left(D^0\right)$ y tienen la característica fundamental que se ionizan fácilmente al donar su electrón al cristal. Cuando este donador se coloca dentro de una heteroestructura de baja dimensionalidad, el número de grados de libertad en el movimiento del electrón disminuye, haciendo que su situación sea más compleja que en el bloque, ya que la energía de enlace se vuelve fuertemente dependiente del potencial de confinamiento y de la posición de la donadora.

Al realizar un estudio de la energía de enlace de las donadoras neutras en el pozo $D^0(P)$ y en la barrera $D^0(B)$, se ha demostrado [123] que los electrones en el pozo están más fuertemente ligados que los electrones en la barrera. Esto significa que mediante un dopaje selectivo es posible transferir el electrón de la barrera al pozo y éste al ser atrapado por la $D^0(P)$ forma un ión D^- mucho más estable que en el volumen. Este proceso de ionización descrito por Larsen [124] se puede describir mediante la siguiente reacción: $D^0(P)+D^0(B)=D^-(P)+D^+(B)$.

La detección experimental del ión D^- es todo un reto debido a que sus estados son meta-estables y se pueden destruir térmicamente con gran facilidad, haciendo que su importancia práctica sea muy limitada. El descubrimiento del D^- en semiconductores de Si se debe a Dean, Haynes y Flood [125], mientras que la historia de los D^- en sistemas de 2D es más reciente y su hallazgo fue reportado por Huant, Najda y Etienne [26] usando experimentos magneto-ópticos.

Las energías del estado base para la D^0 y para el ión D^- confinados en un punto cuántico esférico (SQD), calculadas por métodos variacionales [126] y expansión por series[127], demuestran que la razón σ entre las energías de enlace del ión D^- y la donadora neutra, $\sigma = E_b(D^-)/E_b(D^0)$ es más grande que para otros tipos de estructuras, llegando a alcanzar la proporción

1:3. Mediante el uso del método de diagonalización [124] se ha podido calcular la energía de enlace para una D^0 descentrada dentro de un SQD y los resultados demuestran que el espectro es muy sensible a la posición de la donadora dentro del SQD. Estudios variacionales realizados sobre el ión D^- centrado en un SQD, demuestran que los niveles de energía para el estado base y para los estados excitados, tanto con espín singlete como con espín triplete, dependen de la profundidad del potencial y del radio del SQD[128].
Los efectos del tamaño del QD y de la altura del potencial sobre el espectro energético de una D^0 y de un ión D^-, confinados en un anillo toroidal muy estrecho, han sido reportados recientemente [129] usando el modelo de aproximación adiabática.

De otro lado, el método de dimensión fractal [79-130] ha demostrado ser muy efectivo a la hora de calcular el efecto de la posición de una D^0 y de un ión D^- sobre la energía del estado base, cuando ellas se encuentran confinadas dentro de diferentes tipos de heterosestructuras semiconductoras: pozos, hilos y puntos cuánticos esféricos. Los resultados alcanzados con este método, presentan una excelente concordancia con los obtenidos mediante Monte Carlo [18], diagonalización [131] y expansión por series [127,132].

A pesar de que los puntos cuánticos esféricos no se han fabricado experimentalmente usando el método de S-K, la mayoría de trabajos que estudian el espectro de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^-, asumen que estos sistemas hidrogenoides se hallan confinados en este tipo de puntos cuánticos, debido a que su geometría permite simplificar los cálculos. Una de las razones por la cual son muy escasos los trabajos que analizan el espectro de una D^0 y de un D^- confinados en puntos cuánticos de forma de disco, pirámide truncada, lente, pirámide, etc, está relacionada con la dificultad que entrañan sus cálculos. Para que se tenga una idea, en el caso del espectro energético del D^- se presentan integrales multidimensionales de orden 6, las cuales requieren de un gran esfuerzo computacional para su evaluación a fin de garantizar la precisión requerida. No obstante esta dificultad y ante la escasez de trabajos que estudien el espectro energético de los sistemas D^0 y D^- en SAQDs, el presente capítulo tiene como objetivo fundamental analizar de manera exhaustiva, la influencia que tienen el tamaño, la forma y la posición de la impurezas, sobre la energía de enlace de una D^0 y de un ión D^- confinados en SAQDs. En el caso particular de la formación del ión D^-, a partir de la transferencia de un electrón desde de una donadora en la barrera a una donadora en el pozo, se analiza como se refuerza este proceso por la aplicación de un campo magnético. El estudio energético para una impureza neutra D^0 y un ión D^- descentrado en un SAQD con diferentes

morfologías y en presencia de campo magnético, se realizará usando el método de dimensión fractal y la aproximación adiabática.

2.1 MODELO

Para efectos de cálculo numérico se consideran cuatro diferentes tipos de QDs de $In_{0.55}Al_{0.45}As/Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ con simetría cilíndrica cuyas imágenes 3D se presentan esquemáticamente en la figura I.5: b) disco, c) lente, d) pirámide cónica, y e) pirámide truncada. Las funciones que describen la variación del espesor del punto cuántico con la distancia radial al eje de simetría se presentan en la tabla I.1 y el potencial de confinamiento al que se encuentran sometidas las partículas está definido por la ecuación I.1.

Debido a que en el presente capítulo, el mayor esfuerzo está orientado a determinar el efecto que tienen la morfología, el tamaño del punto y la posición de la impureza sobre el espectro de energía de una D^0 y un D^-, en los cálculos que acá se realicen, no serán tenidos en cuenta los efectos asociados con las variaciones de los parámetros del material, es decir, diferencias relacionadas con las constantes dieléctricas y las masas efectivas de los electrones en la región del pozo y de la barrera.

El Hamiltoniano para el estado base de un ión D^- en SAQD y en presencia de un campo magnético uniforme orientado en la dirección de crecimiento z del QD, se puede escribir como:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\tau_1,\tau_2)=\hat{H}_0(\mathbf{r}_1,\tau_1)+\hat{H}_0(\mathbf{r}_2,\tau_2)+2\tau_1\tau_2/|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2| \qquad (2.1a)$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}_i,\tau)=-\nabla_i^2+V(\rho_i,z_i)+\gamma^2\rho_i^2/4-2\tau/|\mathbf{r}_i-\boldsymbol{\xi}|;\quad i=1,2 \qquad (2.1b)$$

donde $\boldsymbol{\xi}=(\xi_\rho,\xi_z)$ y $\mathbf{r}_i=(\boldsymbol{\rho}_i,z_i)$ definen los vectores de posición del ión y de los electrones 1 y 2, respectivamente.

En la escritura de los Hamiltonianos (2.1a) y (2.1b) se han introducido parámetros artificiales τ_1, τ_2 y τ con el propósito de describir diferentes situaciones. Por ejemplo, si en el Hamiltoniano uniparticular (2.1b) se hace $\tau=0$ o $\tau=1$, entonces se tiene un electrón libre y una donadora neutra, respectivamente. Pero si simultáneamente se hacen $\tau_1=\tau_2=1$, entonces se obtiene un ión D^-. Las funciones de onda para el electrón libre, $f_0(\mathbf{r})$ la donadora neutra, $\Psi_{D^0}(\mathbf{r})$ y la donadora cargada negativamente, $\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$, así como sus correspondientes energías más bajas E_0, $E(D^0)$ y $E(D^-)$ se pueden encontrar como soluciones de los respectivos problemas de autovalores:

$$\hat{H}_0(\mathbf{r},\tau=0)f_0(\mathbf{r}) = E_0 f_0(\mathbf{r}) \tag{2.2a}$$

$$\hat{H}_0(\mathbf{r},\tau=1)\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = E(D^0)\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) \tag{2.2b}$$

$$\hat{H}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\tau_1=1,\tau_2=1)\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = E(D^-)\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) \tag{2.2c}$$

Para determinar la existencia de estados ligados para las donadoras neutras y cargadas negativamente en SAQDs, se ha definido en [128] las energías de enlace $E_b(D^0)$ y $E_b(D^-)$, respectivamente. Estas cantidades están asociadas a la mínima energía requerida para transferir un electrón desde el pozo a la barrera. Para ayudar a entender este concepto, en la figura 2.1 se ha hecho una representación esquemática de una donadora neutra D^0 ligada a su único electrón y de un ión D^- ligado a sus dos electrones, así como de sus respectivos estados base de energía $E(D^0)$ y $E(D^-)$.

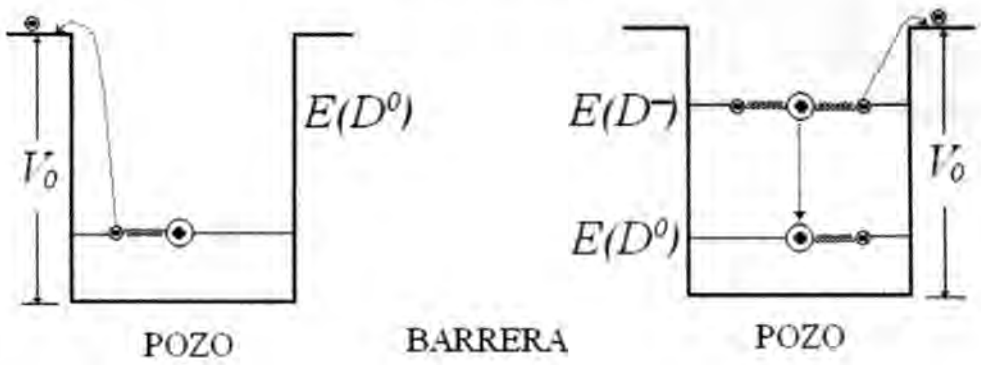

Figura 2.1 Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el potencial de confinamiento V_0

Las reacciones que tienen lugar durante la transferencia del electrón desde el pozo hacia la barrera se pueden describir así:

A. DONADORA NEUTRA: $D^0(P) \rightarrow D^+(P) + e^-(B)$

Un electrón ligado a la donadora en el pozo se transforma en una donadora ionizada positivamente fija en el pozo (P) y un electrón en la barrera (B)

B. DONADORA CARGADA NEGATIVAMENTE: $D^-(P) \rightarrow D^0(P) + e^-(B)$

Una donadora cargada negativamente confinada en el pozo (P) se transforma en una donadora neutra en el pozo (P) y un electrón en la barrera (B).

Una vez calculadas las energías del estado base, $E(D^0)$ y $E(D^-)$, las energías de enlace para una D^0 y un ión D^- se pueden expresar, respectivamente como:

$$E_b(D^0) = V_0 - E(D^0) \tag{2.3a}$$

$$E_b(D^-) = V_0 + E(D^0) - E(D^-) \tag{2.3b}$$

Nótese como la energía de enlace da información conjunta acerca de las propiedades, tanto del donador en el pozo como de la barrera, la cual se caracteriza a través del potencial de confinamiento V_0.

Con relación a la definición exacta de la energía de enlace para una D^0 y un ión D^-, no hay un consenso unánime porque otros autores [126, 131] la definen para el caso del D^0 como la diferencia de los autovalores de los Hamiltonianos $\hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau = 0)$ y $\hat{H}_0(\mathbf{r}, \tau = 1)$ para el caso del D^- la definen como $\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1 = 1, \tau_2 = 0)$ y $\hat{H}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \tau_1 = 1, \tau_2 = 1)$.

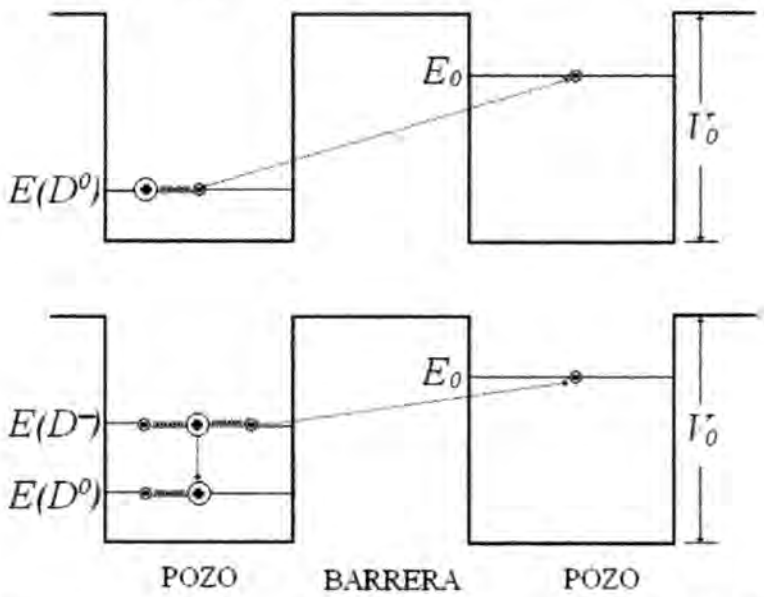

Figura 2.2 Representación esquemática de los niveles de energía de una donadora neutra D^0 y de un ión D^- en un pozo y su comparación con el nivel de energía para el estado base de un electrón libre en un segundo pozo.

Para ayudar a comprender el significado de esta definición de energía de enlace, vamos a basarnos en la figura 2.2

Esta energía así definida por los autores [126,131] se puede interpretar como la energía necesaria parta liberar un electrón, bien sea desde la donadora o del ión D^- y moverlo al estado más bajo del electrón libre confinado en un segundo QD. Este proceso no se puede llevar a cabo en un QD aislado, porque si así ocurriera, entonces el potencial atractivo entre el electrón y el centro D^+ , en el caso descrito en la parte superior de la figura 2.2 o entre el electrón y la donadora neutra D^0 en el caso descrito en la parte inferior de la figura 2.2, inmediatamente podría ligar nuevamente al electrón y se reestablecería el sistema original D^0 y D^-, respectivamente. Una energía de enlace así definida involucra un proceso de tunelamiento del electrón liberado a un segundo QD. Debido a que entre las dos definiciones descritas para la energía de enlace, existen marcadas diferencias, en lo que respecta a esta tesis preferimos tomar esta segunda definición como la correspondiente a la energía de correlación, es decir:

$$E_c\left(D^0\right)=\hat{H}_0\left(\mathbf{r},\tau=0\right)-\hat{H}_0\left(\mathbf{r},\tau=1\right)=E_0-E\left(D^0\right) \tag{2.4a}$$

$$E_c\left(D^-\right)=\hat{H}\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\tau_1=1,\tau_2=0\right)-\hat{H}\left(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\tau_1=1,\tau_2=1\right)= E_0+E\left(D^0\right)-E\left(D^-\right) \tag{2.4b}$$

Nótese que la energía de correlación sólo contiene información acerca de las propiedades intrínsecas del donador confinado en el QD, pero no de su entorno.

En este capítulo se presentarán resultados de cálculo, tanto para la energía de enlace como para la energía de correlación.

2.2 ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA EL ELECTRÓN LIBRE

Soluciones exactas para el electrón libre en un QD no se han encontrado debido a que el Hamiltoniano (2.2a) no es separable a causa de la existencia del potencial $V(\rho,z)$. Por lo tanto, algún método aproximado se debe usar para encontrar las funciones de onda $f_0(\mathbf{r})$ del electrón libre y su correspondiente nivel de energía más bajo E_0 en un QD. De acuerdo con las mediciones estructurales realizadas sobre los SAQDs, una situación típica corresponde al caso en que el espesor del QD es mucho más pequeño que su dimensión lateral en el plano $\left((d_a+d_b)<<2R_0\right)$. Esta condición

experimental nos permite sacar provecho de la aproximación adiabática que ya habíamos usado exitosamente en el capítulo 1 para analizar el espectro de energía del par e-e en un QR [84] y del par e-h en una pirámide [88]. Siguiendo el procedimiento descrito en la sección 1.4, la función de onda $f_0(\mathbf{r})$ se puede expresar como el producto de dos funciones, $f_z(z,\rho)$ la cual describe el movimiento rápido en la dirección transversa, caracterizada por un fuerte confinamiento y la segunda función $f_\rho(\rho)$ la cual describe el movimiento lento en el plano. De acuerdo con el proceso estándar seguido en la aplicación de la AA que se ha descrito en la sección 1.4, lo primero que se debe hacer es resolver la ecuación de onda para el electrón en un pozo cuántico de ancho $d(\rho)$ y barrera de potencial de altura V_0:

$$-\frac{d^2 f_z(z,\rho)}{dz^2} + V(\rho,z) f_z(z,\rho) = E_z(\rho) f_z(z,\rho) \tag{2.5}$$

donde ρ debe tratarse como un parámetro.

Los resultados para el potencial de confinamiento $E_z(\rho)$ que gobierna el movimiento electrónico bidimensional se muestran en la figura 2.3. Los cálculos se han realizado para diferentes perfiles sin tener en cuenta el efecto de la capa húmeda $(d_b = 0)$.

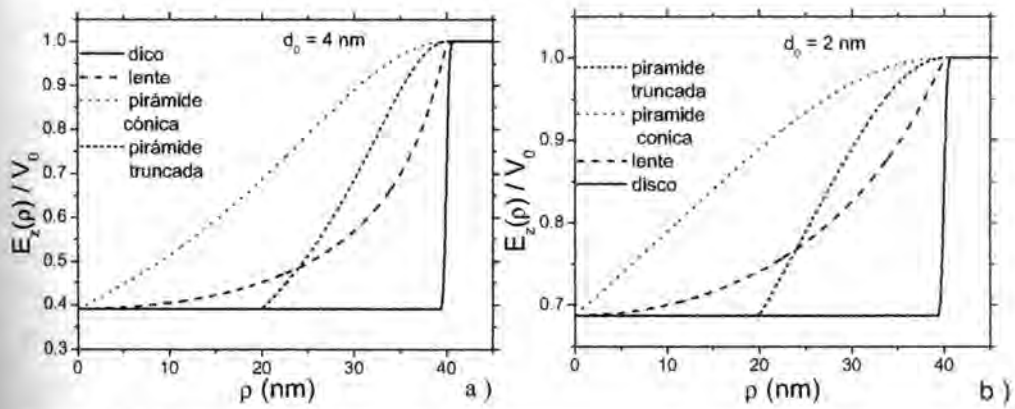

Figura 2.3 Curvas del potencial confinamiento normalizado del movimiento electrónico bidimensional en puntos cuánticos de diferente morfologia y dos alturas diferentes

A partir de estas curvas se puede ver que la altura de la barrera, para el movimiento electrónico en el plano, experimenta un decrecimiento debido al fuerte confinamiento en la dirección z. Cuando se comparan las variaciones para las $d_0 = 4nm$ y $d_0 = 2nm$ se puede concluir que cuanto

más pequeña es la altura del QD, más grande es el decrecimiento de la altura de barrera. Por ejemplo, en la figura 2.3a se observa que cuando la altura de la barrera es de $4nm$ el potencial decrece en un 40% en comparación con el potencial original, mientras que en la figura 2.3b, para la altura del punto igual a $2nm$, la reducción del potencial alcanza a ser del 70% . Esto se debe a que el electrón se encuentra más confinado, lo cual aumenta la posibilidad de desbordamiento de la función de onda electrónica a la región de la barrera. También se puede notar que el perfil del QD determina la forma del potencial de confinamiento en el plano, poniendo de manifiesto que el espectro de energía uniparticular es fuertemente dependiente de la morfología y tamaño del QD.

Una vez calculado el autovalor $E_z(\rho)$ se reemplaza en la ecuación original (2.2a) y se procede a analizar el movimiento lento en el plano:

$$-\nabla_\rho^2 f_\rho(\rho)+\left[E_z(\rho)+\frac{\gamma^2\rho^2}{4}\right]f_\rho(\rho)=E_0 f_\rho(\rho) \tag{2.6}$$

Para obtener la energía del estado base a partir de esta ecuación, se debe tener en cuenta que el potencial $E_z(\rho)$ en la región $\rho \geq R_e$ permanece constante e igual a V_0. Por lo tanto, la solución de la ecuación (2.6) fuera del QD se puede encontrar analíticamente:

$$f_0(\rho)=C\exp\left(-\frac{\gamma\rho^2}{4}\right)U\left(\frac{1}{2}+\frac{V_0-E_0}{2\gamma},1,\frac{\gamma\rho^2}{2}\right);\quad R_e\leq\rho<\infty \tag{2.7}$$

donde $U(a,1,x)$ es la forma general de la función hipergeométrica confluente [83] la cual permanece finita cuando $x\to\infty$. Dentro del QD, el uso de la sustitución $g(\rho)=f_0'(\rho)/f_0(\rho)$, permite que la ecuación (2.6) se reduzca a un problema de Cauchy para la ecuación de Riccati:

$$\begin{aligned} &g'(\rho)+g^2(\rho)+g(\rho)/\rho+\left[E_0-E_z(\rho)-\gamma^2\rho^2/4\right]=0;\\ &0<\rho<R_0;\quad g(0)=0 \end{aligned} \tag{2.8}$$

donde E_0 se considera como un parámetro fijo. Uno puede definir la función $g(R_e,E_0)$ como solución del problema (2.8) en el punto $\rho=R_e$, la cual se puede encontrar para cada valor de E_0 usando por ejemplo el método de Runge-Kutta. Luego se exige la continuidad de esta función con la solución de (2.8) en el punto $\rho=R_e$ y así se puede obtener la siguiente ecuación trascendente que permite obtener la energía del estado base E_0

$$g(R_0,E_0)=-\frac{\gamma R_e}{2}-\gamma R_e\left(\frac{1}{2}+\frac{V_0-E_0}{2\gamma}\right)U\left(\frac{3}{2}+\frac{V_0-E_0}{2\gamma},2,\frac{\gamma R_e^2}{2}\right)\Big/U\left(\frac{1}{2}+\frac{V_0-E_0}{2\gamma},1,\frac{\gamma R_e^2}{2}\right) \quad (2.9)$$

en donde se ha utilizado la relación [19] $U'(a,c;x)=-aU(a+1,c+1;x)$

A partir de la solución de la ecuación (2.6) es posible determinar la función de onda $f_\rho(\rho)$ para el movimiento lento, la cual junto con la función de onda $f_z(z,\rho)$, permiten encontrar la función de onda $f_0(\mathbf{r})$ para el electrón en el QD como el producto de estas dos funciones:

$$f_0(\mathbf{r})=f_z(z,\rho)f_\rho(\rho) \quad (2.10)$$

Una vez determinada $f_0(\mathbf{r})$ se puede calcular la distribución de la densidad de probabilidad electrónica dentro de los QDs con diferentes morfologías. Los resultados se muestran en la figura 2.4 para puntos en forma de disco, lente pirámide cónica.

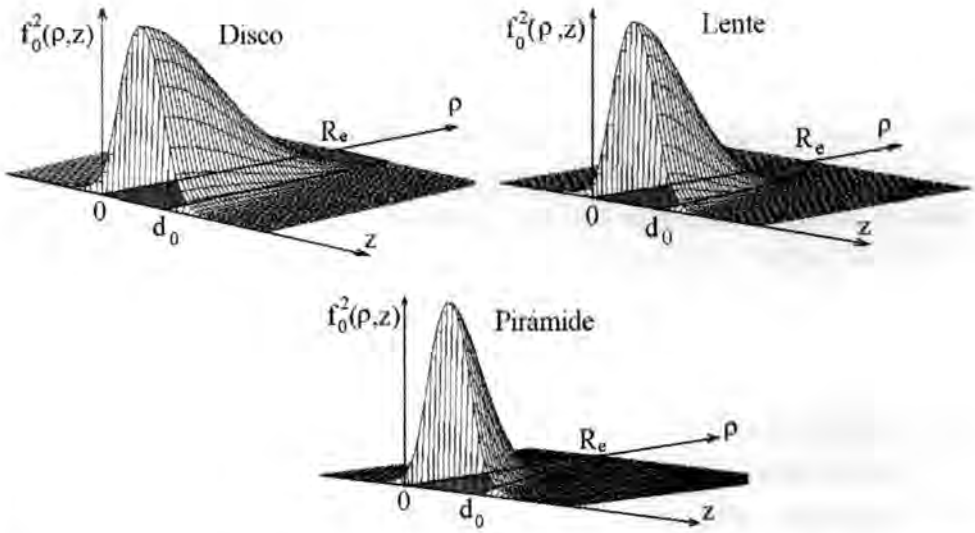

Figura 2.4 Distribución de carga electrónica en el plano $\rho-z$ para diferentes QDs obtenidos mediante el uso de la función de onda 2.10

De esta figura se puede observar que la densidad de distribución electrónica llega a ser más y más comprimida alrededor del eje, a medida que la morfología del QD varía su forma desde un disco a una lente y posteriormente a una pirámide cónica, donde el confinamiento electrónico es más fuerte. Este cambio en la distribución del electrón libre dentro del

QD, tendrá gran incidencia sobre la energía de enlace de las donadoras neutras y cargadas negativamente.

2.3 ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA UNA DONADORA NEUTRA D^0 Y DONADORA CARGADA NEGATIVAMENTE D^-

A fin de encontrar las funciones de onda para la donadora neutra, $\Psi_{D^0}(\mathbf{r})$ y para el ión D^-, $\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ correspondientes a los estados de energía más bajos, $E(D^0)$ y $E(D^-)$, respectivamente, se usarán funciones de prueba de la forma:

$$\Psi_{D^0}(\mathbf{r}) = f_0(\mathbf{r})\Phi_{D^0}(|\mathbf{r}-\xi|) \tag{2.11a}$$

$$\Psi_{D^-}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2) = f_0(\mathbf{r}_1)f_0(\mathbf{r}_2)\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1-\xi|,|\mathbf{r}_2-\xi|,r_{12}) \tag{2.11b}$$

Estas funciones de onda dan excelentes resultados[79-130] cuando se comparan con los datos obtenidos mediante los métodos de Monte Carlo [18] y diagonalización exacta [131], tanto para donadoras centradas como descentradas en un punto cuántico esférico.

Las funciones envolventes $\Phi_{D^0}(|\mathbf{r}-\xi|)$ y $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1-\xi|,|\mathbf{r}_2-\xi|,r_{12})$ que describen la modificación de la distribución de probabilidad producida por la interacción Coulombiana, satisfacen cada una su propia ecuación de onda y éstas pueden obtenerse a partir del método de dimensión fractal [79,130].

A. ECUACIÓN DE ONDA PARA $\Phi_{D^0}(|\mathbf{r}-\xi|)$

Esta función envolvente tiene simetría esférica y solamente depende de la distancia relativa entre el ión fijo y el electrón, $|\mathbf{r}-\xi|$. La ecuación que ella satisface se puede obtener partiendo del principio variacional de Schrodinger:

$$F\left[\Phi_{D^0}\right] = \left\langle f_0\Phi_{D^0}\left|\hat{H}_0 - E\right|f_0\Phi_{D^0}\right\rangle \rightarrow \min \tag{2.12}$$

Trasladando el origen de coordenadas a la posición del ión impureza y siguiendo el procedimiento descrito en la sección 1.6, pero teniendo en cuenta que $\eta_e = 1$ y $J_0(\rho,\rho_h) = J(r)$, la ecuación (1.49) puede escribirse como:

$$F\left[\Phi_{D^0}\right]=\int_0^{\infty} J(r)\left\{\left[\frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr}\right]^2-\frac{2}{r}\Phi_{D^0}{}^2(r)+(E_0-E)\Phi_{D^0}{}^2(r)\right\}dr\rightarrow min \quad (2.13)$$

donde

$$J(r)=4\pi r^2\mathrm{P}(r);\ \mathrm{P}(r)=\frac{1}{4\pi r^2}\int f_0^2(\mathbf{r}+\zeta)\delta(|\mathbf{r}|-r)d\mathbf{r} \quad (2.14)$$

De esta ecuación se puede ver que el factor $J(r)$ está relacionado con la densidad de carga $\mathrm{P}(r)$ para el estado base del electrón libre, promediada sobre una esfera de radio r centrada en el ión impureza.

Una vez calculada la función de onda del electrón libre (2.10), se puede determinar la dependencia del Jacobiano con r mediante una estimación numérica de la integral (2.14), la cual en coordenadas cilíndricas se puede escribir como:

$$J(r)=r\int_0^{2\pi}d\varphi\int_{-r}^{r}dz f_z^2\left(z+\xi_z,|\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\xi}_\rho|\right)f_\rho^2\left(|\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\xi}_\rho|\right);$$
$$|\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{\xi}_\rho|=\sqrt{r^2-z^2+\xi_\rho^2+2\xi_\rho\sqrt{r^2-z^2}\cos\varphi} \quad (2.15)$$

A partir del cálculo de la derivada funcional $\delta F\left[\Phi_{D^0}\right]/\delta\Phi_{D^0}=0$ se obtiene una ecuación de Euler-Lagrange unidimensional para $\Phi_{D^0}(r)$

$$-\frac{1}{J(r)}\frac{d}{dr}\left[J(r)\frac{d\Phi_{D^0}(r)}{dr}\right]-\frac{2}{r}\Phi_{D^0}(r)=\left[E\left(D^0\right)-E_0\right]\Phi_{D^0}(r) \quad (2.16)$$

La forma tridimensional de esta ecuación es la siguiente:

$$-\frac{1}{P(r)}\nabla\left[P(r)\nabla\Phi_{D^0}(r)\right]-\frac{2}{r}\Phi_{D^0}(r)=\left[E\left(D^0\right)-E_0\right]\Phi_{D^0}(r) \quad (2.17)$$

La ecuación de onda renormalizada (2.16) que satisface $\Phi_{D^0}(r)$ describe un átomo de hidrógeno en un espacio efectivo, donde el Jacobiano $J(r)$ es la parte radial del elemento de volumen. Esta interpretación surge de la condición de ortogonalidad $\left\langle\Phi_{D^0}^n(r)\middle|\Phi_{D^0}^m\right\rangle=\delta_{nm}$ con elemento de volumen infinitesimal $dV=J(r)dr$, donde $J(r)$ se puede considerar como el área

de un cascarón esférico de espesor dr. En un espacio homogéneo de una, dos y tres dimensiones, $J(r)$ es igual a 1, $2\pi r$ y $4\pi r^2$, respectivamente. Si la dependencia de $J(r)$ sobre r fuera una ley de potencia, por ejemplo $J(r)=cr^{D-1}$, entonces la ecuación (2.16) coincidiría con la ecuación de Schrödinger para el estado más bajo del átomo de hidrógeno en un espacio efectivo D-dimensional, donde D puede ser un número entero o fraccionario. En los puntos cuánticos $J(r)$ no obedece a una ley de potencia en la separación electrón-donador, r, debido a la existencia del la densidad de carga. Por esta razón, (2.16) se puede considerar como la ecuación de onda para un átomo de hidrógeno en un espacio de dimensión fraccionaria variable que depende de la distancia electrón-donador. A causa de esta interpretación, el modelo que se ha implementado en el análisis de la donadora neutra y cargada negativamente se le denomina método de dimensión fractal [79,130].

Para resolver la ecuación (2.16) se reescribirá en la siguiente forma:

$$-\Phi''_{D^0}(r)-w(r)\Phi'_{D^0}(r)-\frac{2}{r}\Phi_{D^0}(r)=\left[E\left(D^0\right)-E_0\right]\Phi_{D^0}(r);$$
$$w(r)=\left[\frac{2}{r}+\left(\ln P(r)\right)'\right] \qquad (2.18)$$

donde se usa la notación $J(r)=r^2P(r)$ teniendo en cuenta que el comportamiento del Jacobiano (2.15) para pequeños valores de r es casi parabólico. Como la solución de la ecuación (2.18) en el punto $r=0$ debe ser una función analítica, entonces se puede derivar la siguiente condición inicial: $\Phi'_{D^0}(0)/\Phi_{D^0}(0)=-1$. Usando la sustitución $\tan\vartheta(r)=\Phi'_{D^0}(r)/\Phi_{D^0}(r)$, se puede reducir el problema (2.18) a un problema de Cauchy para la ecuación diferencial de primer orden:

$$\vartheta'(r)+\sin^2\vartheta(r)+w(r)\sin\vartheta(r)\cos\vartheta(r)+\left[E\left(D^0\right)-E_0+\frac{2}{r}\right]\cos^2\vartheta(r)=0;$$
$$\vartheta(0)=-\pi/4 \qquad (2.19)$$

Aquí la función $w(r)$ y el valor E_0 se conocen previamente de la solución del problema del electrón libre en el QD y el valor de la energía del donador $E\left(D^0\right)$ se puede considerar como un parámetro fijo. Para cada valor de este parámetro, el problema de Cauchy se puede resolver numéricamente usando el método de Runge-Kutta y la solución $\vartheta\left(r,E\left(D^0\right)\right)$ se puede encontrar en cualquier punto r. A partir del significado físico de la función envolvente

$\Phi_{D^0}(r)$, ésta debería tender a cero para grandes separaciones r entre el electrón y el ión impureza. También se puede ver a partir de la definición (2.11a), que el comportamiento de la función envolvente para grandes separaciones no afecta esencialmente la función de onda del estado base de la donadora debido a la presencia del factor predominante $f_0(\mathbf{r})$, el cual decrece exponencialmente para grandes separaciones r. Por esta razón, uno puede escoger un valor límite suficientemente grande para las separaciones electrón-ión, $R_{\max}$ de tal manera que $\Phi_{D^0}(R_{\max})=0$. Esta condición permite obtener la siguiente ecuación trascendente con respecto a la energía desconocida del donador $E(D^0)$:

$$\vartheta\left(R_{\max}, E\left(D^0\right)\right)=-\pi/2 \tag{2.20}$$

donde $\vartheta(R_{\max}, E(D^0))$ es solución del problema de Cauchy (2.19) en el punto $r=R_{\max}$.

B. ECUACIÓN DE ONDA PARA $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1-\xi|,|\mathbf{r}_2-\xi|,r_{12})$

El método descrito anteriormente, también se puede usar para calcular el estado base del ión D^- con función de prueba (2.11b), en donde la función envolvente $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1-\xi|,|\mathbf{r}_2-\xi|,r_{12})$ tiene en cuenta los efectos de correlación entre los electrones debido a la interacción Coulombiana. En esta función r_1 y r_2 representan las distancias entre los electrones 1 y 2 al ión impureza, mientras r_{12} representa la distancia entre los electrones. Usando el principio variacional de Schrödinger con Hamiltoniano (2.1a), se tiene que la funcional para la envolvente Φ_{D^-} se puede escribir como:

$$F\left[\Phi_{D^-}\right]=\left\langle f_0(1)f_0(2)\Phi_{D^-}\left|\hat{H}-E\right|f_0(1)f_0(2)\Phi_{D^-}\right\rangle\rightarrow \min \tag{2.21}$$

Para obtener la ecuación diferencial que satisface $\Phi_{D^-}(|\mathbf{r}_1-\xi|,|\mathbf{r}_2-\xi|,r_{12})$, se debe seguir el mismo procedimiento descrito en la sección (1.6) y en el apartado anterior para la D^0. La ecuación Euler-Lagrange que se obtiene para la función envolvente del ión D^-, con origen situado en la posición del ión impureza, es la siguiente:

$$\sum_{i=1}^{2}-\frac{1}{J(r_i)}\frac{d}{dr_i}\left[J(r_i)\frac{d\Phi_{D^-}}{dr_i}\right]+\left(\frac{2}{r_{12}}-\frac{2}{r_1}-\frac{2}{r_2}+2E_0-E\left(D^-\right)\right)\Phi_{D^-}(r)=0 \tag{2.22}$$

y en términos de la densidad de probabilidad $P(r)$ se puede expresar como:

$$\sum_{i=1}^{2} -\frac{1}{P(r_i)}\nabla_i\left[P(r_i)\nabla_i\Phi_{D^-}\right]+\left(\frac{2}{r_{12}}-\frac{2}{r_1}-\frac{2}{r_2}+2E_0-E\left(D^-\right)\right)\Phi_D\,(r)=0 \qquad (2.23)$$

Se puede ver claramente que la ecuación (2.22) describe un ión de hidrógeno H^- en un espacio isotrópico con dimensión fractal

Con el propósito de encontrar la energía $E\left(D^-\right)$ se usará para la función envolvente Φ_{D^-} una función triparamétrica del tipo de Hylleras[83]:

$$\Phi_{D^-}(r_1,r_2,r_{12})=\left[1+\beta(r_1-r_2)^2+\eta r_{12}\right]\exp(-\alpha(r_1+r_2)) \qquad (2.24)$$

La cual permitirá encontrar la energía variacional $E\left(D^-,\alpha,\beta,\eta\right)$ como una función de los tres parámetros α,β y η. El límite superior estimado para la energía del donador cargado negativamente se puede encontrar como:

$$E\left(D^-\right)=\min_{\alpha,\beta,\eta\in(0,1)} E\left(D^-,\alpha,\beta,\eta\right) \qquad (2.25)$$

En la determinación de $E\left(D^-,\alpha,\beta,\eta\right)$ se usarán coordenadas de Hylleras[83] en un espacio tridimensional isotrópico para cálculo de las integrales múltiple, donde la parte radial del Jacobiano r^2 se sustituye por $r^2P(r)$. Luego puede obtenerse la siguiente expresión explícita para la energía variacional como una función de los parámetros α,β y η:

$$E\left(D^-,\alpha,\beta,\eta\right)=2E_0+2\alpha^2+\frac{\int_0^\infty e^{-2\alpha s}ds\int_0^s P\left(\frac{s+t}{2},\zeta\right)P\left(\frac{s-t}{2},\zeta\right)R_1(s,t)\,dt}{\int_0^\infty e^{-2\alpha s}ds\int_0^s P\left(\frac{s+t}{2},\zeta\right)P\left(\frac{s-t}{2},\zeta\right)R_0(s,t)\,dt}, \qquad (2.26)$$

donde

$$R_1(s,t)=2(s-t)\left[\left(s^2-t^2\right)\left(1+\beta t^2\right)^2+4\beta\eta s^2t^2+2\alpha\eta st^2\left(1+\beta t^2\right)\right]+$$
$$\left(s^2-t^2\right)\left\{2s\alpha\eta^2t^2-4s\left(1+\beta t^2\right)^2+\left(s^2-t^2\right)\left[4\beta^2t^2+2\eta\left(1+\beta t^2\right)+\eta^2\right]\right\}-$$
$$\frac{2\eta}{3}\left(s^3-t^3\right)\left[4\beta t^2+2s(4+\alpha)\left(1+\beta t^2\right)-\eta\left(s^2-t^2\right)\right]-\eta^2s\left(s^4-t^4\right)(\alpha+2) \qquad (2.27)$$
$$R_0(s,t)=\left(s^2-t^2\right)\left[\frac{1}{2}\left(s^2-t^2\right)\left(1+\beta t^2\right)^2+\frac{2\eta}{3}\left(s^3-t^3\right)\left(1+\beta t^2\right)+\frac{\eta^2}{4}\left(s^4-t^4\right)\right]$$

2.4 ESPECTRO DE ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA UNA DONADORA NEUTRA D^0

Para describir los efectos de tamaño del QD y de la posición de la donadora sobre la energía del estado base, se han calculado las energías de correlación y de enlace de una D^0 confinada dentro de un QD en forma de lente, con radio de la base $R_e = 25nm$, espesor de capa húmeda $d_b = 2nm$ y cuatro diferentes alturas $d_0 = 2,\ 4,\ 6\ y\ 8nm$. Los resultados de cálculo para las energías $E_b\left(D^0\right)$ y $E_c\left(D^0\right)$ en función de la distancia al eje ξ_ρ, para una donadora localizada en la base de la capa húmeda $\left(\xi_z = d_b = 2nm\right)$ se muestran en la figura 2.5

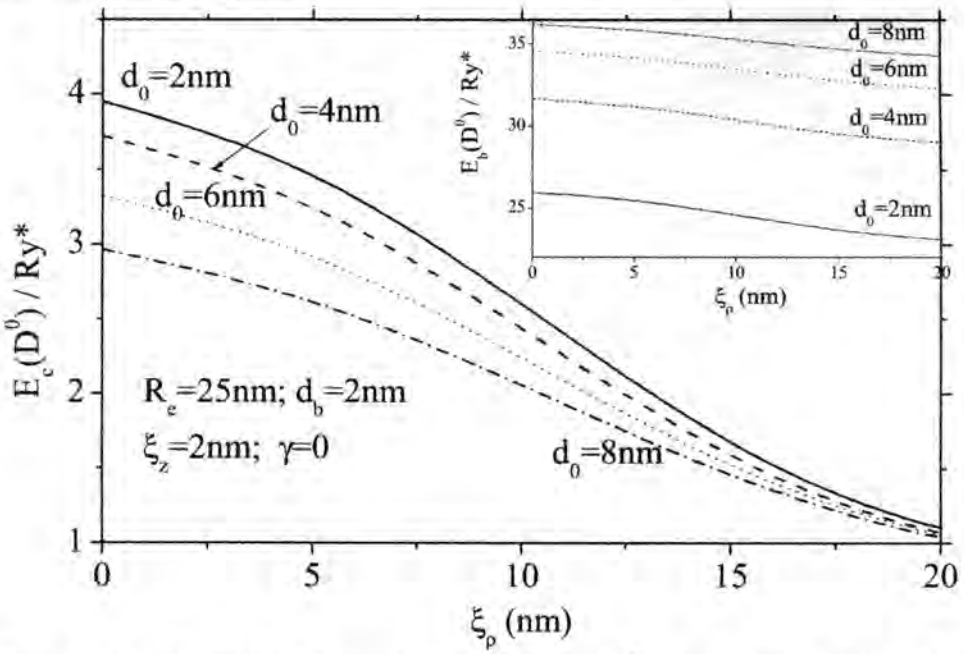

Figura 2.5 Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6\ y\ 8nm$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA
SEDE MEDELLÍN
DEPTO. DE BIBLIOTECA

En esta figura se puede observar como las energías $E_b\left(D^0\right)$ y $E_c\left(D^0\right)$ disminuyen cuando el donador se aleja del eje del QD. Esto se debe a que el movimiento del electrón está restringido principalmente a la región cercana al eje, independientemente de la posición de la donadora. Por lo tanto, cuando la donadora se mueve desde el eje, la distancia promedio entre el electrón y el ión se incrementa, lo cual conduce a una disminución de las energías de correlación y de enlace, debido al decrecimiento en la interacción Coulombiana. También se puede ver a partir de esta figura que los ordenes de las curvas para diferentes alturas del QD en la figura principal y en el recuadro se invierten. La energía de correlación en la figura principal decrece con el incremento de la altura del QD, mientras los valores más grandes de energía de enlace, en la figura del recuadro, corresponden a donadores localizados en QDs con alturas más grandes. Esto se debe a que una reducción en la altura del QD, produce una subida de los niveles de energía del electrón y del donador hacia la banda de conducción.

En la figura 2.6 se presenta el efecto del campo magnético sobre las energías de correlación del donador en una lente de altura $d_0 = 4\ nm$, radio de la base $R_0 = 25\ nm$ y espesor de la capa húmeda $d_b = 2\ nm$.

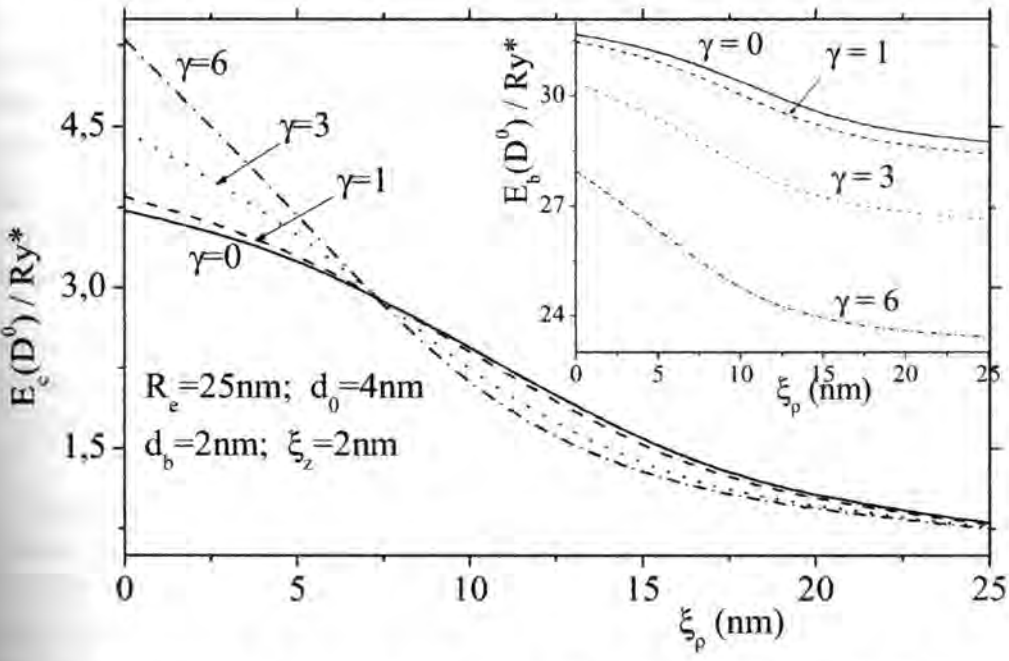

Figura 2.6 Energía de correlación de una D^0 como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0,1,3,6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

Se puede ver a partir de la figura principal como las energías de correlación de los donadores localizados en la vecindad del eje es mayor cuanto más grande es la intensidad del campo magnético, pero este comportamiento se invierte al alejar la donadora del eje del QD. En consecuencia, todas las curvas se cruzan y ésto tiene lugar en un mismo punto $\left(\xi_\rho \approx 7.5nm\right)$ donde la energía de correlación permanece inalterada por la acción del campo magnético. En general, el efecto del campo magnético es el de producir un confinamiento adicional, el cual restringe el movimiento del electrón en dirección radial, haciendo más probable su localización en la vecindad del eje. Debido a esta variación en la distribución de carga por efecto del campo magnético, se produce una disminución en la separación electrón-ión para donadores localizados cerca del eje. Esta situación conlleva a un incremento de la energía de correlación Coulombiana, pero este comportamiento se invierte cuando los donadores se sitúan lejos del eje, lo cual explica la inversión de las curvas de la figura 2.6.

Muchos autores en sus estudios sobre SAQDs, debido a que la altura del punto cuántico es mucho menor que el tamaño lateral, han ignorado los efectos que tienen la altura y la forma SAQD sobre el espectro de energía de impurezas confinadas en estos sistemas. Con el propósito de describir el efecto de la morfología del QD y la posición del donador sobre la energía del estado base de una D^0, se ha calculado su energía de enlace en función del radio R_e de la base. Los puntos se toman en forma de disco, lente y pirámide truncada, para dos alturas diferentes $d_0 = 2nm$ y $4nm$ e impureza localizada a la mitad del eje ($\xi_\rho = 0$, $\xi_z = 0.5d_0$). Como el objetivo puntual ahora es de analizar los efectos de tamaño y forma de los SAQDs sobre la energía de correlación, de manera intencional se ha dejado de lado el efecto del espesor de la capa húmeda.

A fin de facilitar el análisis, resulta conveniente comparar los resultados obtenidos con las energías de enlace para una donadora neutra en el bloque [133-134], tanto en el caso 3D($E_c = 1\text{Ry}^*$) como en el 2D ($E_c = 4\text{Ry}^*$).

Los resultados de cálculo de la energía de correlación para la impureza D^0 se muestran en la figura 2.7. Comparando las curvas para los QDs con diferentes morfologías, se puede observar que en la región correspondiente a grandes radios de la base $\left(R_e > 20nm\right)$, la mayor energía de correlación le pertenece al QD en forma de pirámide cónica y el menor valor de energía de correlación es para el disco. Esto se debe a que en la pirámide cónica se da el mayor confinamiento en la dirección radial, seguida por la lente, mientras que en el disco se da el menor confinamiento. Estos resultados están en absoluta correspondencia con los mostrados en la figura 2.4 para el electrón libre. Cuando el radio disminuye la energía de correlación del donador

neutro inicialmente crece, pero existe un momento en que la función de onda del electrón comienza a desbordar hacia la región de la barrera produciéndose un incremento de la separación entre el electrón y la impureza, lo cual se traduce en una disminución de la energía de enlace a causa del debilitamiento en la interacción Coulombiana.

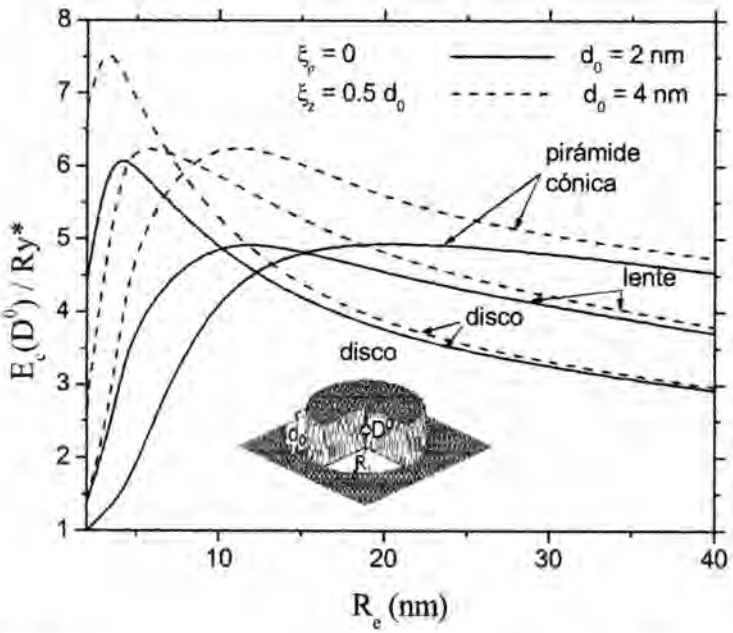

Figura 2.7 Energía de enlace para el estado base de una D^0 en función del radio R_e de la base del QD en forma de disco, lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2nm$ y la punteada a una altura $d_0 = 4nm$. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.

Comparando las curvas para las diferentes estructuras, se puede ver que el efecto de desbordamiento ocurre primero en la pirámide cónica seguido por la lente y finalmente por el disco. Como resultado de este efecto, se presenta un cruzamiento y una inversión del orden de las energías de correlación cuando el radio de la base es menor de $15nm$ y en el límite cuando este radio tiende a cero, se observa que D^0 recupera completamente su carácter 3D, ya que la energía de enlace se aproxima paulatinamente al valor de 1Ry*, el cual es característico de un D^0 en sistemas 3D en el bloque. Este valor de la energía de enlace contrasta con el valor promedio de 4Ry* que se obtiene para estructuras con radio muy grande. En este caso las estructuras se pueden considerar como sistemas cuasi-bidimensionales con un fuerte pero incompleto confinamiento en la dirección z, debido a los valores finitos del potencial de confinamiento y de la altura del QD. Por lo tanto, es de esperarse que cuando el valor del radio se incremente lo

suficiente, la energía de enlace del D^0 tenderá a valores ligeramente más bajos que los obtenidos para sistemas 2D en le bloque.

2.5 ESPECTRO DE ENERGÍA DEL ESTADO BASE PARA UNA DONADORA CARGADA NEGATIVAMENTE D^-

Para describir los efectos asociados con la posición de la impureza, la morfología y el tamaño del SAQD sobre la energía del estado base de una impureza cargada negativamente, se calculan la energía de enlace y de correlación mediante las definiciones (2.3b y 2.4b). Los resultados de cálculo de $E_c\left(D^-\right)$ para impurezas localizadas en diferentes partes de una lente de radio de la base $25nm$, espesor de la capa húmeda $2nm$ y diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6\, y\, 8nm$, con y sin campo magnético se muestran la figuras 2.8 y 2.9. En el recuadro de cada una de estas figuras se muestra la evolución de la energía de enlace, $E_b\left(D^-\right)$ con la distancia ξ_ρ al eje del QD.

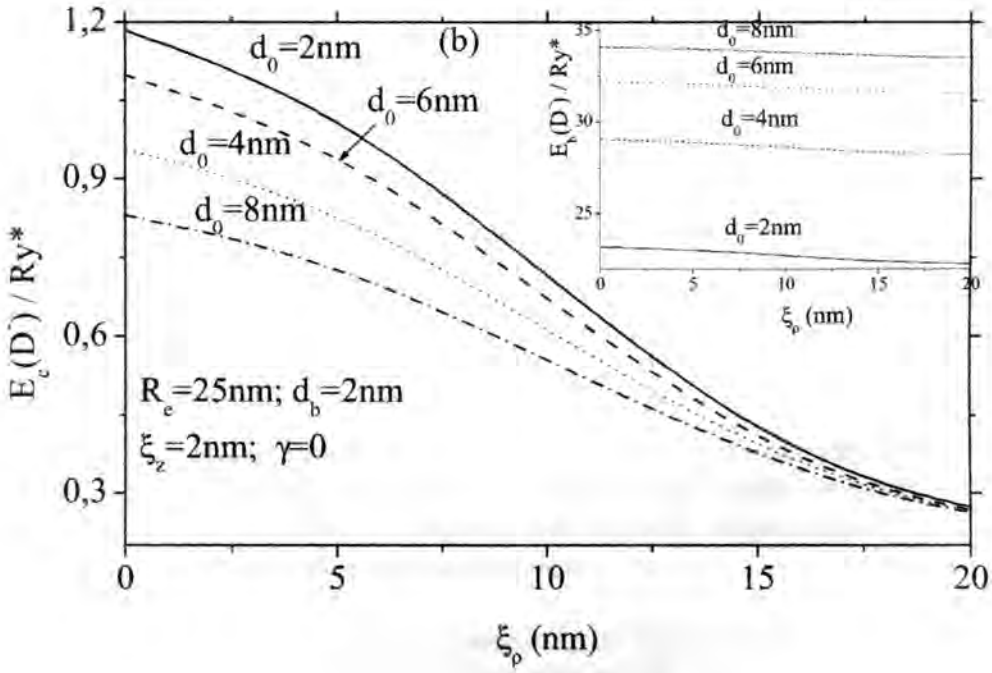

Figura 2.8 Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes alturas $d_0 = 2, 4, 6\, y\, 8nm$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

El comportamiento de estas curvas es similar al descrito en la sección anterior para el D^0; es decir, tanto $E_b(D^-)$ como $E_c(D^-)$ decrecen cuando la impureza se aleja del eje de simetría del QD. Esto se debe a que el movimiento electrónico queda restringido principalmente a la región vecina al eje, lo cual conlleva a un aumento de la separación entre impureza y electrones, haciendo que las energías de enlace y de correlación decrezcan a causa de la disminución en la interacción Coulombiana. Se debe notar que la disminución monótona de $E_b(D^-)$ y $E_c(D^-)$ al aumentar la separación ξ_ρ, es independiente de la altura del QD y de la intensidad del campo magnético.

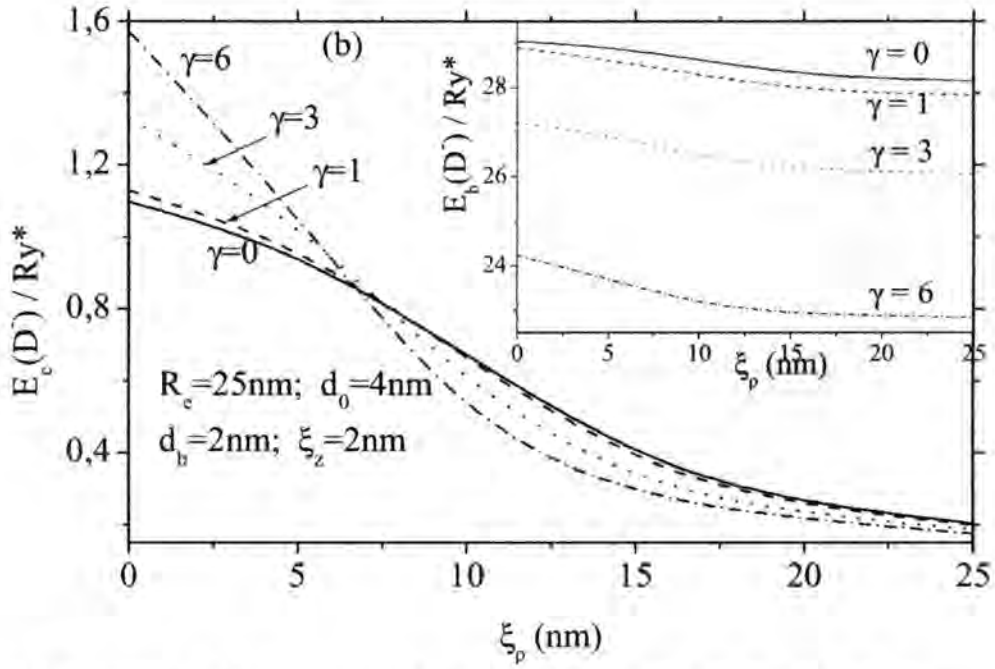

Figura 2.9 Energía de correlación de una D^- como una función de la distancia al eje z para cuatro diferentes valores del campo magnético $\gamma = 0,1,3,6$. En el recuadro se muestra la energía de enlace usando las mismas convenciones que en la figura principal.

También se puede observar como la energía de correlación para impurezas localizadas cerca del eje, es mayor cuánto más grande es la intensidad del campo magnético, pero este comportamiento se invierte para impurezas localizadas lejos del eje. Esta inversión produce un cruce de las curvas de energía de correlación en un mismo punto, el cual se caracteriza porque para esa separación la energía $E_c(D^-)$ se hace independiente de la intensidad del campo magnético. Este comportamiento de $E_c(D^-)$ con el campo magnético se debe a que los electrones son empujados por el campo hacia el eje de simetría del QD, produciéndose un confinamiento adicional al ya

generado por la discontinuidad en la banda de conducción de los materiales que constituyen el SAQD.

Para determinar el efecto de la morfología sobre la energía del estado base del ión D^-, se ha calculado la energía de correlación en función del radio del QD. Los puntos se toman en forma de disco, lente y pirámide cónica, para dos alturas diferentes $d_0 = 2nm$ y $4nm$, espesor nulo de la capa húmeda e impureza localizada en el punto $\left(\xi_z = 0.5 d_0 \, y \, \xi_\rho = 0\right)$. Los resultados de cálculos se muestran en la figura 2.10, pero para ayudar a comprender el comportamiento de estas curvas se deben tener presente los valores de $0.055 R_y^*$ y $0.511 R_y^*$ correspondientes a las energías de correlación del D^- para sistemas 3D y 2D en el bloque, respectivamente.

Cuando el radio del QD aumenta, la energía de correlación decrece monótonamente de tal manera que para valores de los radios suficientemente grande, la energía paulatinamente se aproxima al valor de $0.511 R_y^*$ característico de los sistemas $2D$. Este valor no lo alcanza porque el espesor del QD es pequeño pero no nulo, lo cual hace que el confinamiento sea muy fuerte pero incompleto debido a que la barrera de potencial es finita.

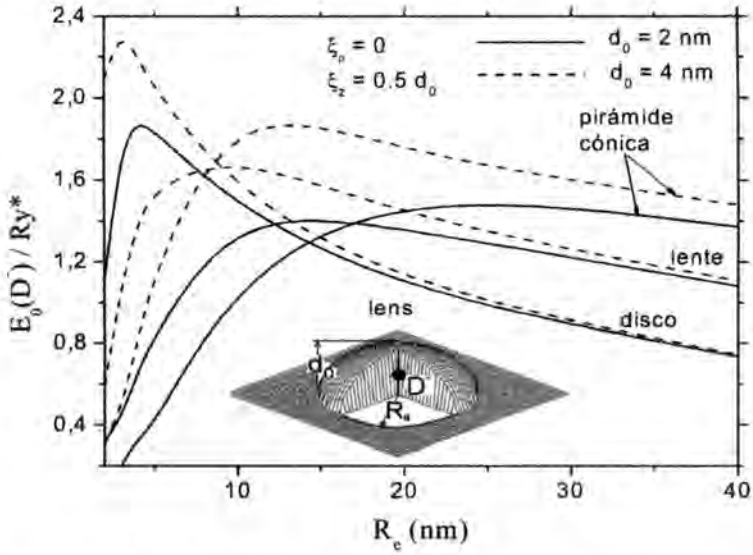

Figura 2.10 Energía de enlace para el estado base de una D^- en función del radio R_0 de la base del QD en forma de disco; lente y pirámide truncada e impureza localizada a la mitad de la altura de un QD. Las líneas sólidas corresponden a una altura $d_0 = 2nm$ y la punteada a una altura $d_0 = 4nm$. En la parte inferior se muestra la posición del donador dentro de un disco.

Para radios de los puntos menores que $20nm$, las energías de enlace de las donadoras inicialmente crecen hasta alcanzar un valor máximo, pero a partir

de ese punto comienza a disminuir debido a que los electrones desbordan hacia la región de la barrera, lo que produce un aumento en la separación del electrón y la donadora y una disminución de las energías de enlace. En el límite en que el radio del QD tiende a cero, las donadoras recuperan su carácter tridimensional y la energía cae bruscamente a un valor muy pequeño cercano a $0.055R_y^*$, haciendo que la configuración del D^- se vuelve similar a la de un ión de hidrógeno H^- tridimensional.

Comparando las curvas para diferentes morfologías, se puede ver que el efecto de desbordamiento de las funciones de onda en la región de la barrera debido al decrecimiento del radio del punto cuántico, ocurre primero en la pirámide cónica, seguido de la lente y después del disco. Este desbordamiento produce un cruce de las curvas y la inversión en el orden de la energía de enlace para valores del radio del orden de un radio de Bohr efectivo.

Para llevar a cabo un mejor entendimiento de de las características dimensionales de la donadora neutra, D^0 y cargada negativamente D^-, en la figura 2.11 se muestra la razón $\sigma = E_c\left(D^-\right)/E_c\left(D^0\right)$ como función de la distancia de la donadora al eje del QD para diferentes alturas (Figura 2.11a) y para diferentes intensidades del campo magnético (Figura 2.11b).

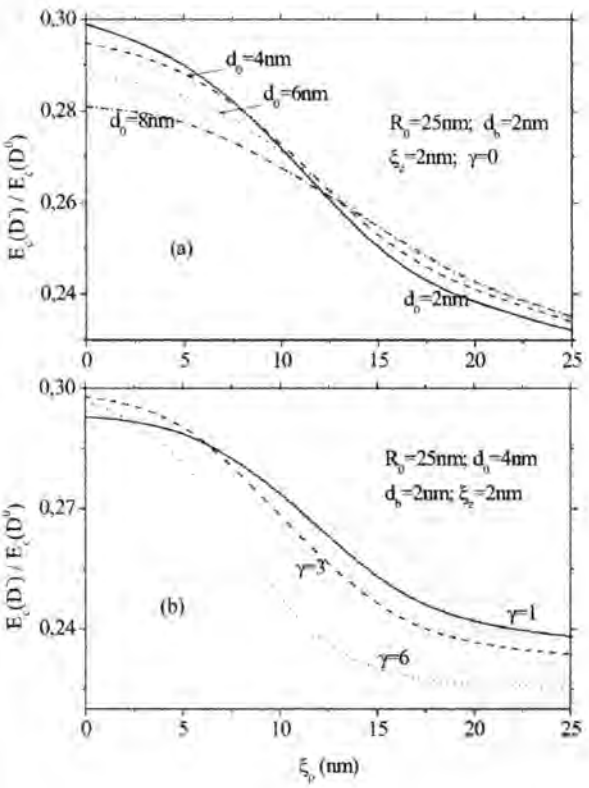

Figura 2.11 Razón $\sigma = E_c\left(D^-\right)/E_c\left(D^0\right)$ como función de la distancia de la donadora al eje para diferentes alturas del QD (a) y para diferentes intensidades del campo magnético

Los resultados obtenidos en estas curvas se pueden comparar con los valores de la razón σ que se muestran en la tabla 2.1, los cuales se han obtenido previamente por medio de métodos variacionales [79,127] y de difusión de Monte Carlo[18].

Para los casos no confinados 3D y 2D, la razón σ, de acuerdo a los trabajos de Louie y Pang [18], son iguales 0.055 y 0.128, respectivamente. Usando función de prueba de Hylleras con 3 parámetros variacionales con nuestro modelo se obtienen los valores de 0.0506 y 0.086, respectivamente.

En la tabla 2.1 se presentan los valores de las energías de correlación $E_c\left(D^-\right)$, $E_c\left(D^0\right)$, y la razón σ, que se han obtenido previamente para donadoras centradas en puntos cuánticos esféricos (SQD) [6,9], hilos cuánticos cilíndricos(QWW) y pozos cuánticos (QW) con altura de la barrera de potencial igual a $40\,R_y$ *.

ENER. DONADORA	BLOQUE			HETEROSTRUCTURAS CON BARRERA DE ALTURA 40 Ry*		
	3D	2D	Q1D	QW	QWW	SQD
$E_b\left(D^0\right)$	1 Ry*	4 Ry*	7.5 Ry*	2.5 Ry*	5.8 Ry*	8.1 Ry*
$E_b\left(D^-\right)$	0.055 Ry*	0.51 Ry*	1.5 Ry*	0.32 Ry*	1.2 Ry*	2.4 Ry*
σ	0.055	0.128	0.2	0.13	0.2	0.3

*Tabla 2.1. Energías de enlace para impurezas D^0 y D^- y su razón $\sigma = E_c\left(D^-\right)/E_c\left(D^0\right)$ para sistemas en 3D, 2D y cuasi-unidimensionales (modeladas para donadoras en campos magnéticos muy intensos) en materiales en el bloque y los correspondientes valores máximos alcanzados por estas energías en pozos (QW), hilos(QWW) y puntos (SQD) cuánticos esféricos con barrera de potencial de $40\,R_y$ **

Como en el artículo [127] se demostró que la razón σ depende muy débilmente de la forma del potencial, lo cual se puede ver también a partir de la tabla 2.1, entonces los valores límites de σ iguales a 0.3, 0.2, 0.128 y 0.05 se pueden considerar como los valores típicos para heterostructuras de dimensión 0D, 1D, 2D y 3D, respectivamente.

Se puede ver a partir de la figura 2.11 como el valor límite de $\sigma \cong 0.3$ correspondiente a SQD, también es valido para donadoras localizadas cerca del eje del QD en forma de lente y este resultado es independiente de la presencia del campo magnético. Cuando la donadora se remueve lejos del eje, la razón σ se reduce y monótonamente tiende al valor límite de 0.2 correspondiente a sistemas 1D, demostrándose así que tanto la donadora neutra D^0 como la cargada negativamente D^- adoptan

configuraciones geométricas casi lineales, donde los electrones tienden a localizarse principalmente cerca del eje, mientras el ión se desplaza a la región periférica. En la figura 2.11b se puede apreciar que en presencia de campos magnéticos muy intensos, el valor límite de la razón σ correspondiente a sistemas 1D, se alcanza más rápidamente cuando la posición de la donadora es removida a la región periférica del QD. Esto se debe al hecho de que bajo la acción un campo magnético el movimiento de los electrones llega a ser más restringido a la vecindad del eje y con la donadora desplazada lejos del eje, la órbita electrónica se hace más alargada.

Se podría pensar que estos valores límites que alcanza σ solamente son válidos para QDs en forma de lente, pero a partir de la figura 2.12, en donde se muestra la evolución de σ con el radio de la base del QD para tres diferentes morfologías, disco, lente y pirámide cónica, se puede ver que el valor 0.3, correspondiente al valor de límite de σ para estructuras 0D, también es válido para todos los puntos cuánticos autoenesamblados independientemente de su morfología.

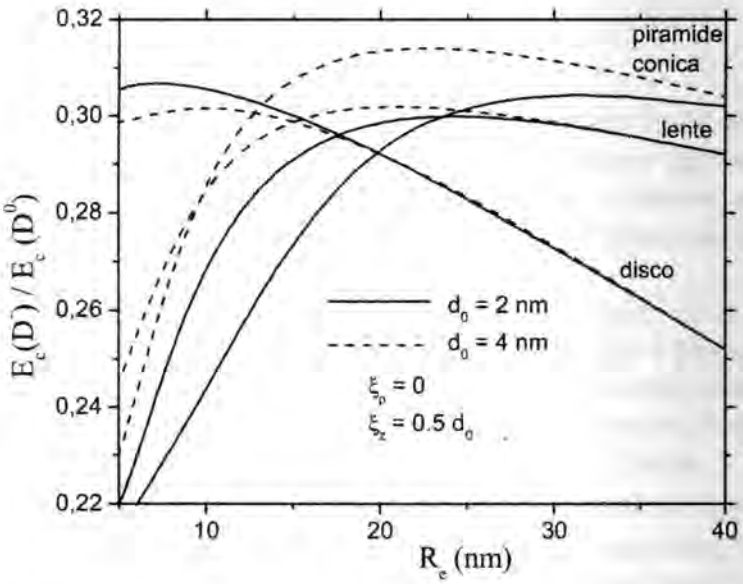

Figura 2.12. Razón $\sigma = E_c\left(D^-\right)/E_c\left(D^0\right)$ *como función del radio de la base de QDs en forma de disco, lente y pirámide cínica para dos alturas:* $d_0 = 2nm$ *(líneas continuas) y* $d_0 = 4nm$ *(líneas a trazos)*

En esta figura se puede ver como la razón σ cae abruptamente para todas las heterostructuras, desde su valor máximo al valor aproximado de 0.05 correspondiente a sistemas 3D no confinados y obtenido cuando el radio de la base tiende a cero. En el otro límite, cuando el radio de la base se hace

muy grande, σ decrece monótonamente y tiende al valor límite correspondiente a sistemas 2D en el bloque.

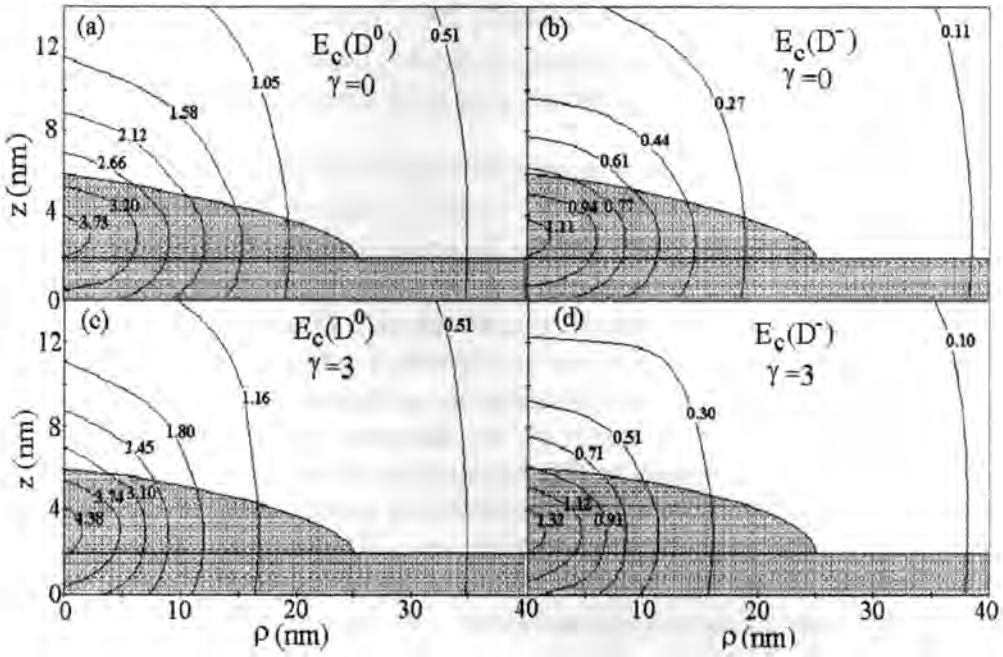

Figura 2.13 Curvas de nivel de la energía de correlación de una D^0 y un ión D^- en un plano a través de el eje de simetría de un QD en forma de lente con radio de la base 25 nm, altura de 4nm, y espesor de la capa húmeda de 2nm, para $\gamma=0$ (figura 2.13a y b) y $\gamma=3$ (figura 2.13c y d).

Los números sobre las líneas de contorno indican el valor de la energía de correlación en Ry*. Debido al apretujamiento que sufre la función de onda del electrón por la acción del campo magnético, el electrón tiende a estar más localizado en el centro del QD. Es por esta razón que las líneas de nivel de la figura inferior (figura 2.13c y d) con $\gamma=3$ llegan a estar más comprimidas a lo largo de la dirección ρ que las líneas de la figura superior (figura 2.13a y b) calculadas en ausencia de campo magnético. También se puede ver que el comportamiento de las curvas de nivel para la donadora D^o y para el ión D^- es similar y en ambos casos las energías de correlación bajo la influencia del campo magnético se incrementan cuando la donadora se localiza cerca del eje, mientras para donadoras alejadas del eje se observa un decrecimiento de la energía de correlación.

Para facilitar la interpretación de los resultados de cálculo de las energías de correlación para donadoras neutras y cargadas negativamente que se localizan por fuera del eje de simetría y en presencia de campo magnético, nosotros hemos realizado las curvas de contorno que se muestran en la figura 2.13. Estas curvas corresponden a las líneas de nivel de las energías

de correlación, $E_c(D^0)$ y $E_c(D^-)$, para donadoras localizadas en diferentes posiciones a lo largo de la sección transversal a través del eje de simetría de la lente, tomando $\gamma = 0$ (figura 2.13a y b) y $\gamma = 3$ (figura 2.13c y d). Las partes sombreadas indican la sección transversal del QD con radio $25nm$, altura $4nm$ y espesor de la capa húmeda $2nm$.

Comparando las curvas de contorno mostradas en la figura (2.13a) y (2.13b) para la donadora D^0 y para el ión D^-, se puede ver que las energías de correlación del D^- localizado cerca del eje son más grandes que las energías de correlación para la D^0 localizada en la periferia del QD, esto significa que la D^0 en la periferia está más débilmente ligada que el ión D^- localizado cerca del eje. Por ejemplo, la energía de correlación mostrada en la figura 2.13b para el ión D^- centrado es de alrededor de 1.11 Ry* mientras que la energías de correlación mostrada en la figura 2.13a para la D^0 a una distancia de 20 nm sobre la periferia del QD es menor que 1.05 Ry*. Esto significa que la transferencia del electrón desde una D^0 en la periferia a una D^0 cercana al eje del QD, es energéticamente más favorable y en consecuencia, una significativa población de iones D^- pueden aparecer en equilibrio en la vecindad del eje. Adicionalmente se puede observar en las figuras 2.13c y 2.13d, que en presencia de un campo magnético las diferencias entre las energías de correlación para el ión D^- localizado cerca del eje y para una donadora D^0 en la periferia se hacen más grandes. Por lo tanto, en la presencia de campos magnéticos intensos, el proceso de formación de iones D^- se refuerza de manera significativa.
La probabilidad de que una donadora sobre el eje, D^0_{on} se convierta en una donadora ionizada sobre el eje, D^-_{on}, después de atrapar un electrón liberado por una donadora de la periferia, D^0_{off}, de acuerdo a la reacción de intercambio de carga $D^0_{on} + D^0_{off} \rightarrow D^-_{on} + D^+_{off}$, es significativamente importante sólo si la energía ΔE requerida para remover el electrón desde la donadora en la periferia y colocarlo en la donadora sobre el eje es negativa, es decir, si la reacción se hace exotérmica. El valor de ΔE se puede estimar como la diferencia entre la energía requerida para separar al electrón desde la donadora de la periferia, $E_c(D^0_{off})$ y la energía ganada por la donadora sobre el eje, $E_c(D^-_{on})$ más la energía electrostática atractiva, U_a, entre los dos iones que se forman a causa de la reacción:

$$\Delta E = E_c(D^0_{off}) - E_c(D^-_{on}) - U_a \qquad (2.28)$$

Las energías $E_c(D^0_{off})$ y ΔE dependen fuertemente de la posición de la donadora descentrada. A fin de establecer las posiciones de las donadoras para las cuales el intercambio de carga con donadoras centradas en el eje

produce una reacción de tipo exotérmico, se han realizado las curvas de contorno que se muestran en la figura 2.14.

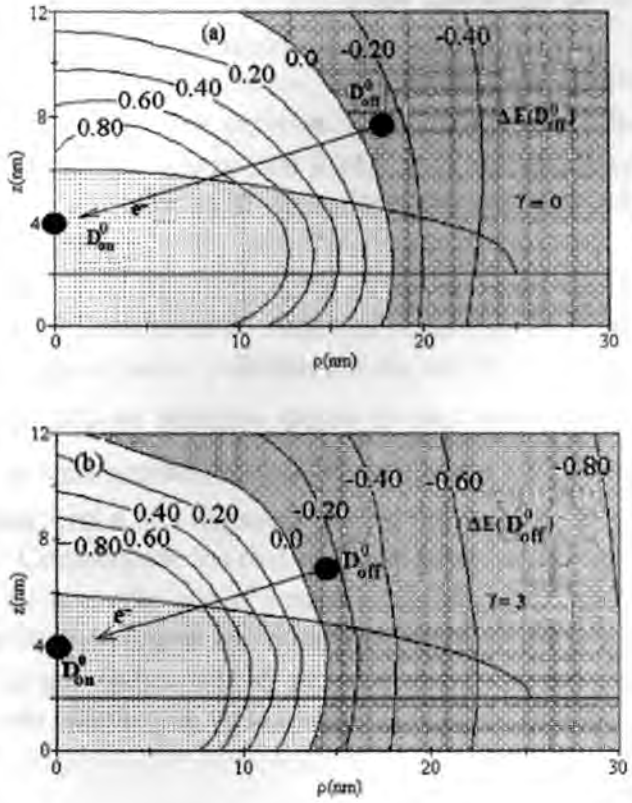

Figura 2.14 Curvas de contorno de las energías ΔE requeridas para el intercambio de carga entre donadoras localizadas en un plano que pasa a través del eje de simetría, estando las donadoras sobre y fuera del eje del QD. Las curves se hacen sin (a) y con (b) campo magnético. Las partes sombreadas de las figures indican las posiciones de las donadoras descentradas para las cuales el intercambio de carga con la donadora centrada es de carácter exotérmico.

Estas curvas corresponden a las energías ΔE requeridas para remover un electrón desde una donadora D^0_{off}, con diferentes posiciones a lo largo de la sección transversal en el plano del eje de simetría de la lente, hasta una donadora localizad a la mitad de la altura total de la lente y sobre el eje de simetría $\left(\xi_z = 0,\ \xi_\rho = d_b + d_0/2\right)$. El estudio se hace tanto en ausencia ($\gamma = 0$, figura 2.14(a)) como en presencia de campo magnético ($\gamma = 3$, figura 2.14(b)).

Las partes sombreadas de la figura sirven para indicar las posiciones de la donadora neutra descentrada, para las cuales las energías se hacen negativas

y cuando la reacción que tiene lugar en la formación del ión D^- sobre el eje del QD es de carácter exotérmico.

Se ha hecho un estimativo de U_a definida como la energía de interacción entre una carga puntual $+e$ localizada en la posición de la donadora descentrada y una carga $-e$ distribuida homogéneamente dentro de una esfera de radio $1/\alpha$(siendo αel parámetro variacional de la función de prueba de Hylleraas dada por la ecuación 2.24), cuyo radio se localiza en el punto correspondiente a la ubicación de la donadora que está sobre el eje $(\xi_\rho = 0,\ \xi_z = d_b + d_0/2)$.

Se puede ver a partir de las curvas de contorno mostradas en la figura 2.14, como la energía requerida para la formación de un D_{on}^- cae rápidamente cuando la donadora D_{off}^0 se remueve desde el eje, volviéndose negativa (partes oscuras de la zona sombreada) cuando la donadora D_{off}^0, en ausencia de campo magnético, está a una distancia del eje mayor que 18 nm y de 13 nm cuando $\gamma = 3$. Comparando las curvas de contorno en las figuras 2.14a y 2.14 b, es fácil de observar que el incremento del campo magnético da lugar a una expansión de la región con donadoras en la periferia y valores de ΔE es negativos, lo que indica que el proceso de formación del ión D^- sobre el eje del punto cuántico se ve favorecido por la existencia del campo magnético externo.