

ENERGÍA DE ENLACE DE UNA IMPUREZA HIDROGENOIDE EN UN POZO  
CUÁNTICO DE  
GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs

VICTOR MANUEL BOHÓRQUEZ GUEVARA

Trabajo de Grado presentado como requisito parcial para optar al título de Físico

Director  
NELSON PORRAS MONTENEGRO  
Ph. D.

UNIVERSIDAD DEL VALLE  
FACULTAD DE CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS  
PROGRAMA ACADÉMICO DE FÍSICA  
SANTIAGO DE CALI  
JUNIO DE 2006

# ABSTRACT

In this work, the binding energy of hydrogenic impurity in a GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum well is calculated as a function of the well width and the impurity position inside the quantum well. The calculations are performed within the effective-mass approximation and using a variational method for different In concentrations ( $0 < x < 0.4$ ) in GaAs. We have kept in mind that the confinement potential is modified by the strain due to the differences of the lattice constants between GaAs and the  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , which is included in the confinement potential as Atanasov suggested, *Phys. Rev. B* 50,14381 (1994). We have found a very good agreement with experimental results by Reynolds, *Phys. Rev. B* 43, 11156 (1992).

# RESUMEN

En este trabajo, se calculo la energía de enlace de una impureza hidrogenoide en un pozo cuántico de GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  como función del ancho del pozo y la posición de la impureza dentro del pozo cuántico. Los cálculos se realizaron teniendo en cuenta la aproximación de la masa efectiva y un método variacional para diferentes concentraciones de In ( $0 < x < 0.4$ ) en GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Se tuvo en cuenta que el confinamiento es modificado por las tensiones ocasionadas debido a la diferencia en la constante de red entre el el GaAs y el  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , por lo que se incluyo el potencial de confinamiento sugerido por Atanasov, *Phys. Rev. B* 50, 14381 (1994). Se encontró que los resultados concuerdan con las medidas experimentales hechas por Reynolds, *Phys. Rev. B* 43, 11156 (1992).

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>5</b>
1.1. Antecedentes . . . . .	7
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>9</b>
2.1. Confinamiento Cuántico en Semiconductores . . . . .	9
2.2. Aproximación de Masa Efectiva . . . . .	12
2.3. Método y Función Variacional . . . . .	15
<b>3. Estados de Impurezas Hidrogenoides en Pozos Cuánticos de GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs</b>	<b>18</b>
3.1. Estado Fundamental . . . . .	18
3.2. Cálculo de la Energía de Enlace de Impurezas Hidrogenoides en un Pozo Cuántico . . . . .	21
<b>4. Resultados y Análisis</b>	<b>25</b>
4.1. Comparaciones de Cálculos Analíticos . . . . .	25
4.2. Estado Fundamental Para Electrones y Huecos . . . . .	26
4.3. Estado de Impureza Para Electrones y Huecos . . . . .	29
4.4. Energía de Enlace Para Electrones y Huecos . . . . .	30
4.5. Efectos de la tensión . . . . .	35
4.6. Algunas comparaciones . . . . .	36
<b>5. Conclusiones y Perspectivas</b>	<b>39</b>
<b>6. Apéndice: Rutina Escrita En Fortran</b>	<b>41</b>

# Capítulo 1

## Introducción

El conocimiento de fenómenos a nivel cuántico ha permitido al hombre desarrollar una serie de dispositivos de baja dimensionalidad para la aplicación en el desarrollo de aparatos de información. Los transistores de alta movilidad, el diodo emisor de luz y los láseres semiconductores constituyen algunos de los dispositivos electrónicos más usados que involucran sistemas de confinamiento cuántico.<sup>[1]</sup> Como su nombre lo indica, estos sistemas se encargan de confinar, esto es, restringir el movimiento de los portadores de carga en ciertas direcciones dependiendo del arreglo que se halla diseñado, por ejemplo: los pozos cuánticos (QWs) que restringen el movimiento en una dirección, los hilos cuánticos (QWWs) en dos direcciones, y los puntos cuánticos (QDs) en todas las direcciones<sup>[1, 2]</sup>.

Es bien conocido que los compuestos semiconductores formados con elementos III y V de la tabla periódica como el Al,Ga,In del grupo III y As,Sb,N del grupo V de la tabla periódica, entre otros, juegan un papel relevante en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos<sup>[3]</sup>. El acople entre **GaAs** e **InGaAs** pertenecientes a esta familia de semiconductores presentan propiedades de interés práctico que motivaron el desarrollo de este trabajo de grado.

Los semiconductores presentan una banda de energía prohibida que impide que los electrones que se encuentran en la banda de valencia sean promovidos a

la banda de conducción a menos que obtengan la energía suficiente para lograrlo. Esta característica manipulada ingeniosamente permite la construcción de heteroestructuras con confinamiento cuántico para los portadores de carga. Rodeando un semiconductor por otros de banda prohibida superior se logra que las partículas que se muevan libremente en el semiconductor con banda prohibida menor no puedan circular en los materiales con mayor banda prohibida, ya que tendrían que obtener energía extra para poder desplazarse dentro de estos materiales.

Acoplar semiconductores con banda de energía prohibida diferente no es un trabajo trivial, más aún cuando se intenta producir barreras de confinamiento apreciables, donde el mayor inconveniente ocurre debido a las tensiones creadas por la diferencia en la constante de red entre los compuestos<sup>[4]</sup>, este factor es clave cuando se trata de escoger el material adecuado. En este trabajo se usaron los compuestos **GaAs** e **In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**, cuya unión se realiza de tal forma, que modificando la concentración (**x**) de **In** en **In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**, se pueda tener un balance entre el potencial de confinamiento y las tensiones producidas por la diferencia en la constante de red.

Una vez construida la barrera de potencial se hace necesaria la propiedad que tienen los compuesto semiconductores de permitir dopar su estructura cristalina mediante la introducción de impurezas<sup>[3]</sup> (*las impurezas pueden ser donadoras o aceptoras*). Este sistema puede ser modelado por medio de la mecánica cuántica debido a la dimensión del confinamiento geométrico que experimentan los portadores de carga<sup>[5]</sup>. En la practica las partículas donadas ó aceptadas por las impurezas no son partículas libres, estas se encuentran en desbalance electrónico produciendo una atracción culombiana entre el portador de carga y la impureza. Esta atracción es similar a la del átomo de hidrógeno, y nos permite utilizar un modelo tipo hidrogenoide, para calcular la energía de enlace de la impureza, al resolver la ecuación de schrödinger de este sistema usando la aproximación de masa efectiva y un método variacional<sup>[6]</sup>.

## 1.1. Antecedentes

El primero en realizar el modelo para la energía de enlace, de una impureza tipo hidrogenoide, confinada en un pozo cuántico fue G.Bastard<sup>[6]</sup>, en el año 1981. Posteriormente se han realizado múltiples trabajos similares, en especial sobre el sistema GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As/GaAs, donde se deben tener presentes parámetros tales como la masa reducida, concentración del Aluminio y todas aquellas cantidades intrínsecas de los materiales que influyen directamente cuando se trata de predecir resultados que reflejen la realidad experimental. Existen una gran cantidad de artículos sobre este aspecto, tales como el de C.Mailhiot<sup>[7]</sup>, donde en su modelo sobre el GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As calcula el efecto que sufre la energía de enlace en función de la posición de la impureza en la heteroestructura, usando la aproximación de la masa efectiva, pero a diferencia de G. Bastard tiene en cuenta que la barrera de potencial es finita y dependiente de la concentración del Al; Zhen-Yan Deng<sup>[8]</sup> trata el mismo sistema, incluyendo el término del potencial imagen en el hamiltoniano de este arreglo. El comportamiento de los parámetros internos (*masa, permitividad dieléctrica, etc.*) que están presentes en los sistemas de confinamiento cuántico se han estudiado ampliamente, y hoy tenemos gran cantidad de artículos al respecto<sup>[9]</sup>.

Los artículos anteriormente mencionados y otros tantos trabajos de investigación tienen al GaAs como principal material de estudio debido a sus excelentes propiedades a la hora de construir heteroestructuras, propiedades que han sido ampliamente analizadas y justificadas en muchos trabajos anteriores tal como el publicado por J.S. Blakemore<sup>[10]</sup>. El otro material de interés para la formación de pozos cuánticos y que se usara en este proyecto es el In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, formando estos dos materiales el sistema tipo pozo cuántico GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs de gran interés, por ejemplo en la construcción de transistores de alta movilidad y en la futura optoelectrónica. El ISOM (*Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y Microtecnología*)<sup>[11]</sup> resume lo investigado en múltiples trabajos sobre la importancia de este arreglo. En el ISOM se han concentrado principalmente en la aplicación de láseres

de estado sólido en la comunicación óptica en el rango de 1,0 a 1,5  $\mu\text{m}$ , con el propósito de obtener emisión de luz en el infrarrojo. Ellos expresan que los láseres en el rango de 1,0 a 1,3  $\mu\text{m}$ , con decenas de mW de potencia, en áreas como la detección óptica de gases, instrumentación científica, metrología, bombeo de matrices ópticas de alta potencia, así como comunicación entre satélites sería posible mediante el desarrollo de pozos cuánticos de GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs, debido a que hasta ahora estas aplicaciones no se cubrían de manera satisfactoria por tecnologías ya existentes y maduras basadas en GaInAsP/GaAs, por el pobre confinamiento de portadores debido a las limitadas potencias de salida, que tampoco se logran con el tradicional sistema de materiales InGaAs/AlGaAs/(100)GaAs, ya que no permite alcanzar emisiones a más de 1.06  $\mu\text{m}$  por la aparición de dislocaciones en el pozo tensionado de InGaAs. Sin embargo existen pocos trabajos sobre el estudio de estados de impureza en pozos cuánticos del compuesto GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs. Este es el tema que será abordado en el presente trabajo de grado.

El Grupo de Física Teórica del Estado Sólido, perteneciente a la Universidad del Valle ha estudiado modelos de sistemas similares al tratado en este trabajo. El profesor Nelson Porras Montenegro quien tiene un amplio recorrido en este tema, en 1992 <sup>[13]</sup> calculó la energía de enlace para una impureza hidrogenoide en un punto cuántico esférico GaAs-(Ga,Al)As, en 1998 <sup>[14]</sup> hizo lo mismo con la energía de enlace para una impureza donadora confinada en un hilo cuántico cuando se aplica campo eléctrico, en 1999 <sup>[15]</sup> determinó numéricamente las transiciones infrarrojas en el punto cuántico esférico de GaAs cuando se aplica campo magnético. Existen otra gran cantidad de artículos publicados por el grupo <sup>[16, 17, 18, 19, 20, 21]</sup> que se relacionan con el tema de este trabajo de grado.



## Capítulo 2

# Marco Teórico

Este capítulo está dedicado a la muestra del marco teórico usado en el cálculo de la energía de enlace para una impureza hidrogenoide ubicada en un pozo cuántico de GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs.

### 2.1. Confinamiento Cuántico en Semiconductores

En este trabajo de grado analizamos el confinamiento cuántico de electrones y huecos que son donados por una impureza, así como los estados de impureza en el sistema GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs. El confinamiento se logra cuando un material de un gap determinado es rodeado por otro material de mayor gap. La **figura 2.1** nos indica que el InAs tiene un gap inferior al GaAs, y que al introducir pequeñas concentraciones  $x$ , de In en GaAs se forma el compuesto  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  obteniendo un material con una constante de red aproximada al GaAs, pero con un gap inferior.

La **figura 2.2 (b)** esquematiza aproximadamente cómo se produce el confinamiento energético cuando se diseña la heteroestructura de la **figura 2.2 (a)**. El confinamiento cuántico que presencian los portadores de carga en un pozo cuántico de GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs se obtiene gracias a la diferencia del gap que existe entre los dos materiales, el GaAs y  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

## 2.1. CONFINAMIENTO CUÁNTICO EN SEMICONDUCTORES

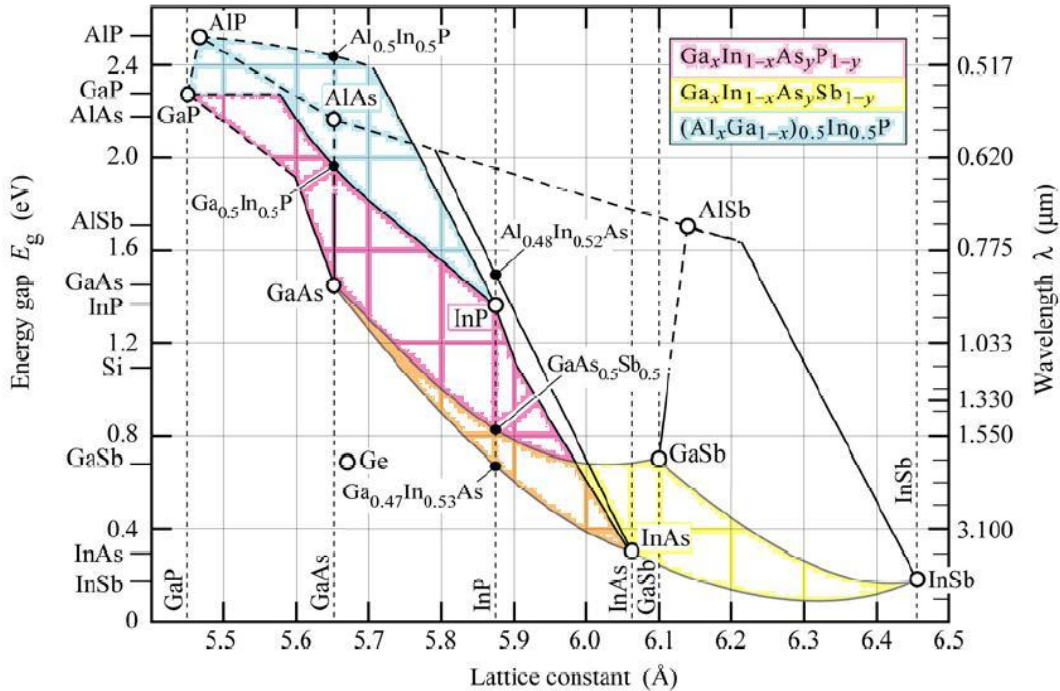


Figura 2.1: Esquema que nos permite contrastar la constante de red y el gap de los materiales  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  y GaAs

Cuando se tiene un electrón en la banda de conducción ó un hueco en la banda de valencia, decimos que tenemos una particular libre en el material semiconductor, donde en nuestro trabajo el portador de carga puede moverse en el GaAs siempre que supere las barreras  $V_e$  y  $V_h$  respectivamente. Si esto no ocurre los portadores quedan confinados en el material de gap inferior.

El GaAs que es uno de los compuestos semiconductores que se usan en este trabajo, presenta una estructura de bandas que permite que en  $\mathbf{k}=\mathbf{0}$ , la transición electrónica ocurra desde el máximo de la banda de conducción, al mínimo de la banda de valencia. Esta característica permite que la aproximación de la masa efectiva sea posible, tal como se vera en la siguiente sección. Para poder aplicar esta aproximación en el compuesto  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  (figura 2.3) necesitamos garantizar que la concentración de In sea lo suficientemente pequeña para que la estructura

## 2.1. CONFINAMIENTO CUÁNTICO EN SEMICONDUCTORES

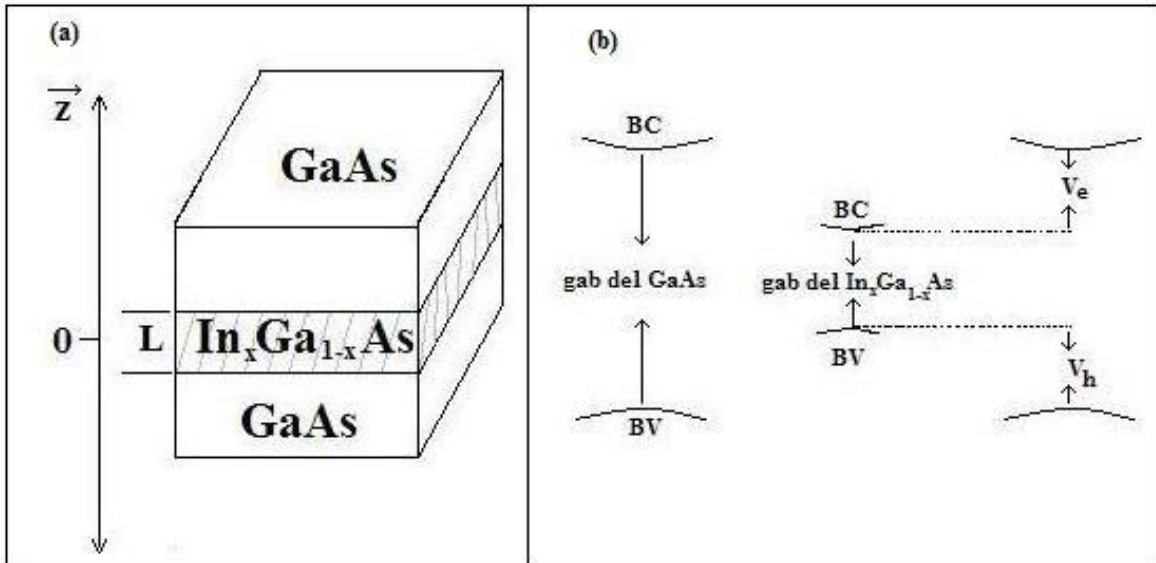


Figura 2.2: Esquema de un pozo cuántico semiconductor. (a) Forma como se encuentran acoplados los materiales GaAs e  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . (b) Esquema de su estructura de bandas, BC:= Banda de conducción, BV:= Banda de valencia,  $V_e$ := Potencial de confinamiento electrónico,  $V_h$  := Potencial de confinamiento huecos.

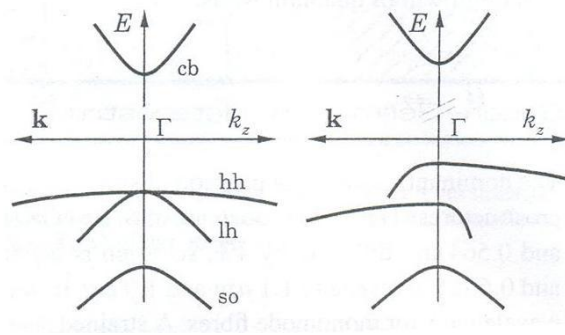


Figura 2.3: En la parte izquierda, la estructura de bandas para el GaAs, en la derecha la estructura de bandas del acople  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  con GaAs<sup>[26]</sup>.

de bandas sea similar a la del GaAs.

Introduciendo una impureza **Figura 2.4**, (esta puede ser donadora o aceptora), en el material confinado garantizamos portadores de carga en un estado semi-libre. El portador de carga no se encuentra totalmente libre porque el núcleo de la im-

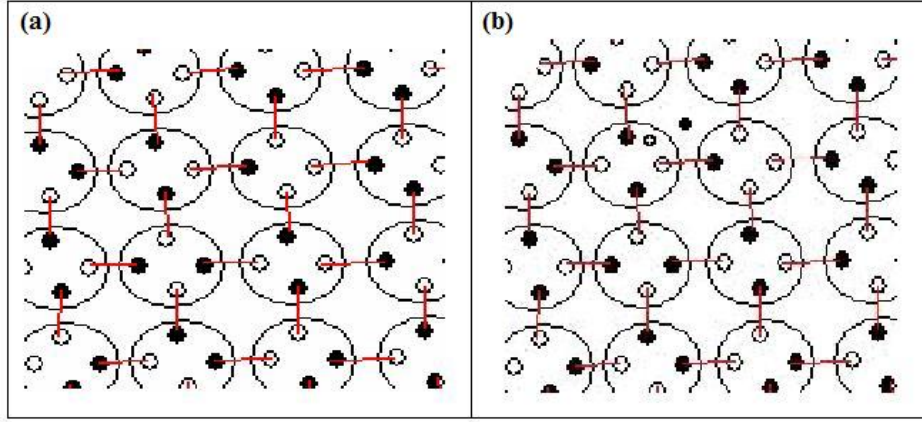


Figura 2.4: (a) semiconductor en su forma común, (b) Semiconductor dopado

pureza queda descompensado electrónicamente, y atrae la partícula donada por medio de una interacción coulombiana. Tendiendo en cuenta esta interacción podremos calcular la energía de enlace en un pozo cuántico de GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs.

## 2.2. Aproximación de Masa Efectiva

Para calcular la energía de enlace de una impureza hidrogenoide en un pozo cuántico de GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs, se plantea el hamiltoniano que describe este sistema<sup>[22, 23]</sup>,

$$\hat{H}\Psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + W(\vec{r}) - \frac{e^2}{r} + V(z) \right] \Psi = \hat{E}\Psi, \quad (2.1)$$

donde  $m$  es la masa de la particular libre (en el análisis que se hará a continuación asumiremos que la masa corresponde a la del electrón, más adelante veremos que el análisis para un hueco es análogo),  $W(\vec{r})$  es el potencial cristalino periódico que obedece la siguiente ley,

$$W(\vec{r}) = W\left(\vec{r} + \sum_i n_i \vec{a}_i\right), \quad (2.2)$$

## 2.2. APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

---

donde  $\vec{r}$  es un punto arbitrario en la red,  $n_i$  es un entero y  $\vec{a}_i$   $i = 1, 2, 3$  los tres vectores base de la red de Bravais. Finalmente el termino  $\frac{-e^2}{r}$  y  $V(z)$  son el potencial coulombiano y el potencial de confinamiento respectivamente.

Planteada la **ecuación 2.1** recurrimos a la aproximación de masa efectiva, buscando obtener un Hamiltoniano de la forma,

$$H\Psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{r} + V(z) \right] \Psi = \hat{E}\Psi, \quad (2.3)$$

en la que el termino  $m^*$  se conoce como la masa efectiva, la cual tiene la información de la red, es diferente para todos los materiales y su valor es medido experimentalmente. Gracias a la aproximación de masa efectiva obviamos el termino  $W(\vec{r})$ , y nos concentramos en resolver la ecuación **(2.3)**.

El modelo de masa efectiva plantea la siguiente transformación,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + W(\vec{r}) \longrightarrow -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2. \quad (2.4)$$

Para llevar a cabo esta transformación tomamos de la ecuación **(2.1)** el termino,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + W(\vec{r}) \right] \hat{\Psi} = \hat{E}_c\hat{\Psi}, \quad (2.5)$$

donde  $\hat{\Psi}$  es la función de Bloch y  $\hat{E}_c$  la energía asociada al electrón libre en la banda de conducción. Al aplicar  $\hat{\Psi} = u_{\alpha,\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$  encontramos que satisface la siguiente ecuación,

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - i\frac{\hbar^2}{m}\left(\vec{k}\vec{\nabla}\right) + W(\vec{r}) \right] u_{\alpha,\vec{k}} = \left[ E_\alpha(\vec{k}) - \frac{\hbar^2k^2}{2m} \right] u_{\alpha,\vec{k}}, \quad (2.6)$$

donde  $\alpha$  indica el número de la banda de energía y  $\vec{k}$  es el vector de onda. Si

## 2.2. APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

---

observamos la estructura de bandas del GaAs notaremos que en  $\vec{k} = 0$  la transición electrónica se da del máximo de la banda de valencia, al mínimo de la banda de conducción, llamando a este comportamiento transición de gap directo. De este análisis tenemos que en  $\vec{k} \rightarrow 0$  podemos transformar la ecuación **(2.6)** en,

$$\left[ H_c + W(\vec{k}) \right] u_{\alpha,0} = \epsilon_c u_{\alpha,0}, \quad (2.7)$$

donde

$$H_c = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + W(\vec{r}) \quad (2.8)$$

y

$$W(\vec{k}) = -i\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}\cdot\vec{\nabla} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \longrightarrow 0 \quad \text{cuando } \vec{k} \rightarrow 0. \quad (2.9)$$

Debido a que  $W(\vec{k})$  se hace pequeño comparado con los otros términos del hamiltoniano, se toma como un potencial perturbativo y se aplica el método de perturbación a la ecuación **(2.7)**, obteniendo el valor de la energía en el mínimo de la banda de conducción,

$$\hat{E}_c = E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{m^2} \int_{V_0} \frac{|u_{v,0}^* \vec{k} \cdot \vec{P} u_{v,0}|^2}{E_c(\vec{0}) - E_v(\vec{0})} dV_0, \quad (2.10)$$

donde  $\vec{k} \cdot \vec{P} = -i\hbar k_j \cdot P_j$ ,  $E_c(\vec{0}) - E_v(\vec{0}) = E_g$ , y  $E_g$  es el gap del material. Con estos datos reescribimos la **ecuación 2.10** como,

$$\hat{E}_c = E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.11)$$

donde

$$\frac{1}{m^*} = \left[ \frac{1}{m} + 2 \int_{V_0} \frac{|u_{v,0}^* P_j u_{v,0}|^2}{E_g} dV_0 \right], \quad (2.12)$$

### 2.3. MÉTODO Y FUNCIÓN VARIACIONAL

---

$\frac{1}{m^*}$  es el llamado tensor de masa efectiva. Anteriormente se mencionó que esta cantidad es medida experimentalmente, y como su expresión lo indica, tiene la información de la red expresada en la componente del momentum y el gap del material en estudio.

Basándonos en la ecuación (2.11) y reemplazando en (2.7) obtenemos,

$$\left[ H_c + W(\vec{k}) \right] \Psi = \left[ E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \right] \Psi, \quad (2.13)$$

y transformando de la forma  $\vec{k} \rightarrow -i\vec{\nabla}$ , podremos finalmente tomar la ecuación (2.1) y operar de la siguiente manera,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + W(\vec{r}) \longrightarrow H_c + W(\vec{k}) \longrightarrow E_c(\vec{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.14)$$

para lograr reescribir el hamiltoniano de la ecuación (2.1) de una forma mas cómoda a la hora de desarrollar los cálculos correspondientes,

$$H\Psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} + V(z) \right] \Psi. \quad (2.15)$$

### 2.3. Método y Función Variacional

El uso del método variacional y la función variacional<sup>[24]</sup> se justificarán en este capítulo.

#### Método Variacional

Sea el ket  $|\psi\rangle$  el vector de estado que describe el sistema a tratar, de tal forma que,

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0, \quad (2.16)$$

### 2.3. MÉTODO Y FUNCIÓN VARIACIONAL

---

donde  $E_0$  es el estado fundamental del sistema, y recordando la siguiente propiedad,

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle, \quad (2.17)$$

podremos de la ecuación anterior deducir fácilmente que  $E_n \geq E_0$ , donde  $E_n = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$ .

Si tomamos un ket  $|\psi(\lambda)\rangle$  dependiente de un parámetro  $\lambda$ , donde todo indica que  $|\psi(\lambda)\rangle$  es el mejor ket que describe nuestro sistema, entonces tendremos la certeza que al aplicar el hamiltoniano  $H$  en estudio sobre nuestro ket, solo faltaría minimizar  $E_n$  respecto a  $\lambda$  para obtener una energía cercana a  $E_0$ , siempre y cuando el ket que se escoja sea el más adecuado.

## Función Variacional

Obtener la función variacional adecuada que describa un sistema de forma correcta no es tarea fácil, por lo que en este trabajo de grado la función de onda sera justificada a partir del análisis del hamiltoniano planteado en la ecuación **(2.15)**,

$$H\Psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{r} + V(z) \right] \Psi. \quad (2.18)$$

Si de la ecuación anterior omitimos el potencial de confinamiento  $V(z)$ , veremos que tenemos el Hamiltoniano que describe el átomo de hidrógeno, en otras palabras nuestro sistema es similar al átomo de hidrógeno pero presentando confinamiento en una de las direcciones de movimiento ( $z$  por ejemplo), indicando que existe un espesor que se debe tener presente (el ancho del pozo cuántico).

Analíticamente se conoce la función de onda para el átomo de hidrógeno,

$$\Psi(3D) \propto e^{-r/a_0}, \quad (2.19)$$



### 2.3. MÉTODO Y FUNCIÓN VARIACIONAL

---

donde  $a_0$  es el radio de Bohr. De la misma forma se obtiene la solución para el átomo de hidrógeno dos dimensional,

$$\Psi(2D) \propto e^{-2r/a_0}, \quad (2.20)$$

donde para el caso bidimensional  $r = \rho$ .

Comparando la función de onda del átomo de hidrógeno tridimensional y dos dimensional, vemos que son proporcionales a  $e^{-r/\lambda}$ , donde  $\lambda$  es  $a_0$  y  $\frac{a_0}{2}$  respectivamente. Esta comparación nos permite deducir que nuestro sistema se encuentra entre estos dos límites, ya que el pozo cuántico tratado en este proyecto de grado tiene un ancho de confinamiento que impide que el movimiento sea libre en todas las direcciones, y sin embargo no lo restringe a las dos dimensiones. Teniendo en cuenta que el confinamiento presenta un espesor en  $z$ , inferimos que la función de onda que describe el sistema en estudio, será proporcional a  $e^{-r/\lambda}$ , donde  $\lambda$  será el parámetro variacional a determinar para el cálculo de la energía de enlace.

## Capítulo 3

### Estados de Impurezas

### Hidrogenoides en Pozos

### Cuánticos de

### GaAs/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs

En este capítulo se calcula en primera instancia, la energía del estado fundamental que presentan los portadores de carga en el pozo cuántico propuesto en este trabajo de grado, sin tener en cuenta la atracción culombiana, que en la segunda parte estará presente y nos permitirá calcular la energía de enlace.

#### 3.1. Estado Fundamental

El estado fundamental de una partícula confinada, en un pozo cuántico de barrera finita es un problema conocido y resuelto en mecánica cuántica<sup>[25]</sup>. Las funciones de onda que describen el estado del portador de carga, en cada región del

### 3.1. ESTADO FUNDAMENTAL

sistema esquematizado en la **fig. 3.1**, son las siguientes:

$$\Psi_I = A_1 e^{\alpha z} \quad (3.1)$$

$$\Psi_{II} = B_1 e^{ikz} + B_1 e^{-ikz} \quad (3.2)$$

$$\Psi_{III} = A_2 e^{-\alpha z}, \quad (3.3)$$

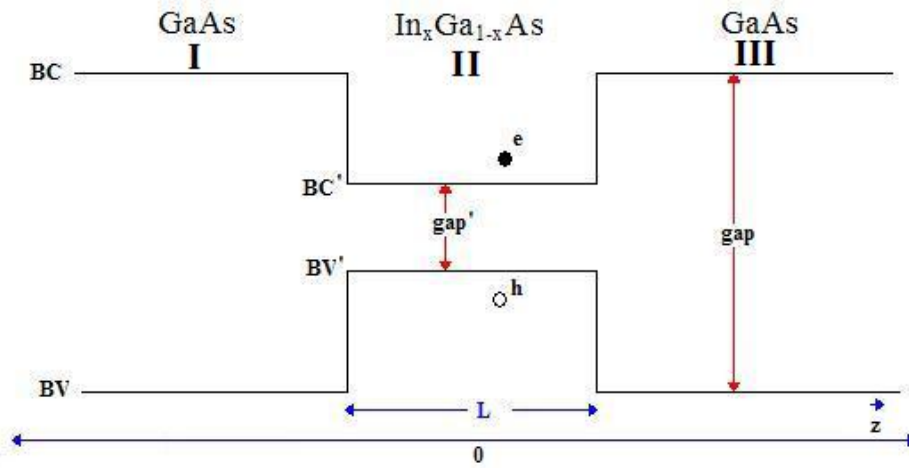


Figura 3.1: Diagrama de energía de confinamiento Vs Ancho del Pozo

donde el hamiltoniano para las regiones *I* y *III* se encuentra bajo la presencia de una barrera de potencial  $V(z) = V$ ,

$$H_I \Psi_I = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V \right] \Psi_I = E_0 \Psi_I \quad (3.4)$$

$$H_{II} \Psi_{II} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_2^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \Psi_{II} = E_0 \Psi_{II} \quad (3.5)$$

$$H_{III} \Psi_{III} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_3^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V \right] \Psi_{III} = E_0 \Psi_{III}. \quad (3.6)$$

Las derivadas con respecto a *x* y *y* no se toman en cuenta, debido a que la partícula no está confinada en estas dos direcciones. Notemos además que la masa efectiva

### 3.1. ESTADO FUNDAMENTAL

---

$m^*$  es la misma en las regiones I y III  $m_1^* = m_3^* \neq m_2^*$ .

Evaluando la continuidad de la función y su derivada en la frontera encontramos finalmente las funciones de onda que describen nuestro sistema, y las ecuaciones para obtener la energía del estado fundamental  $E_0$ ,

$$\Psi_I = N \cos\left(\frac{kL}{2}\right) e^{\alpha \frac{L}{2}} e^{\alpha z} \quad (3.7)$$

$$\Psi_{II} = N \cos(kz) \quad (3.8)$$

$$\Psi_{III} = N \cos\left(\frac{kL}{2}\right) e^{\alpha \frac{L}{2}} e^{-\alpha z}, \quad (3.9)$$

donde,

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_1^*}{\hbar^2}(V - E_0)}, \quad (3.10)$$

$$k = \sqrt{\frac{2m_2^*}{\hbar^2}E_0}, \quad (3.11)$$

$N$  es la constante de normalización y  $L$  el ancho del pozo cuántico.

La ecuación trascendental para hallar la energía del estado fundamental es:

$$\tan^2\left(\frac{kL}{2}\right) - \left(\frac{k_0}{k}\right)^2 + \frac{m_1^*}{m_2^*} = 0, \quad (3.12)$$

con

$$k_0^2 = \frac{2m_1^*V}{\hbar^2} \quad (3.13)$$

y

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2^*}. \quad (3.14)$$

Las tres ecuaciones anteriores dan cuenta de la energía en el estado fundamental para una partícula confinada en un pozo cuántico de GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs de barrera de potencial  $V$ .

## 3.2. Cálculo de la Energía de Enlace de Impurezas Hidrogenoides en un Pozo Cuántico

El  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  confinado por el GaAs, puede doparse por una impureza donadora (aceptora), donde esta impureza crea un nivel energético para su portador donado(aceptado). El nivel se encuentra por debajo (encima) del estado fundamental, sin impureza presente, indicando que el electrón (hueco) esta interactuando de forma atractiva con la impureza. Esto hace que se remplace el hamiltoniano para el caso de una partícula libre (sección anterior) por un hamiltoniano que tenga en cuenta el término atractivo, en forma análoga al hamiltoniano del átomo de hidrógeno,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_i^2}\nabla^2 - \frac{e^2}{r\kappa_i} + V(z), \quad (3.15)$$

donde  $i = 1, 2, 3$  y  $\kappa$  es la constante dieléctrica en cada región. En el modelo teórico se justificó que la función de onda que se aproxima a la solución del hamiltoniano anterior es proporcional a  $e^{-\frac{r}{\lambda}}$ , y para el caso en que el termino culombiano  $-\frac{e^2}{r_i}$  no esta presente, las funciones propias del hamiltoniano son conocidas (ecuaciones 3.9-3.11), y por tanto cuando se tiene en cuenta la presencia de la impureza, la función de prueba tiene la siguiente forma:

$$\Psi_I = N \cos\left(\frac{kL}{2}\right) e^{\alpha\frac{L}{2}} e^{\alpha z} e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (3.16)$$

$$\Psi_{II} = N \cos(kz) e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (3.17)$$

$$\Psi_{III} = N \cos\left(\frac{kL}{2}\right) e^{\alpha\frac{L}{2}} e^{-\alpha z} e^{-\frac{r}{\lambda}}, \quad (3.18)$$

donde  $r$  es la norma del radio vector que separa la partícula donada (aceptada), de la impureza donadora (aceptora),

### 3.2. CÁLCULO DE LA ENERGÍA DE ENLACE DE IMPUREZAS HIDROGENOIDES EN UN POZO CUÁNTICO

---

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z')^2} = \sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}. \quad (3.19)$$

Como la partícula donada es libre de moverse en el plano azimutal, los valores de  $\rho$  varían de 0 a  $\infty$  sin importar la posición de la impureza en este plano.  $z'$  de la ecuación anterior, hace referencia a la posición de la impureza en el eje  $z$ .

La normalización de las funciones de onda, en coordenadas cilíndricas, está dada por,

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 = \int_A \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} |\Psi_I|^2 d^3r + \int_A \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} |\Psi_{II}|^2 d^3r + \int_A \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} |\Psi_{III}|^2 d^3r, \quad (3.20)$$

donde ( $d^3r = d\varphi\rho d\rho dz$ ) y ( $\int_A = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty}$ ), encontrando que,

$$N^2 = \left( \frac{2}{\pi\lambda^3} \right) \beta^{-1}, \quad (3.21)$$

con

$$\begin{aligned} \beta = 1 - e^{-\frac{L}{\lambda}} \cosh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right) + \frac{\cos(2kz')}{(1+k^2\lambda^2)^2} + \left( \frac{-\cos(kL)}{(1+k^2\lambda^2)^2} - \frac{L}{2\lambda} \cdot \frac{1+k^2\lambda^2 + \cos(kL)}{1+k^2\lambda^2} \right) e^{-\frac{L}{\lambda}} \cosh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right) + \\ \frac{z'}{\lambda} \cdot \frac{1+k^2\lambda^2 + \cos(kL)}{1+k^2\lambda^2} \cdot e^{-\frac{L}{\lambda}} \sinh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right) + \frac{(3+k^2\lambda^2)k\lambda}{2(1+k^2\lambda^2)^2} \cdot e^{-\frac{L}{\lambda}} \sin(kL) \cosh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right) + \\ \frac{\frac{Lk}{2} \cdot \cosh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right) - kz' \sinh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right)}{1+k^2\lambda^2} \cdot e^{-\frac{L}{\lambda}} \sin(kL) + \frac{\frac{L}{\lambda} + 1}{1+\alpha\lambda} \cdot e^{-\frac{L}{\lambda}} \cos^2\left(\frac{kL}{2}\right) \cosh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right) + \\ \frac{\frac{1}{1+\alpha\lambda} - \frac{2z'}{\lambda}}{1+\alpha\lambda} \cdot e^{-\frac{L}{\lambda}} \cos^2\left(\frac{kL}{2}\right) \sinh\left(\frac{2z'}{\lambda}\right). \end{aligned} \quad (3.22)$$

La energía del nivel de impureza se calcula así,

### 3.2. CÁLCULO DE LA ENERGÍA DE ENLACE DE IMPUREZAS HIDROGENOIDES EN UN POZO CUÁNTICO

---

$$\begin{aligned}
E_\lambda &= \langle \Psi_I | H | \Psi_I \rangle + \langle \Psi_{II} | H | \Psi_{II} \rangle + \langle \Psi_{III} | H | \Psi_{III} \rangle = \\
&\frac{-\hbar^2}{2m_1^*} \int_A \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \Psi_I^* \cdot \frac{\partial^2 \Psi_I}{\partial z^2} d^3 r + \frac{-\hbar^2}{2m_2^*} \int_A \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \Psi_{II}^* \cdot \frac{\partial^2 \Psi_{II}}{\partial z^2} d^3 r + \frac{-\hbar^2}{2m_1^*} \int_A \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} \Psi_{III}^* \cdot \frac{\partial^2 \Psi_{III}}{\partial z^2} d^3 r \\
&\quad - \frac{e^2}{\kappa_1} \left[ \int_A \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} \frac{|\Psi_I|^2}{r} d^3 r + \int_A \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} \frac{|\Psi_{III}|^2}{r} d^3 r \right] - \frac{e^2}{\kappa_2} \int_A \int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} \frac{|\Psi_{II}|^2}{r} d^3 r + \\
&\quad V \left[ \int_A \int_{-\infty}^{-\frac{L}{2}} |\Psi_I|^2 d^3 r + \int_A \int_{\frac{L}{2}}^{\infty} |\Psi_{III}|^2 d^3 r \right],
\end{aligned} \tag{3.23}$$

hallando que:

$$\begin{aligned}
E_\lambda &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m_2^*} + \frac{\hbar^2}{2m_2^* \lambda^2} + \left( \frac{\hbar^2}{m_1^* \lambda} - \frac{e^2}{\kappa_1} \right) \frac{\pi N^2 \lambda^2}{1 + \alpha \lambda} \cdot \cos^2 \left( \frac{kL}{2} \right) \cosh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) e^{-\frac{L}{\lambda}} - \frac{\hbar^2}{2\mu \lambda^2} (A_1 + A_3) \\
&\quad - \frac{e^2 \pi N^2 \lambda^2}{2\kappa_2} \left[ 1 + \frac{\cos(2kz')}{1 + k^2 \lambda^2} - \frac{k^2 \lambda^2 + 1 + \cos(kL)}{1 + k^2 \lambda^2} \cdot e^{-\frac{L}{\lambda}} \cosh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) + \frac{k \lambda e^{-\frac{L}{\lambda}} \sin(kL) \cosh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right)}{1 + k^2 \lambda^2} \right] \\
&\quad + \frac{\hbar^2}{2m_1^*} \frac{\pi \lambda N^2 \alpha}{1 + \alpha \lambda} \cos^2 \left( \frac{kL}{2} \right) e^{-\frac{L}{\lambda}} \left[ 2z' \sinh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) - L \cosh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) - \frac{\lambda}{1 + \alpha \lambda} \cosh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) \right] \\
&\quad + \frac{\hbar^2 \pi N^2}{2m_2^*} [1 + \cos(kL)] e^{-\frac{L}{\lambda}} \left[ \frac{L}{2} \cosh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) - z' \sinh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) \right],
\end{aligned} \tag{3.24}$$

donde  $\mu = \frac{m_1^* m_2^*}{m_1^* + m_2^*}$ , y

$$A_1 + A_3 = \frac{\lambda^3 \pi N^2}{2} \left[ \frac{\left( \frac{L}{\lambda} + 1 + \frac{1}{1 + \alpha \lambda} \right)}{1 + \alpha \lambda} e^{-\frac{L}{\lambda}} \cos^2 \left( \frac{kL}{2} \right) \cosh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) - \frac{\frac{2z'}{\lambda}}{1 + \alpha \lambda} e^{-\frac{L}{\lambda}} \cos^2 \left( \frac{kL}{2} \right) \sinh \left( \frac{2z'}{\lambda} \right) \right]. \tag{3.25}$$

### 3.2. CÁLCULO DE LA ENERGÍA DE ENLACE DE IMPUREZAS HIDROGENOIDES EN UN POZO CUÁNTICO

---

Finalmente la energía de enlace  $E_b$ , es la diferencia entre la energía del estado fundamental  $E_0$ , y la energía del estado de impureza  $E_{\lambda_{min}}$ ,

$$E_b = E_0 - E_{\lambda_{min}}. \quad (3.26)$$



## Capítulo 4

# Resultados y Análisis

En el siguiente capítulo se presentaran y analizaran los resultados de los cálculos que se desarrollaron anteriormente.

Para la comprensión de los siguientes resultados se hace necesario presentar una tabla con los parámetros usados en este proyecto de grado. Los siguientes parámetros son característicos a temperaturas del orden de los 10K<sup>[9]</sup>,

PARAMETRO	NOMBRE	UNIDAD	ELECTRON	HUECO PESADO	HUECO LIGERO
$m_1^*$	Masa efectiva en GaAs	$m_e$	0.0665	0.34	0.0951
$m_2^*$	Masa efectiva en $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	$m_e$	$0.0665-0.0435x$	$0.34-0.0013x$	$0.0951-0.0681x$
$\kappa_1$	Permitividad Dielectrica en GaAs	$\epsilon_0$	12.40		
$\kappa_2$	Permitividad Dielectrica en $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	$\epsilon_0$	$12.40+2.15x$		
	Gap para el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	meV	$1518-607x$		
V	Potencial de confinamiento aproximación de Atanazov	meV	542x	444x	$270.8x^2-6.8x-0.4$

Tabla 4.1:  $m_e = 9,11 \times 10^{-31} \text{kg}$ ,  $\epsilon_0 = 8,85 \text{pF/m}$ <sup>[9]</sup> La aproximación de Atanasov<sup>[4]</sup> sugiere que el potencial de confinamiento tiene la forma  $Q_v=0.45$ .

### 4.1. Comparaciones de Cálculos Analíticos

Nuestros resultados fueron hallados para un potencial finito, pero si tendemos nuestro potencial a uno infinito, la **ecuación (3.14)** y **(3.24)** se transforman pre-

cisamente, en las ecuaciones resueltas por Bastard para la energía de enlace de impurezas hidrogenoides en un pozo cuántico de barrera infinita<sup>(6)</sup>. Este limite es la evidencia de que nuestros cálculos son correctos para el análisis de los resultados obtenidos.

## 4.2. Estado Fundamental Para Electrones y Huecos

Resolviendo las ecuaciones (3.12), (3.13) y (3.14) se obtiene la energía del estado fundamental para electrones y huecos.

### Estado Fundamental Electrones

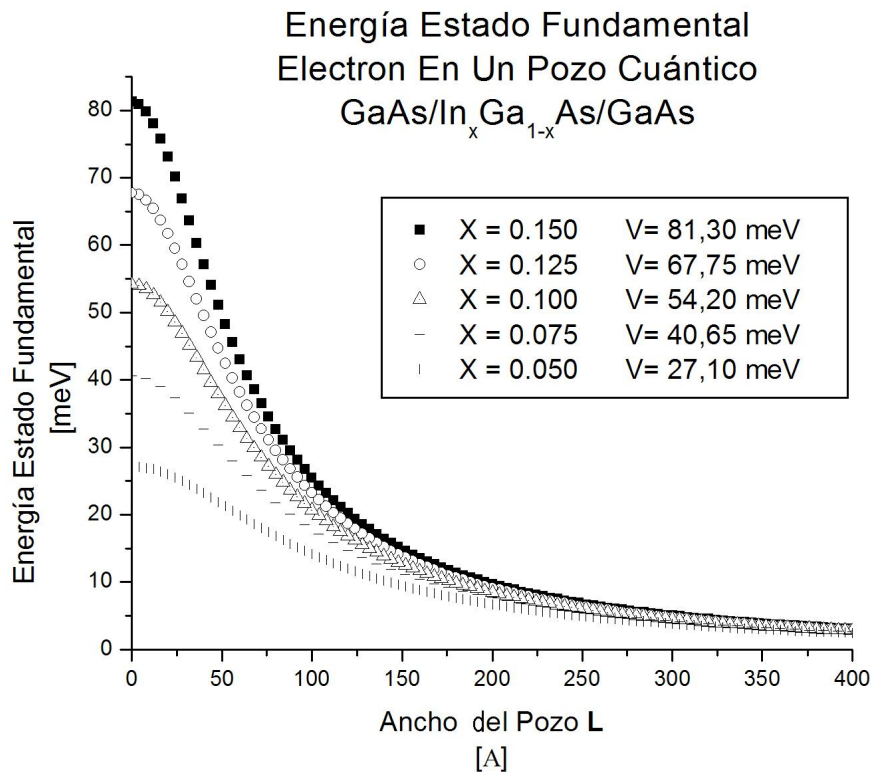


Figura 4.1: Se realiza el cálculo de la energía del estado fundamental para diferentes concentraciones de In en InGaAs, donde V es el potencial de confinamiento.

En la **Figura (4.1)** se observa como es posible obtener confinamiento cuántico

con bajas concentraciones de In en GaAs, lo cual resulta ventajoso ya que mantenemos a los dos materiales con la constante de red similar y evitamos que las tensiones asociadas nos impidan analizar este sistema por medio de la aproximación de la masa efectiva(ver **figura 2.1**).

De este primer cálculo tenemos que la energía del estado fundamental tiende a cero cuando el ancho del pozo se hace mayor, resultado que esta de acuerdo a lo esperado por la mecánica cuántica, ya que al no existir confinamiento, la energía del estado fundamental debe coincidir con el mínimo de la banda de conducción, desde el cual se está midiendo. Caso contrario, cuando el ancho del pozo tiende a cero, la energía aumenta hasta el valor de la energía de la barrera de confinamiento.

### Estado Fundamental Hueco Ligero

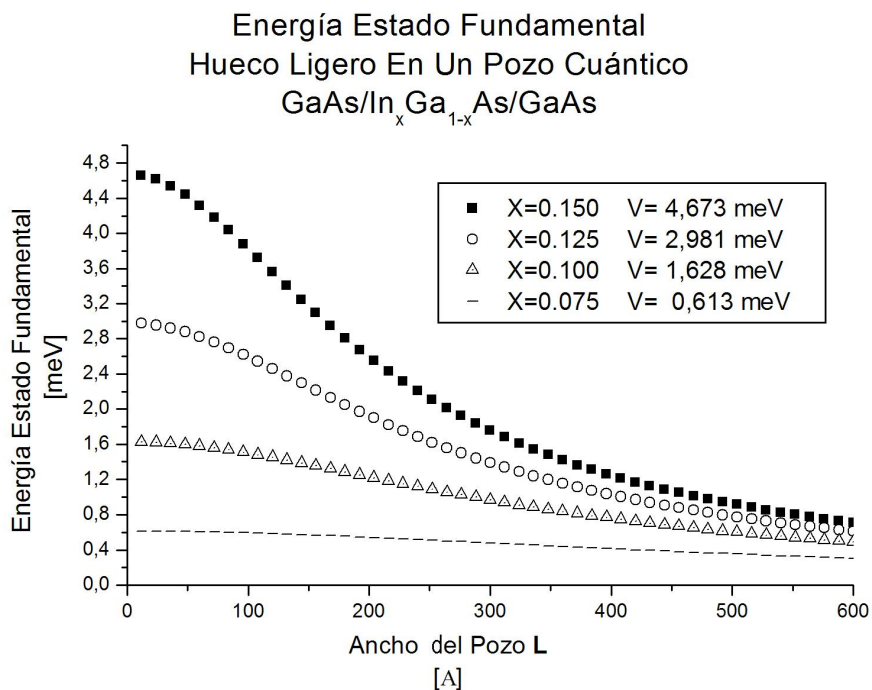


Figura 4.2: Se realiza el cálculo de la energía del estado fundamental para diferentes concentraciones de In en InGaAs, donde V es el potencial de confinamiento.

El mismo análisis hecho para los electrones se hace para los huecos ligeros, donde la diferencia radica en que al usar el potencial de confinamiento sugerido por Atanasov<sup>(4)</sup> el confinamiento se presenta de forma marginal, tal como se observa al comparar las energías del estado fundamental de electrones, huecos ligeros y pesados en las figuras 4.1, 4.2 y 4.3, respectivamente.

### Estado Fundamental Hueco Pesado

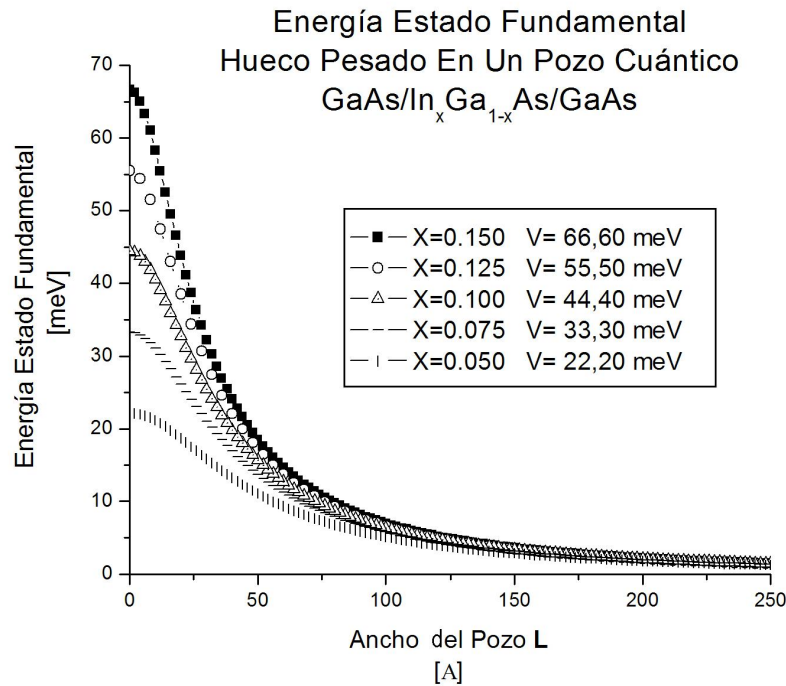


Figura 4.3: Se realiza el cálculo de la energía del estado fundamental para diferentes concentraciones de In en InGaAs, donde V es el potencial de confinamiento.

Los rangos de variación para la energía del estado fundamental del hueco pesado **fig. 4.3**, se comportan de la misma forma que en el caso del electrón.

### 4.3. Estado de Impureza Para Electrones y Huecos

Resolviendo el hamiltoniano planteado en la **ecuación (3.15)** se halla la energía en el estado de impureza para electrones y huecos. Esta energía aparase calculada en la **ecuación (3.24)** y la llamamos  $E_{\lambda min}$ , porque es minimizada en el parámetro variacional  $\lambda$  como se justificó en el marco teórico. Esta minimización se obtiene aplicando un programa numérico diseñado en Fortran.

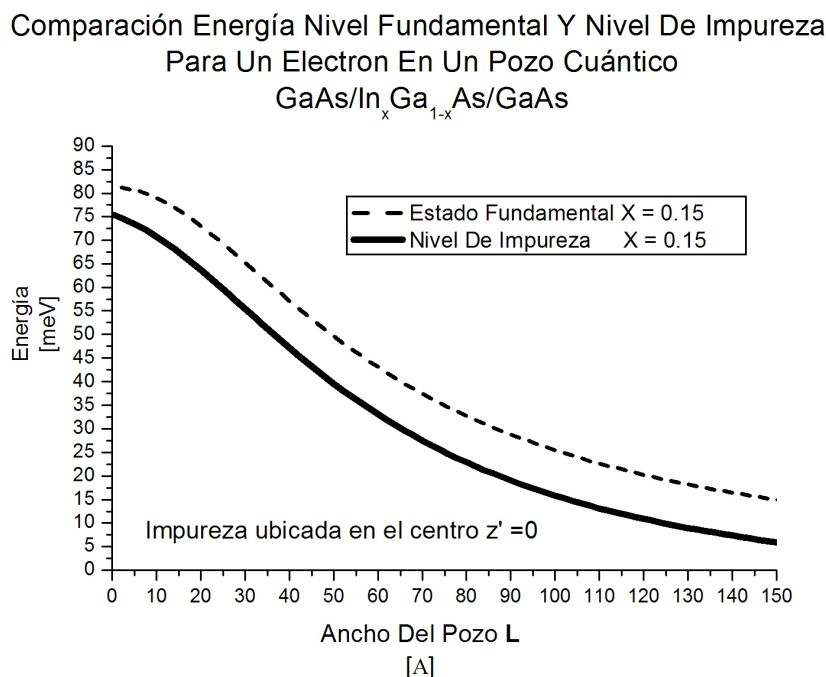


Figura 4.4: Se compara el estado fundamental y el nivel de impureza.

La **Figura 4.4** muestra que el nivel de impureza se encuentra por debajo del nivel fundamental, debido a la atracción coulombiana entre el portador de carga y la impureza. Es interesante observar que la diferencia entre el nivel fundamental y el de impureza es menor cuando el ancho del pozo tiende a cero, que cuando este es del orden de 150Å, debido a que cuando el ancho de pozo es cero la función de onda electrónica queda en el bloque de GaAs, sin existencia de confinamiento

geométrico.

En la siguiente sección se hallará la energía de enlace, para las diferentes partículas donadas ó aceptadas, por una impureza en nuestro sistema. Esto se obtiene calculando la energía necesaria para que las partículas donadas puedan hacer la transición del nivel de impureza al estado fundamental.

#### 4.4. Energía de Enlace Para Electrones y Huecos

En la siguiente sección se hallará la energía de enlace para electrones y huecos, según la solución planteada en la **ecuación (3.26)**.

Energía De Enlace Impureza Hidrogenoide Donadora  
En Un Pozo Cuántico  $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

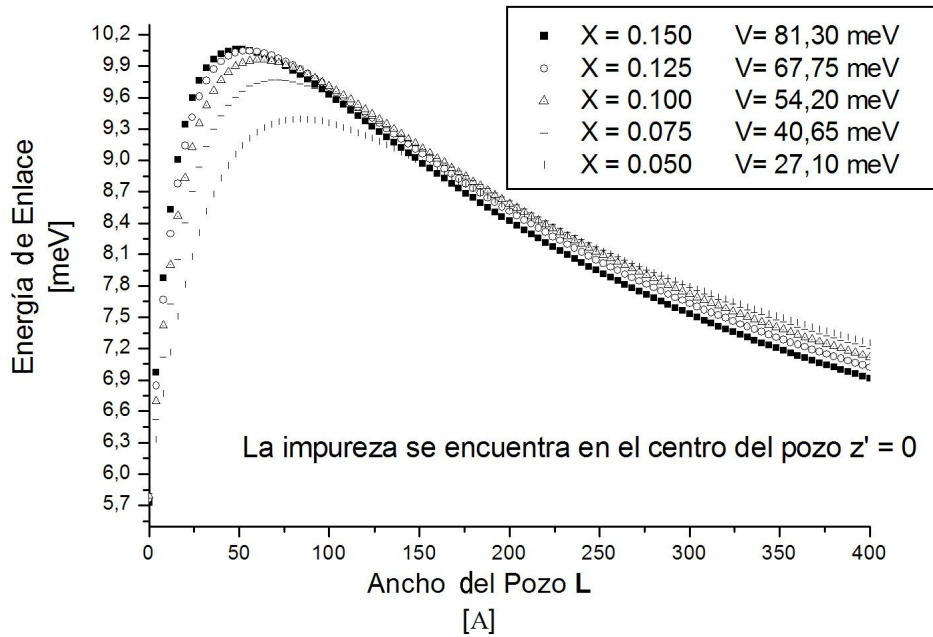


Figura 4.5: Energía de enlace en función del ancho del pozo cuántico con la impureza donadora ubicada en el centro del pozo.

## Energía de Enlace Para Impurezas Donadoras

En la **figura (4.5)**, se presenta la energía de enlace para una impureza donadora localizada en el centro del pozo cuántico, para diferentes concentraciones de In en  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Para mayores concentraciones de In, el potencial de confinamiento se incrementa **tabla (1.1)**, y los efectos del confinamiento son predominantes en pozos cuánticos de anchura menor a 150Å, mientras que para anchos mayores, observamos que predomina el efecto coulombiano.

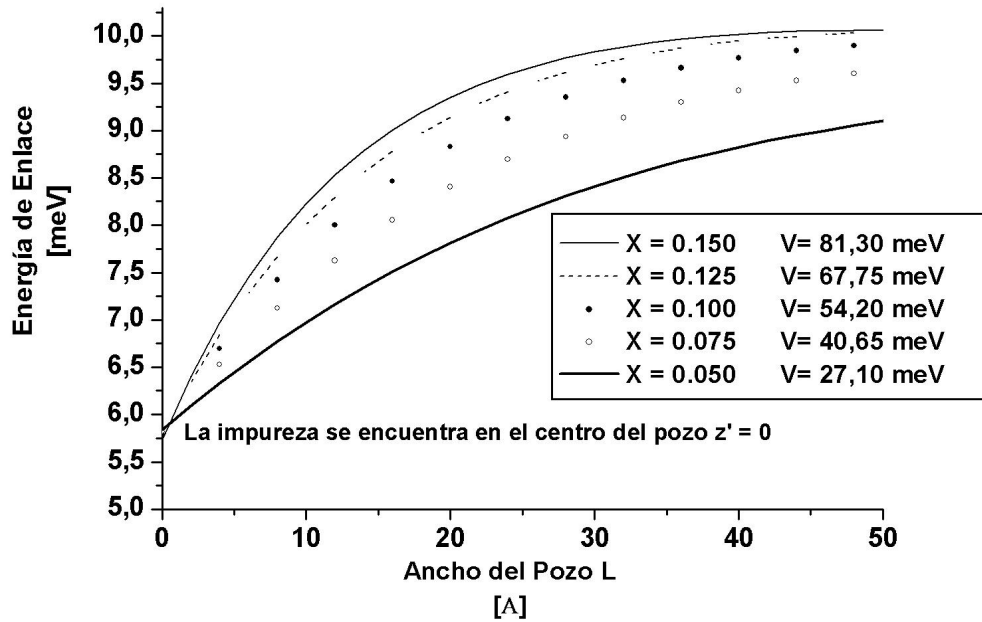


Figura 4.6: Energía de enlace en función del ancho del pozo cuántico, cuando este tiende a cero

Si el ancho del pozo cuántico tiende a cero, la energía de enlace tiende al Rydberg del GaAs, igual a 5,88 meV **ver figura 4.6**, que es precisamente el material que esta confinando al  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ .

Otro caso limite que se analiza, es cuando el ancho del pozo se hace lo suficientemente grande, tal que el término coulombiano predomina sobre el confinamiento, y la energía de enlace corresponde al Rydberg del material confinado. Este resulta-

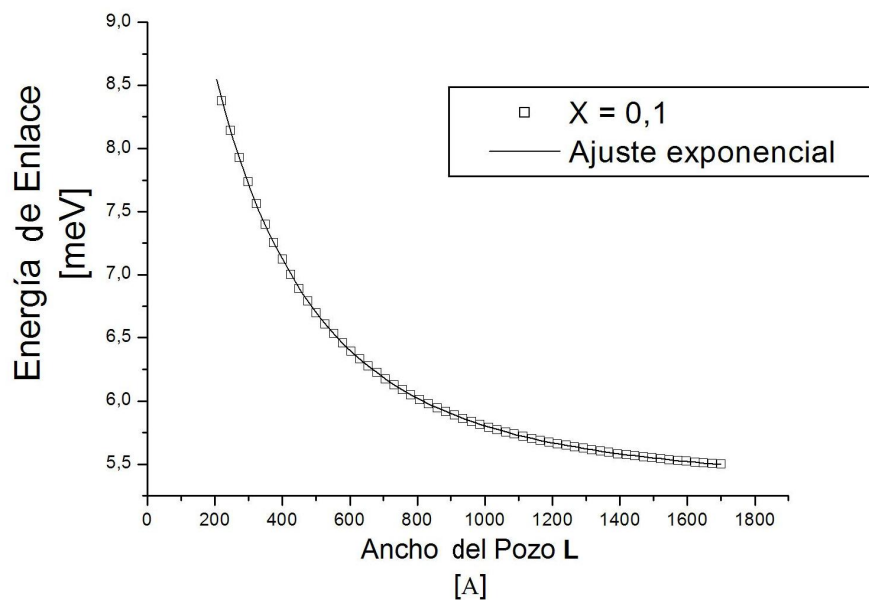


Figura 4.7: Ajuste exponencial para la energía de enlace en función del ancho del pozo cuántico, cuando este tiende a infinito

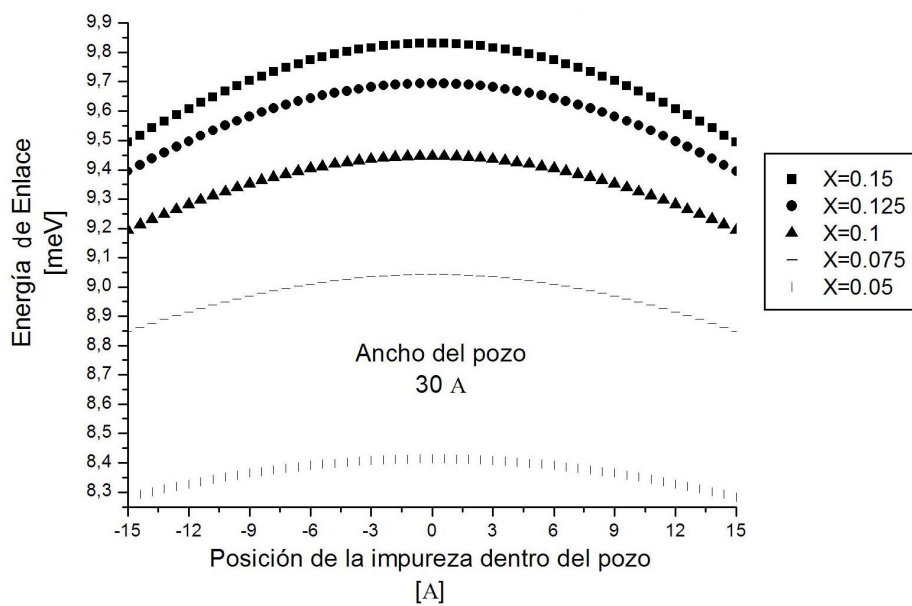


Figura 4.8: Energía de enlace como función de la posición de la impureza



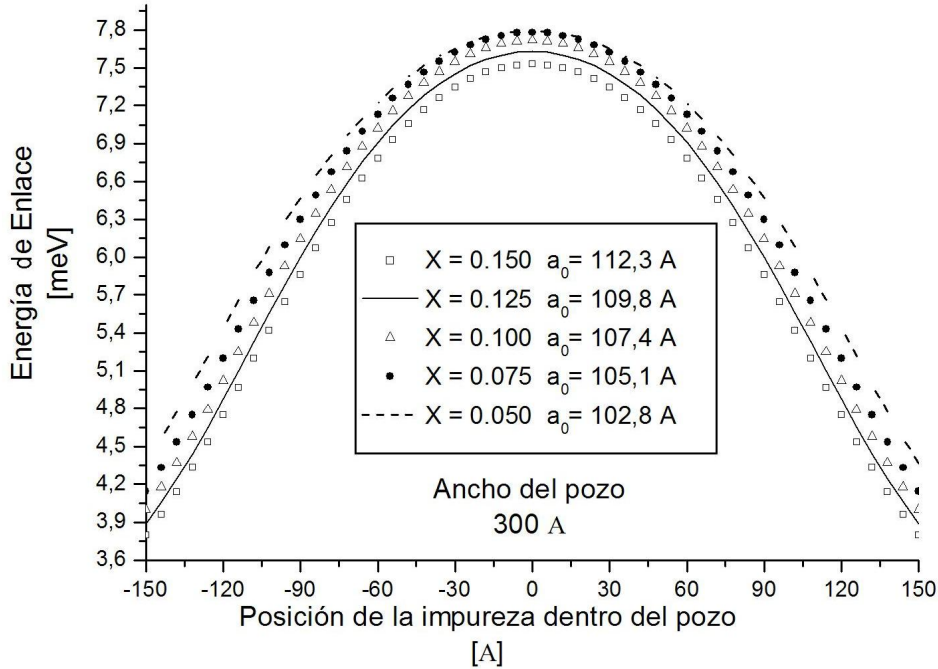


Figura 4.9: Energía de enlace como función de la posición de la impureza, donde  $x$  es la concentración de In en  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , y  $a_0$  el radio de Bohr asociado. A diferencia de la figura anterior el ancho del pozo cuántico es lo suficientemente grande para que predomine el potencial coulombiano sobre el efecto de confinamiento

do se comprueba, por ejemplo para una concentración de  $x=0.1$  **figura 4.7**, donde el Rydberg del  $\text{In}_{0,1}\text{Ga}_{0,9}\text{As}$  es igual a 5,31 meV, y el hallado con el ajuste exponencial es de  $5,35 \pm 0,06$ , indicando que el método esta funcionando en los dos casos límites y da confiabilidad para los resultados obtenidos.

Las energías, que se obtuvieron para ancho de pozo entre 50Å y 150Å, con concentraciones desde  $x=0.05$  hasta  $x=0.15$ , se encuentran entre 8.7 meV y 10 meV.

Para un ancho de 30 Å observamos en la figura **figura 4.8** cómo la energía de enlace decae a medida que la impureza se aleja del centro del pozo cuántico, debido a que la separación promedio entre la partícula donada y el centro de la impureza, es mayor para cualquier posición diferente al centro y si esta separación es mayor, la atracción coulombiana disminuye.

Cuando el ancho del pozo cuántico es suficientemente grande, de tal forma que la atracción culombiana predomine sobre el efecto de confinamiento cuántico **fig. 4.9**, tenemos que a menor concentración de In en InGaAs, la energía de enlace se incrementa, ya que el radio de Bohr  $a_0$  asociado es inferior, y esto hace que el portador de carga se encuentra mas cerca de la impureza.

### Energía de Enlace Para Impurezas Aceptoras

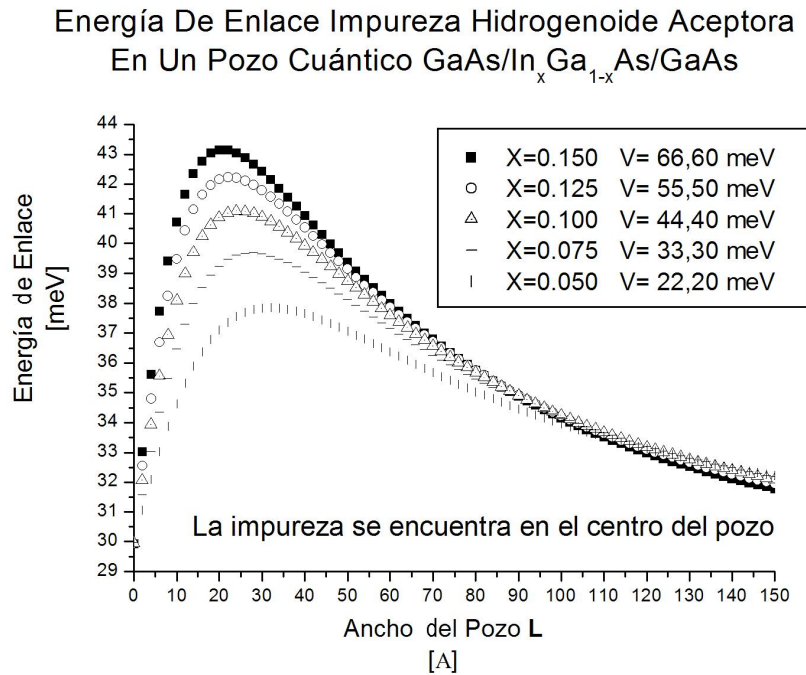


Figura 4.10: Energía de enlace impureza aceptora de hueco pesado

La energía de enlace para una impureza aceptora, de la misma forma que la impureza donadora, cumple con todos los casos limites anteriormente mencionados. De interés es mostrar los valores para sus energías de enlace.

Para la impureza aceptora de hueco pesado, observamos en la **figura 4.10** que la energía de enlace es cuatro y cinco veces superior, que para el caso de la impureza

donadora, sugiriendo que el hueco pesado, como su nombre lo indica, presenta pobre movilidad respecto a los electrones. Además tenemos que las energías halladas, presentan longitudes de onda que varían, entre  $0.28\mu\text{m}$  y  $0.34\mu\text{m}$ , correspondientes al ultravioleta cercano.

#### 4.5. Efectos de la tensión

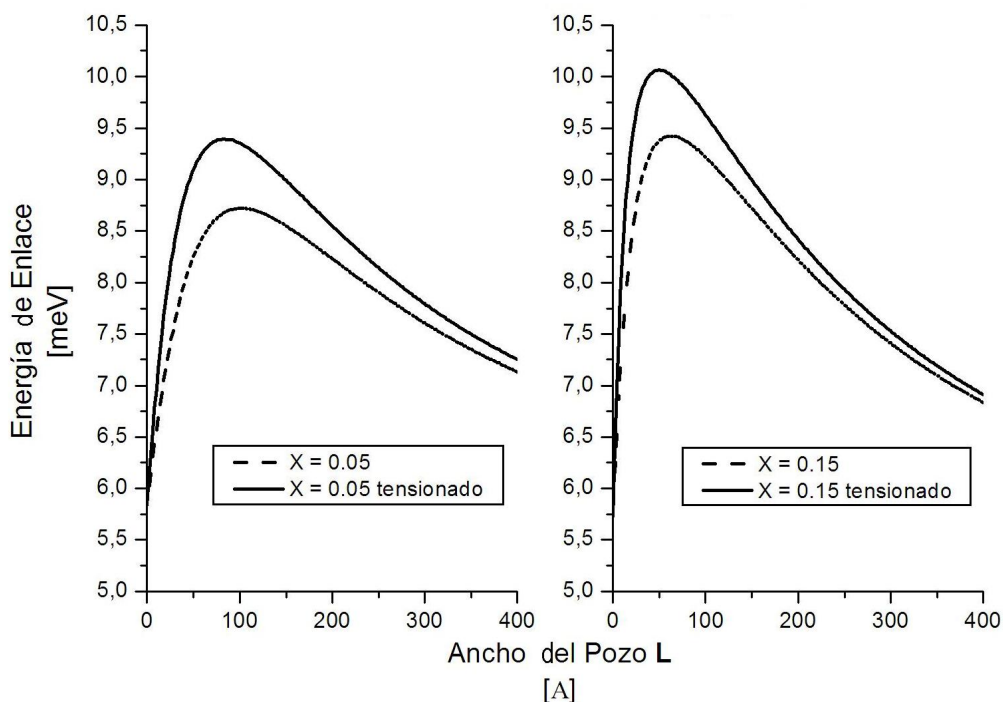


Figura 4.11: efecto de la tensión en el pozo cuantico de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

La tensión que se genera entre los átomos de la red del GaAs, con los átomos de la red del  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  en la interface, hace que el potencial de confinamiento sea mayor que sin tener en cuenta este efecto. En la **fig. 4.11** para una concentración  $x=0.05$ , el potencial tensionado de confinamiento es de  $27.10\text{ meV}$  (ver **figura 4.12**), en contraste con  $17.7\text{ meV}$  que se halla cuando no se tiene en cuenta el efecto de la tensión. Esta diferencia que es cercana a los  $9.40\text{ meV}$ , se incrementa a  $31.3\text{ meV}$  para el caso en que la concentración es de  $x=0.15$ , entendiéndose que a medida que

la concentración aumenta, el efecto de la tensión es mayor, precisamente porque la diferencia en la constante de red se incrementa **fig. 2.1**.

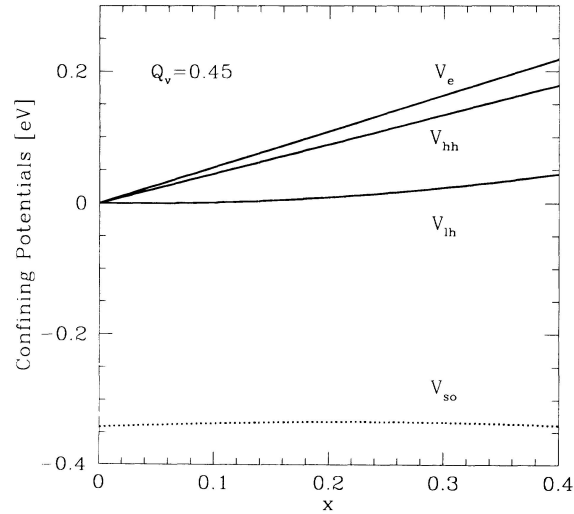


Figura 4.12: Potencial de confinamiento tensionado <sup>[4]</sup>

Según las mediciones experimentales<sup>[27]</sup> y los cálculos reportados por Atanasov<sup>[4]</sup>, el potencial de confinamiento para electrones y huecos pesados, es modificado como se indica en la **fig. 4.12**. Las medidas también arrojan que el sistema no sufre dislocaciones en la interfase, mientras las concentraciones de In en InGaAs, se mantengan por debajo de  $x=0.30$ .

#### 4.6. Algunas comparaciones

En esta sección se compararan resultados que se encuentran publicados en algunos artículos científicos internacionales con los hallados en esta tesis.

#### Energía de Transición en el exciton libre

En la **figura 4.13** y en la **tabla 4.2** se esta comparando la energía de transición para un exciton libre (ocurre cuando el electrón pasa del nivel de impureza donadora

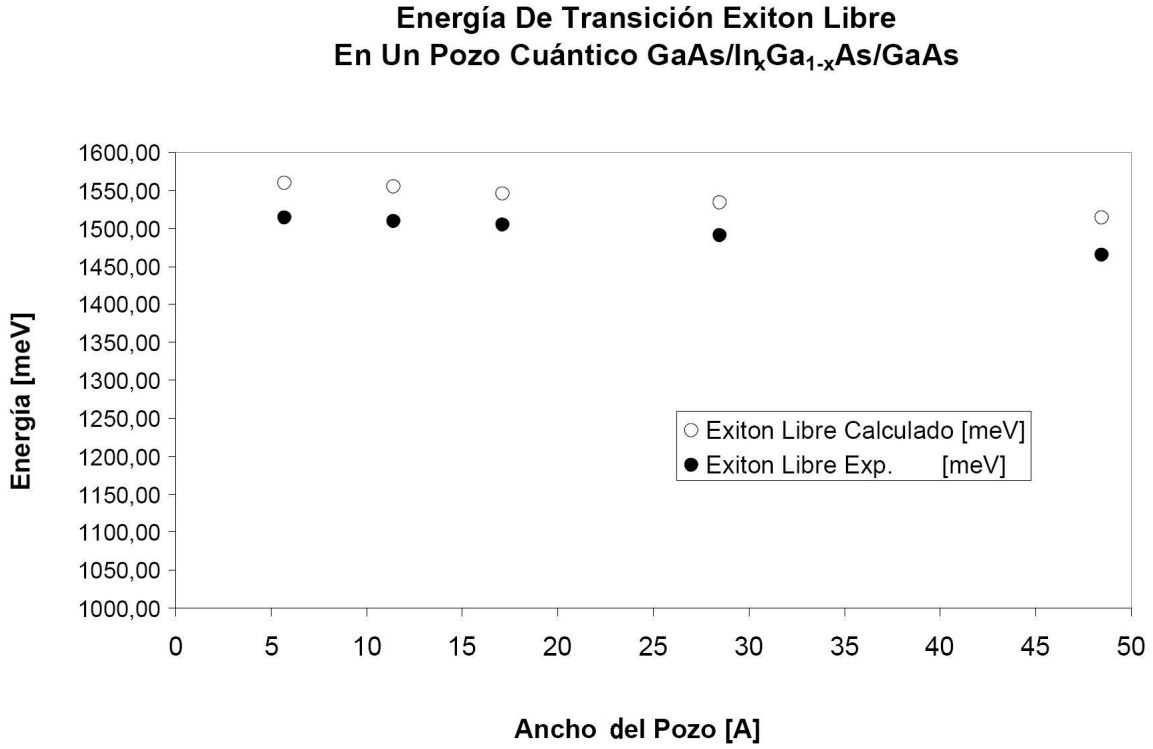


Figura 4.13: Se comparan los cálculos hechos en este trabajo de grado, con resultados experimentales

Ancho del Pozo [Å]	Estado Fundamental hh [meV]	Estado Fundamental e. [meV]	Exiton Libre Calculado [meV]	Exiton Libre Exp. [meV]	Error %
48,45	16,20	39,92	1513,42	1464,6	3,3
28,5	26,32	50,23	1533,85	1489,7	3,0
17,1	35,00	53,38	1545,68	1504,7	2,7
11,4	39,42	57,34	1554,06	1509,3	3,0
5,7	42,92	58,70	1558,92	1513,2	3,0

Tabla 4.2 Se comparan los cálculos hechos en este trabajo de grado.

al nivel fundamental del hueco pesado), que fue calculado en este trabajo de grado, con las medidas experimentales realizadas por Reynolds<sup>[27]</sup>. En la **tabla 4.2**.

## Energía de Enlace Para el Caso Excitonico

En la **figura 4.14** se esta comparando la energía de enlace de una impureza con la del trabajo realizado por Pierre<sup>[28]</sup> sobre un exciton de hueco pesado, encontrándose que la energía para la impureza es alrededor de 2 meV mayor que en el caso excitonico, debido a que en el sistema de impureza, el electrón interactúa atractivamente con un núcleo que se encuentra fijo, mientras que en el exciton el electrón interactúa con un hueco pesado que se esta moviendo. A pesar de que existe una diferencia entre la energía de enlace de estos dos sistemas, estas son cercanas, ya que en el excitón la masa del hueco pesado hace que la movilidad sea pequeña, al compararse con la del electrón y su comportamiento se parezca al de una impureza.

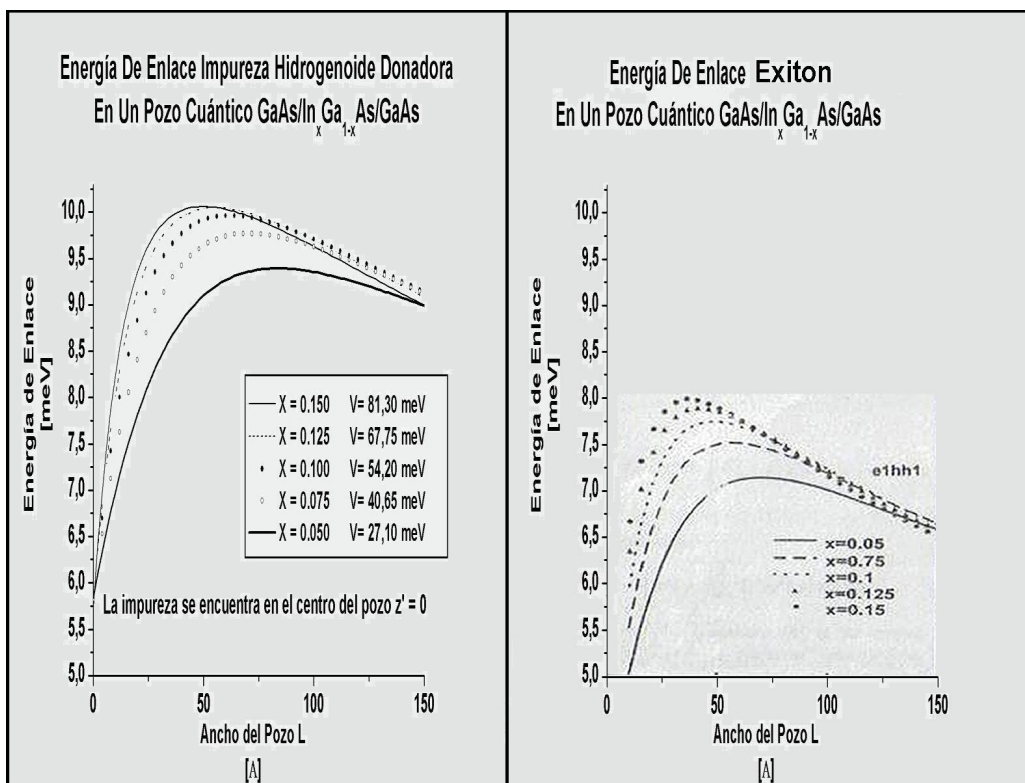


Figura 4.14: IZQUIERDA: Energía de enlace de una impureza donadora. DERECHA: Energía de enlace para el caso excitonico.

## Capítulo 5

# Conclusiones y Perspectivas

Se halla la energía de enlace, para una impureza hidrogenoide, en un pozo cuántico de GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs, usando la mecánica cuántica como modelo teórico.

Según se predice en nuestro cálculo, es posible obtener confinamiento cuántico a bajas concentraciones de In en InGaAs, para una impureza donadora en un pozo cuántico de GaAs/ $\text{In}_{0,05}\text{Ga}_{0,95}\text{As}$ /GaAs, ver **fig. 4.1 y fig 4.5**.

Al comparar el cálculo de la energía de enlace tanto en impurezas aceptoras como donadoras, observamos que los huecos pesados, comparados con los electrones, se encuentran fuertemente enlazados a sus respectivos núcleos de impureza, ver **(fig. 4.5 y fig 4.10)**.

Las tensiones ocasionadas por la diferencia en la constante de red del GaAs y el  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , permiten tener energías de enlace mayores que sin tener en cuenta este fenómeno.

Se logra comparar la energía del exciton libre, con medidas experimentales y se observa que los resultados son similares. Esto indica que además de haber realizado los cálculos adecuadamente, la corrección sugerida por Atanasov<sup>[4]</sup> para el potencial de confinamiento, es la indicada para nuestro sistema.

Al comparar la energía de enlace del exciton con la de una impureza donadora, se encuentra que el hueco pesado en el caso excitonico se comporta como si fuera una impureza, debido a que su masa hace que tenga menor movilidad al compararse con la del electrón.

### **Perspectivas**

En el próximo futuro se calculara el efecto de la presión hidrostática sobre los niveles energéticos de electrones , huecos de impurezas y de excitones en pozos y puntos cuánticos de GaAS/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs.

También calcular la masa ciclotrónica y el factor de Landé en este sistema como función del ancho del pozo, la concentración de In y del campo magnético aplicado.



## Capítulo 6

# Apéndice: Rutina Escrita En Fortran

```
!*****  
!*                                     *  
!* ----- *  
!* El siguiente programa, permite minimizar *  
!* la energía de la ecuación (3.26) en función *  
!* del parametro lambda y así poder hallar la *  
!* energía de enlace de una impureza donadora. *  
!*****  
  
PROGRAM Newton1  
  
real*8  e,x0,yy,Am2,Am1,AL,AV,AE,ALf,xc0,AN,ALi,Apz,AV0  
real*8  fa,fb,fc,func,Ac,Ak2,Ak1  
real*8  ax,bx,cx,AE1,AE2,Afi,AV1,AV2,AQv  
real*8  AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,Az,AEb,ax1,bx1  
external func  
integer m,n  
open(1,FILE='en',STATUS='UNKNOWN')  
open(2,FILE='da',STATUS='UNKNOWN')
```

## APÉNDICE

---

```

x0=1
print *, ' '
write(*, "(' Numero de intervalos = ')", advance='no')
read *, AN
print *, ' '
write(*, "(' Ancho Maximo del pozo en Amstrong: ')", advance='no')
read *, ALf
print *, ' '
write(*, "(' Ancho Minimo del pozo en Amstrong: ')", advance='no')
read *, ALi
print *, ' '
write(*, "('Pocicion de la impureza del centro al borde del pozo
*      ,')", advance='no')
print *, ' '
write(*, "('Ejem :La mitad 1/2 = 0.5 : ')", advance='no')
read *, Apz
print *, ' '
write(*, "(' Concentracion de In de 0.1 a 0.45: ')", advance='no')
read *, Ac
print *, ' '
write(*, "(' Qv de confinamiento: ')", advance='no')
read *, AQv
print *, ' '
Ak2= 12.40+2.15*Ac
Ak1= 12.40
AV1= 1518
AV2= 1518-607*Ac
c AV = (AV1-AV2)*0.55
AV = (542/0.55)*(1-AQv)*Ac
Am2=0.0665-0.0435*Ac
Am1=0.0665
AV0=Am2/(Ak2*Ak2)
x0 = 1e-3
e=1e-1
m=100
AL=ALf
Az=Apz*AL/2
AE1=Am1/(Ak1*Ak1)
AE1=AE1/(2*3.6747839172E-5)
AE2=AV0/(2*3.6747839172E-5)
write(1, '(3f18.5)')
write(1, "('L z EnerFunda EnerMini EnerEnlace Rad.GaAs Rad.Min
*      Rad.InGaAs')")
write(1, "(' [A] [A] [meV] [meV] [meV] [A] [A] [A]')")
write(2, ' ')
write(2, "('RyGaAs RyInGaAs Pot.Confi')")
write(2, "(' [meV] [meV] [meV]')")
write(2, '(3f18.5)') AE1,AE2,AV

200 call Newton (Am2, Am1, AV, AL, m, n, e, x0, yy, AK0)      ! Call Newton subroutine

Az=Apz*AL/2
ax= Ak2/(Am2*2)
ax1= ax
bx= Ak2/(Am2)
bx1= bx

call mnbrak (ax, bx, cx, fa, fb, fc, func, x0, AL, Am1, Am2, AK0, Az, Ak1, Ak2)
fc=fc/3.6747839172E-5
AV=AV/3.6747839172E-5

```

## APÉNDICE

---

```
AL=AL/1.88976258913
Az=Az/1.88976258913
AE = x0*x0/(2*Am2)
AE = AE/3.6747839172E-5
AEb = AE-fc
cx = cx/1.88976258913
ax1 = ax1/1.88976258913
bx1 = bx1/1.88976258913
Afi =180*x0*AL/6.28318530718

write(*,'(3f18.5)') AL,AE,AEb

write(1,'(8f18.5)') AL,Az,AE,fc,AEb,ax1,cx,bx1
AL=AL-ALf/AN
if (AL>=ALi) goto 200

stop
end

!*****
! Function subroutine
real*8 Function Y(x,AL,Am1,Am2,AK0,y1)
real*8 x,y1,AL,Am1,Am2,AK0
!derivative
y1 = AL*dtan(x*AL/2)+AL*dtan(x*AL/2)**3+2*AK0*AK0/(x*x*x)
y = dtan(x*AL/2)**2+Am1/Am2-(AK0/x)**2
end
!*****

!*****
!*          Newton"s method subroutine          *
!* -----*
!* This routine calculates the zeros of a      *
!* function Y(x) by Newton"s method.          *
!* The routine requires an initial guess, x0,  *
!* and a convergence factor, e. Also required  *
!* is a limit on the number of iterations, m.  *
!*****
Subroutine Newton(Am2,Am1,AV,AL,m,n,e,x0,yy,AK0)
real*8 e,x0,yy,y1,Y,AL,Am1,Am2,AK0,AV
integer m,n
n=0

AL = AL*1.88976258913
AV = AV*3.6747839172E-5
AK0=dSQRT(2*Am1*AV)

! Get y and y1
100 yy=Y(x0,AL,Am1,Am2,AK0,y1)
! Update estimate
x0=x0-(yy/y1)
n=n+1
if (n>=m) return
if (dabs(yy/y1)>e) goto 100
return
end

! End of file Newton1.f90
```

## APÉNDICE

---

```
! Esta es la subrutina de minimización

SUBROUTINE mnbrak(ax,bx,cx,fa,fb,fc,func,x0,AL,Am1,Am2,AK0,Az,Ak1,
*           Ak2)
REAL*8 ax,bx,cx,fa,fb,fc,func,GOLD,GLIMIT,TINY
real*8 x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,Az,Ak1,Ak2
EXTERNAL func
PARAMETER (GOLD=0.1, GLIMIT=100., TINY=1.e-10)
REAL*8 dum, fu, q, r, u, ulim
fa=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,ax,Az,Ak1,Ak2)
fb=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,bx,Az,Ak1,Ak2)
if(fb.gt.fa)then
    dum=ax
    ax=bx
    bx=dum
    dum=fb
    fb=fa
    fa=dum
endif
cx=bx+GOLD*(bx-ax)
fc=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,cx,Az,Ak1,Ak2)

1  if(fb.ge.fc)then
    r=(bx-ax)*(fb-fc)
    q=(bx-cx)*(fb-fa)
    u=bx-((bx-cx)*q-(bx-ax)*r)/(2.*sign(max(abs(q-r),TINY),q-r))
    ulim=bx+GLIMIT*(cx-bx)
    if((bx-u)*(u-cx).gt.0.)then
        fu=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,u,Az,Ak1,Ak2)
        if(fu.lt.fc)then
            ax=bx
            fa=fb
            bx=u
            fb=fu
            return
        else if(fu.gt.fb)then
            cx=u
            fc=fu
            return
        endif
        u=cx+GOLD*(cx-bx)
        fu=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,u,Az,Ak1,Ak2)
    else if((cx-u)*(u-ulim).gt.0.)then
        fu=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,u,Az,Ak1,Ak2)
        if(fu.lt.fc)then
            bx=cx
            cx=u
            u=cx+GOLD*(cx-bx)
            fb=fc
            fc=fu
            fu=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,u,Az,Ak1,Ak2)
        endif
    endif
```

## APÉNDICE

---

```

else if ((u-ulim)*(ulim-cx).ge.0.) then
    u=ulim
    fu=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,u,Az,Ak1,Ak2)
else
    u=cx+GOLD*(cx-bx)
    fu=func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,u,Az,Ak1,Ak2)
endif
ax=bx
bx=cx
cx=u
fa=fb
fb=fc
fc=fu
goto 1
endif
return
END
C (C) Copr. 1986-92 Numerical Recipes Software *#'.

!Esta es la función que se debe minimizar ecuación (3.24)
*****
! Function subroutine
real*8 Function func(x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,Alam,
* Az,Ak1,Ak2)
* real*8 x0,AL,Am1,Am2,AK0,Alfa,Abet,YNN,A4,Amiu,Alam,Az,Ak1,Ak2,
* Abet1

Alfa= dsqrt(AK0*AK0-(Am1/Am2)*x0*x0)

Abet1 = 1-dexp(-AL/Alam)*dcosh(2*Az/Alam)+dcos(2*x0*Az)/(1+x0*
* x0*Alam*Alam)**2+(-dcos(x0*AL)/(1+x0*x0*Alam*Alam)**2
* - (AL/(2*Alam))* (1+x0*x0*Alam*Alam+dcos(x0*AL))/(1+x0*x0*
* Alam*Alam))*dexp(-AL/Alam)*dcosh(2*Az/Alam)+(Az/Alam)*
* ((1+x0*x0*Alam*Alam+dcos(x0*AL))/(1+x0*x0*Alam*Alam))*
* dexp(-AL/Alam)*dsinh(2*Az/Alam)+(3+x0*x0*Alam*Alam)*x0*
* Alam*dexp(-AL/Alam)*dsin(x0*AL)*dcosh(2*Az/Alam)/(2*(1+x0*
* x0*Alam*Alam)**2)+(AL*(x0/2)*dcosh(2*Az/Alam)-x0*Az*
* dsinh(2*Az/Alam))*dexp(-AL/Alam)*dsin(x0*AL)/(1+x0*x0*Alam
* *Alam)+(1/(1+Alfa*Alam)+AL/Alam+1)*dexp(-AL/Alam)*
* dcos(x0*AL/2)*dcos(x0*AL/2)*dcosh(2*Az/Alam)/(1+Alfa*Alam)
* +(-2*Az/Alam)*dexp(-AL/Alam)*dcos(x0*AL/2)*dcos(x0*AL/2)*
* dsinh(2*Az/Alam)/(1+Alfa*Alam)

Abet= 1/Abet1

YNN = (2/(3.14459265359*Alam*Alam*Alam))*Abet

A4 = Alam*Alam*Alam*(3.14459265359/2)*YNN*((AL/Alam+1+
* 1/(1+Alfa*Alam))*dexp(-AL/Alam)*dcos(x0*AL/2)*
* dcos(x0*AL/2)*dcosh(2*Az/Alam)/(1+Alfa*Alam)+
* (-2*Az/Alam)*dexp(-AL/Alam)*dcos(x0*AL/2)*dcos(x0*AL/2)*

```

## APÉNDICE

---

```
*          dsinh(2*Az/Alam) / (1+Alfa*Alam))
Amiu = Am1*Am2 / (Am1+Am2)
func = x0*x0 / (2*Am2) + 1 / (2*Am2*Alam*Alam) - (3.14459265359*YNN*Alam
*Alam / (2*Ak2)) * (1+dcos(2*x0*Az) / (1+x0*x0*Alam*Alam)) - (x0
*x0*Alam*Alam+1+dcos(x0*AL)) * dexp(-AL/Alam) * dcosh(2*Az/
Alam) / (1+x0*x0*Alam*Alam) + x0*Alam*dexp(-AL/Alam) * dsin(x0*
AL) * dcosh(2*Az/Alam) / (1+x0*x0*Alam*Alam) + (1 / (Am1*Alam)
-1/Ak1) * 3.14459265359*YNN*Alam*Alam*dcos(x0*AL/2) *
dcos(x0*AL/2) * dcosh(2*Az/Alam) * dexp(-AL/Alam) / (1+Alfa*
Alam) - A4 / (2*Amiu*Alam*Alam) + 3.14459265359*YNN * (1+dcos(x0*
AL)) * dexp(-AL/Alam) * ((AL/2) * dcosh(2*Az/Alam) - Az*dsinh(2*
Az/Alam)) / (2*Am2) + 3.14459265359*Alam*YNN*Alfa*dcos(x0*
AL/2) * dcos(x0*AL/2) * dexp(-AL/Alam) * (2*Az*dsinh(2*Az/Alam)
-AL*dcosh(2*Az/Alam) -Alam*dcosh(2*Az/Alam) / (1+Alfa*Alam))
/ (2*Am1 * (1+Alfa*Alam))

end
!*****
```

# Bibliografía

- [1] Máximo López y Miguel A. Meléndez Lira; *Pozos, Hilos Y Puntos Cuánticos: Estructuras Semiconductoras De Baja Dimensión*; Tomado de Avance y perspectiva Vol 16 Pag. 243.CINVESTAV, 1993
- [2] A. Shik; *Quantum Wells, Physics And Electronics Of Two-Dimensional System*;world scientific 1998
- [3] John H. Davies; *The Physics Of Low-Dimensional Semiconductors Pag. 80-93*;Cambridge University Press 1998.
- [4] R. Atanasov And F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50(19)**, 14381 (1994)
- [5] Claude Cohen-Tannoudji; *Quantum Mechanics Vol 1, Pag. 67-78*; Hermann.Paris-France 1977.
- [6] G. Bastard *Phys. Rev. B* **24(8)**, 4714, (1981)
- [7] C.Mailhiet, Yiat-Chung Chang and T.C. McGill *Phys. Rev. B* **26(8)**, 4449, (1982)
- [8] Zhen-Yan Deng *Phys. Rev. B* **50(8)**, 5732, (1994)
- [9] E. Herbert Li *Physica E* **5**, 215, (2000)
- [10] J.S. Blakemore *J. Appl. Phys.* **53(10)**, R123, (1982)
- [11] Instituto de Sistemas Optoelectrónicos y Microtecnología ( ISOM). *Instituto universitario de investigación adscrito a la Universidad Politécnica de Madrid (UPM)*  
**[www.isom.upm.es/compt.pdf](http://www.isom.upm.es/compt.pdf)**

- [12] Berbard Gil, y Pierre Bigenwald, *Solid State Commun* **94(10)**, 883, (1995)
- [13] N. Porrás-Montenegro and S.T. Pérez-Merchancano *Phys. Rev. B* **46(15)**, 9783, (1992)
- [14] A Montes, C A Duque y N Porrás-Montenegro *J. Phys.: Condens. Matter* **10(24)**, 5351, (1998)
- [15] Pablo Villamil, N. Porrás-Montenegro y J. C. Granada *Phys. Rev. B* **59(03)**, 1608, (1999)
- [16] J.J. Vivas-Moreno, J.J. Vivas-Moreno, N. Porrás-Montenegro *physica status solidi (b)* **210(02)**, 723, (1999)
- [17] Pablo Villamil y N Porrás-Montenegro *J. Phys.: Condens. Matter* **11(48)**, 9723, (1999)
- [18] A. Latgã©, N. Porrás-Montenegro, M. de Dios-Leyva y L. E. Oliveira *Phys. Rev. B* **53(15)**, 10160, (1996)
- [19] N. Porrás Montenegro, J. Lã©pez-Gondar y L. E. Oliveira *Phys. Rev. B* **43(02)**, 1824, (1991)
- [20] C.A. Duquea, N. Porrás-Montenegro, Z. Barticevic, M. Pacheco y L.E. Oliveira *Microelectronics Journal* **36**, 231, (2005)
- [21] N. Porrás-Montenegro, S. T. Pã©rez-Merchancano y A. Latgã© *Journal of Applied Physics* **74(12)**, 7624, (1993)
- [22] John H. Davies; *The Physics Of Low-Dimensional Semiconductors* Pag. 252-257;Cambridge University Press 1998.
- [23] Vladimir V. Mitin, Viatcheslv A. Kichelap, Michael A. Stroscio; *Quantum Heterostructures Microelectronics and Optoelectronics* Pag. 45-51;Cambridge University Press 1999.
- [24] Claude Cohen-Tannoudji; *Quantum Mechanics Vol 2, Pag. 1148-1149*; Hermann.Paris-France 1977.



- 
- [25] Claude Cohen-Tannoudji; *Quantum Mechanics Vol 1, Pag. 71-78*; Hermann.Paris-France 1977.
- [26] John H. Davies; *The Physics Of Low-Dimensional Semiconductors Pag. 99*;Cambridge University Press 1998.
- [27] D. C. Reynolds, K. R. Evans, C. E. Stutz, B. Jogai, C. R. Wie, and P. W. Yu. *Phys. Rev. B* **43**, 11156, (1992)
- [28] Pierre Bigenwald and Bernard Gil *Solid State Commun* **91(1)**, 33, (1994)