

UNIVERSIDAD DE LA LAGUNA

**«Procesos dinámicos de portadores de carga
procedentes de la fotoexcitación ultra rápida en
heteroestructuras con complicado
espectro de energías»**

Autor: Antonio Ramos Mas

Departamento de Física Fundamental y Experimental

ÍNDICE

Introducción	3
Heteroestructuras semiconductoras	3
Superredes	15
Procesos de tuneleo	22

Capítulo I.- Estudio de magnetotúnel en una heteroestructura semiconductoras

INTRODUCCIÓN	27
MODELO	33
<i>Métodos de la matriz de transferencia y de los elementos finitos</i>	36
<i>Densidad de corriente coherente</i>	43
<i>Procesos perturbativos</i>	49
<i>Interface rugosa</i>	51
<i>Fonones LO</i>	55
RESULTADOS	57
DISCUSIÓN	80
CONCLUSIONES	81

Capítulo II.- Efectos de mezcla en la banda de valencia sobre la emisión de teraHertz de un triple pozo cuántico asimétrico

INTRODUCCIÓN	83
MODELO	86
RESULTADOS Y DISCUSIÓN	93
CONCLUSIONES	108

Capítulo III.- Efectos de la densidad de portadores en el tuneleo de excitones en un doble pozo cuántico asimétrico

INTRODUCCIÓN	111
MODELO	115
RESULTADOS Y DISCUSIONES	125
CONCLUSIONES	145

Conclusiones finales	147
Referencias.-	153

Introducción

Introducción

Heteroestructuras semiconductoras

Los avances producidos en la *Física del Estado Sólido* han contribuido de manera decisoria al espectacular desarrollo de la *microelectrónica*. Los estudios tanto teóricos como experimentales realizados en este campo han marcado los objetivos de conseguir dispositivos electrónicos con máximas prestaciones y con el mayor grado de integración. Estos planteamientos se han ido haciendo realidad gracias a la gran evolución que se ha producido en las técnicas de crecimiento cristalino. En la década de los setenta, dos experimentos sirvieron como detonante del gran auge producido en los estudios de los dispositivos cuánticos^[1]: *Esaki* y *Chang*^[2] registraron el comportamiento oscilatorio de la conductancia diferencial debido al tuneo resonante a través de una barrera de potencial de un diodo de *efecto túnel* (conductancia diferencial negativa). Posteriormente, *Dingle*^[3] corroboró la cuantización de los niveles de energía en los pozos cuánticos mediante medidas de absorción óptica. Una de las contribuciones más importantes de *Esaki* y *Chang* fue realizar, por primera vez, el crecimiento cristalino de un pozo cuántico.

Como producto de la diversidad de experiencias realizadas han surgido una serie de dispositivos electrónicos (pozos cuánticos simples, dispositivos *Hall* cuánticos, superredes, cables cuánticos, láser, fotomultiplicadores...) que hacen uso de las propiedades cuánticas de los materiales construidos por la superposición de capas de semiconductores

de espesores nanométricos y que han dado lugar al nacimiento de la *nanoelectrónica*.

Para realizar el estudio de las propiedades electrónicas de un dispositivo, es necesario conocer la estructura de bandas de energía y la naturaleza de los procesos dispersivos que le afectan. Las características de las bandas de energía están íntimamente relacionadas con la estructura cristalina del material. En concreto, todos los estudios plasmados en esta memoria han sido realizados con *arseniuro de galio (GaAs)*. Este compuesto semiconductor posee una estructura cristalina tipo *zinc-blenda* o cúbica centrada en las caras con una base de dos átomos, *galio* y *arsénico*. La constante de red es de $5,6532\text{\AA}$.

La información relativa a la estructura de bandas de energía se refleja en la denominada *relación de dispersión*, $E = E(\vec{k})$, donde se representa la energía del portador, electrón o hueco, en función de los distintos valores del *vector de onda*, \vec{k} . Esta función es solución de la *ecuación de Schrödinger* aplicada al material (la forma y explicación de esta ecuación se verá en este capítulo). En la siguiente figura puede observarse este diagrama dispersivo para el *GaAs*, limitado a la primera zona de *Brillouin*.

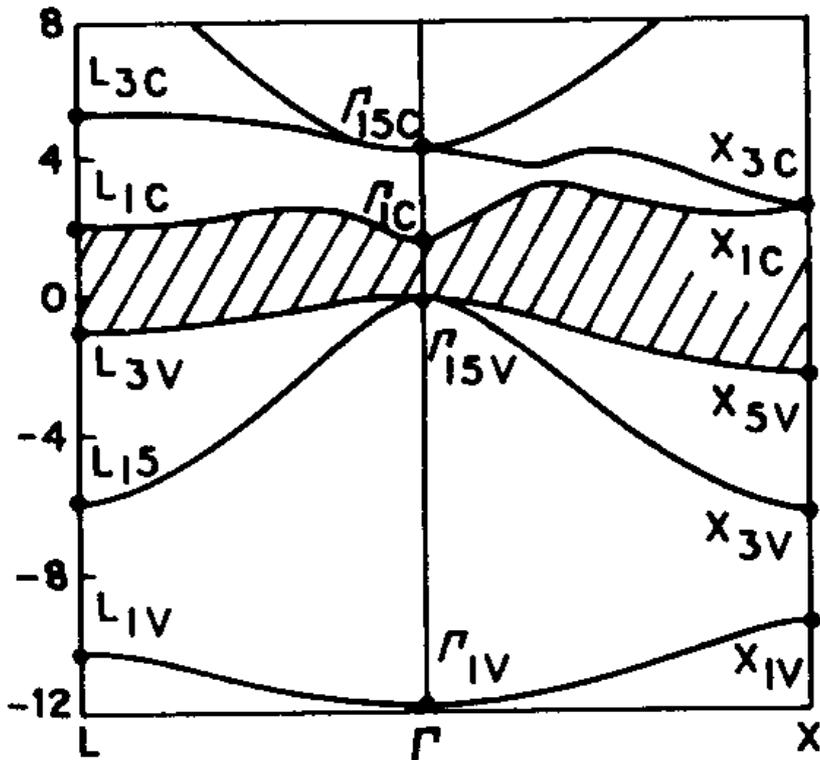


figura i.1.- Diagrama de bandas de energía del arseniuro de galio^[5].

En el mismo se han dibujado, en el eje de abscisas, los tres valores de \vec{k} correspondientes a direcciones de simetría de la red: L que representa el vector de onda \mathbf{p}/a $(1,1,1)$, G que se corresponde con el $(0,0,0)$, y X que se corresponde con $2\mathbf{p}/a$ $(1,0,0)$. Los trabajos que van a desarrollarse serán elaborados en el punto G que es la denominada zona de parabolicidad, pues, la energía del portador y el vector de onda guardan una relación parabólica

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\text{I.1})$$

siendo \hbar la constante de *Planck* y m^* la *masa efectiva* del portador, que se describirá a continuación.

Volviendo a la figura, puede observarse una zona sombreada que se corresponde a valores de energía que no son soluciones de la ecuación de *Schrödinger*. A esta zona se la denomina *gap* (para el *GaAs* el intervalo relativo de energías que cubre el gap en el punto **G** es $E_g=1.55\text{eV}$). Todo el conjunto de energías por encima de esta zona constituye la *banda de conducción* y al que se sitúa por debajo, *banda de valencia*. En esta última banda se sitúan los valores de energías asociadas a los estados electrónicos más íntimamente ligados al núcleo atómico. Es interesante comprobar en la figura que en el punto **G**, el *GaAs* presenta un mínimo relativo en la banda de conducción y un máximo relativo en la banda de valencia. A los materiales semiconductores con esta propiedad se les denomina de *gap directo*. Una característica importante de estos compuestos es que los electrones pueden realizar transiciones directas de la banda de valencia a la de conducción (y viceversa) por simple excitación del material, siendo acompañado de la absorción (o emisión) de un fotón (en el caso de los materiales de gap indirecto es necesaria la participación adicional de un fonón). Ésto les confiere una gran eficiencia en la absorción de luz, en la emisión de radiación (en especial la infrarroja) y en los fenómenos de tuneo. Todo ello justifica la idoneidad de su uso para los distintos análisis que van a realizarse en esta memoria.

Se acaba de citar la excitación como mecanismo de transición de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción. Esta

excitación se produce por estimulación óptica del material (*fotoexcitación*) a través de una fuente láser. En este proceso se crean vacantes en los estados de la banda de valencia. Estas “*ausencias*” de electrones son consideradas como portadores de carga positiva y se las denomina *huecos*. Los huecos a su vez se clasifican en *pesados* o *ligeros* según sea el grado de ligadura o profundidad del estado dentro de la banda de valencia. Así, los estados exteriores están menos ligados, son más energéticos y dan lugar a los huecos ligeros con movilidades superiores. En otro caso los huecos pesados representan estados más ligados al núcleo atómico, siendo menos energéticos y con movilidades inferiores.

Hasta ahora se ha hablado de la estructura de bandas de energía de una estructura cristalina formada por un solo compuesto, el *GaAs*. Otros materiales más complejos son las *heteroestructuras semiconductoras*. Éstas consisten en estructuras formadas por la sucesión de capas cristalinas de distintos compuestos. Con ellas se consigue crear dispositivos tales como el pozo cuántico rectangular que es ideal para el estudio de los fenómenos de *tuneleo*.

En la figura i.2 puede observarse una representación bastante sencilla de lo que es el perfil de potencial de un pozo cuántico rectangular. Este pozo está formado por la sucesión de tres capas cristalinas: las más exteriores son de *arseniuro de galio-aluminio* ($Al_xGa_{1-x}As$), y la central es de *GaAs*. El $Al_xGa_{1-x}As$ es un compuesto formado a partir del *GaAs* y del *arseniuro de aluminio* (*AsAl*), donde con el índice x se refleja la

porción de átomos de galio que han sido sustituidos por átomos de aluminio dentro de la red cristalina.

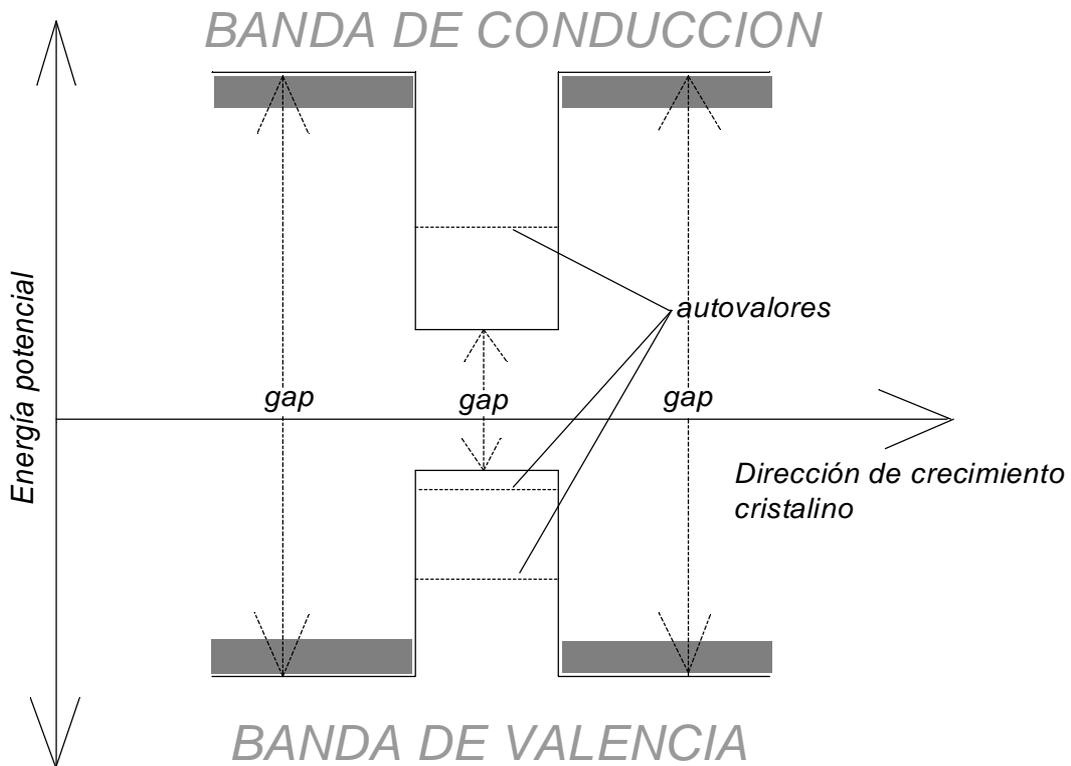


figura i.2.- Perfil de potencial de un pozo cuántico rectangular.

La razón de usar estos compuestos estriba en la similitud de sus estructuras cristalinas (ambos cristalizan en el sistema cúbico centrado en las caras y poseen un parámetro de red prácticamente idéntico^[5]), lo que va a permitir minimizar las imperfecciones en las *interfaces* (superficies de separación) que, como se verá, son determinantes en el comportamiento del dispositivo.

La diferencia de gaps de estos compuestos (para el $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, $E_g=2.453eV$) incorpora un potencial que se superpone al propio de la red

cristalina (éste es el perfil de potencial dibujado en la figura i.2). De este modo, los portadores situados en estados, ya sea en la banda de conducción o de valencia, dentro de la capa del compuesto *GaAs* se encontrarán con sendas barreras de potencial en ambos extremos.

La forma de este potencial, en especial en las interfaces, depende en gran medida de la calidad de la técnica que se emplee para el crecimiento de una estructura cristalina sobre otra^[1,3,6]. Las técnicas más eficaces que se han desarrollado han sido la *deposición química de vapor de metal-orgánico* (MOCVD) y la *epitaxia de haces moleculares* (MBE). Esta última, gracias a su alto control en la limpieza del sustrato y en el posterior crecimiento cristalino, se puede considerar una técnica casi perfecta. En ambas se consigue un crecimiento lento, lo que permite seleccionar la *rugosidad* deseada y el contenido de impurezas. Gracias a ello se pueden obtener altas movilidades y picos agudos de luminiscencia intrínseca (luminiscencia asociada a la relajación directa del estado excitónico producido por una fotoexcitación).

Otras técnicas empleadas, que han demostrado ser eficaces para materiales en los que no es necesario un control tan exhaustivo del crecimiento, son el *transporte por vapor de hidruro*, la *epitaxia de pared caliente* (HWE) o la *epitaxia por fase líquida* (LPE).

Para comprender mejor los fundamentos básicos que van a aplicarse en los distintos estudios de esta memoria, es conveniente profundizar en los procesos de tuneo que se producen en un pozo cuántico. Considérese el caso de un electrón que intentara penetrar en un

pozo flanqueado por sendas barreras de potencial (figura i.3). Desde el punto de vista de la mecánica clásica, estas barreras serían insalvables. Sin embargo, la teoría cuántica predice la probabilidad no nula de que el electrón pueda adentrarse en la citada barrera^[4]. Una vez dentro, el decaimiento exponencial de la energía cinética sería tal que acabaría deteniéndose y retornando por el camino por el que entró. Si el espesor de la barrera es suficientemente pequeño podría darse el caso de que el electrón consiguiera atravesarla por completo: se dice entonces que ha *tuneado*. Para que el paso sea completo, o sea, para que el electrón permanezca en el interior del pozo, éste ha de poseer una energía determinada que se corresponda con la de un estado estacionario o *resonante* de dicho pozo. De no ser así, el electrón permanecería en un estado de no equilibrio energético y terminaría por retroceder y salirse del pozo. El gran éxito de la mecánica cuántica es determinar la existencia de tales estados resonantes y de las condiciones de contorno que son necesarias establecer para calcular el valor de las energías de tales estados.

Los valores energéticos de los citados estados estacionarios son específicos de cada pozo tanto por sus dimensiones, material que lo constituye, técnica que ha sido usada para su crecimiento, sin olvidar condiciones ambientales y existencia de campos perturbadores externos. Todas estas dependencias, entre otras, quedan plasmadas en la denominada *relación de dispersión* $E = E(\vec{k})$ ^[5] que, como ya se ha comentado, refleja el comportamiento energético del portador dentro del dispositivo para cada valor de su momento. Esta *ecuación de estado* es

solución de la denominada ecuación de *Schrödinger* correspondiente al dispositivo

$$\left\{ \frac{\vec{p}^2}{2m_0(\vec{r})} + V_{\text{cristal}}(\vec{r}) + V_0(\vec{r}) + U(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}) = E(\vec{k}) \Psi(\vec{r}) \quad (\text{I.2})$$

donde, por simplicidad, se la ha considerado independiente del tiempo (con posterioridad se tratará la dependencia temporal). En esta ecuación, m_0 es la masa del electrón libre, V_{cristal} es el potencial del cristal, V_0 es el potencial que está dado por la diferencia de gap de energías entre las distintas capas del dispositivo (figura i.2), U es el potencial asociado a la posible aplicación de campos externos, Ψ es la función de onda asociada al portador, y que refleja la probabilidad de presencia del mismo dentro de la muestra en estudio, y E que se corresponde con el espectro de energías compatible con la citada ecuación (*autovalores*).

Esta ecuación suele ser sustituida por

$$\left\{ \frac{\vec{p}^2}{2m_0^*(\vec{r})} + V_0(\vec{r}) + U(\vec{r}) \right\} \Psi(\vec{r}) = E(\vec{k}) \Psi(\vec{r}) \quad (\text{I.3})$$

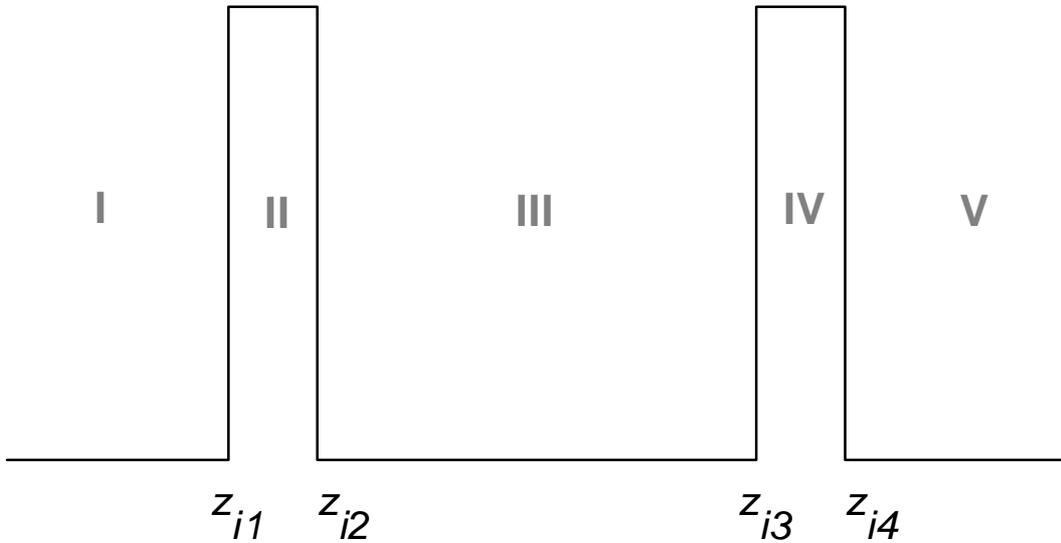
donde $m_0^*(\vec{r})$ es la denominada *masa efectiva* y en ella se recoge la contribución del potencial cristalino efectivo que modeliza el conjunto de interacciones del portador con la red cristalina. La masa efectiva es una magnitud tensorial que puede definirse a partir de la expresión

$$\frac{1}{m_{i,j}} = \frac{1}{\hbar^2 k_i} \frac{\partial E}{\partial k_j} \quad (\text{I.4})$$

donde el subíndice i recoge las distintas direcciones de movimiento del electrón, y el subíndice j las fuerzas de la red cristalina que actúan sobre el mismo. No obstante, en el punto \mathbf{G} la masa efectiva puede tratarse como un escalar. Dada la dependencia con el potencial cristalino, el modelo que se elija para describir el mismo, determinará el cálculo que haya de realizarse. En esta memoria no se va a profundizar en el desarrollo del modelo a utilizar. En principio, el modelo que se aplicará es el de *ligadura fuerte (TBA)*, que considera que las bandas de energía en el sólido son extensiones de los niveles de energía de los átomos que lo forman. Los valores que van a emplearse para esta memoria han sido recogidos de la literatura disponible y serán referidos conforme vayan apareciendo.

Es importante reseñar que el potencial V_0 , del que ya se ha hablado, se simplificará mediante la *aproximación de función envolvente*^[7]. En ella se supone que el potencial de la interface (o potencial de la barrera) está fuertemente localizado en la interface barrera-pozo lo cual se traduce en que, en la escala de variación de la función de onda envolvente (la función de onda o *función propia* de toda la estructura), el potencial de la interface está bien localizado en la misma. Es decir, los potenciales pueden representarse por funciones escalón (modelo de *Krönig-Penney*). Ya se ha comentado que la forma de las interfaces es muy dependiente del proceso de crecimiento cristalino, así

como de la propia naturaleza de las estructura cristalinas que unen. Por tanto, esta “idealización” facilitará, en gran medida, los cálculos.



$$\Psi_a(z_{ib}) = \Psi_{a+1}(z_{ib})$$

$$\frac{1}{m_a^*} \frac{\mathcal{I} \Psi_a(z_{ib})}{\mathcal{I} z} = \frac{1}{m_{a+1}^*} \frac{\mathcal{I} \Psi_{a+1}(z_{ib})}{\mathcal{I} z} \quad (\text{I.5})$$

$$\forall a = I, II, III, IV, V$$

$$\forall b = 1, 2, 3, 4$$

figura i.3.- Condiciones de continuidad para las funciones de onda en una doble barrera

Con todas estas simplificaciones queda aplicar, por último, las condiciones de contorno en las interfaces de las capas que conforman el material^[7]. En definitiva, se establece la continuidad en el espacio real de la función de onda (ecuaciones I.5) en las interfaces así como la de su primera derivada dividida por la masa efectiva del portador en cada material.

En este contexto se considerará que la función de onda del electrón o del hueco, según sea el caso, así como su masa efectiva serán específicas de cada una de las capas que componen la heteroestructura. Para que esta premisa se cumpla es necesario que el valor del recorrido medio del electrón libre sea mucho menor que los espesores de las capas. De este modo, el electrón podrá considerarse perteneciente a la estructura de bandas de cada capa.

Las ecuaciones I.5 sólo se refieren a las componentes z . Este eje se ha tomado como dirección de crecimiento cristalino. Las interfaces son perpendiculares a este eje (en una situación ideal) y, por tanto, el potencial efectivo de la heteroestructura es función únicamente de z . Así, pues, las condiciones de continuidad son restrictivas para los portadores en esa dirección. Para las otras direcciones del movimiento x e y , en ausencia de campos externos, los portadores se considerarán libres.

En la figura i.3 se ha pretendido ser generalista y con el fin de hacer más comprensible el modo de aplicar las condiciones de continuidad en una superred, se ha representado una doble barrera. La diferencia respecto al pozo de la figura i.2 es la incorporación de dos capas exteriores. Cuando se crece un pozo, estas capas suelen ser del mismo material que el empleado para la capa central del citado pozo y constituyen los *electrodos* o puntos de conexión con un circuito exterior. Se les *dopa* con impurezas que aportan los portadores necesarios para la conducción (como ya se ha comentado, el arseniuro de galio no posee

portadores libres a bajas temperaturas). Los procesos de conducción se tratarán con más detalle en el capítulo siguiente.

La ecuación de *Schrödinger* para un pozo rectangular se resuelve analíticamente de un modo sencillo^[4] teniendo las funciones propias (funciones de onda de los estados estacionarios) forma de ondas planas.

Superredes

Las condiciones de tuneo que acaban de describirse para una doble barrera no son restrictivas respecto al tipo de estructura empleada. De hecho, podrían aplicarse a una sucesión de heteroestructuras crecidas a partir de materiales con los más variados *gaps*. Imagínese una *superred* formada por un conjunto de n barreras y $n-1$ pozos idénticos, tal y como se representa en la siguiente figura:

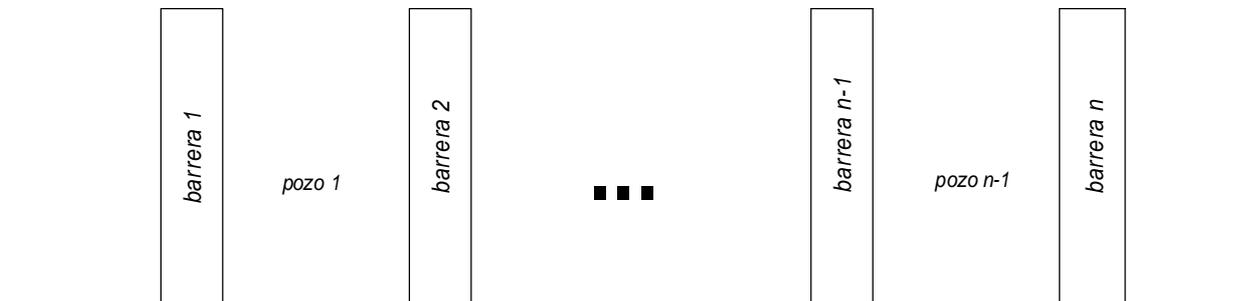


figura i.4.- Esquema sencillo de superred.

Cada agrupación individual de pozo y doble barrera posee unas determinadas energías asociadas a los respectivos estados estacionarios (o *autovalores*) que son soluciones de las ecuaciones ya descritas. La pregunta más lógica que puede plantearse a continuación es cómo serían los estados de todo el conjunto que conforma la superred. La respuesta más sencilla es que, al ser todos los pozos y barreras idénticos, el conjunto debería tener los mismos autovalores; es decir, los estados serían degenerados de orden $n-1$.

En las siguientes gráficas, se han representado dos situaciones distintas, correspondientes a un pozo rectangular simple (figura i.5) y un doble pozo rectangular (figura i.6).

En ambos casos, los pozos son de $GaAs$ (50\AA) y se encuentran flanqueados por barreras de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (25\AA). En estas figuras puede apreciarse con claridad cómo la incorporación de un nuevo pozo a la heteroestructura introduce un nuevo nivel de energía, que es estado resonante de toda la estructura (figura i.7). A pesar de que los pozos son idénticos, los niveles no son coincidentes sino que se encuentran separados entre sí.

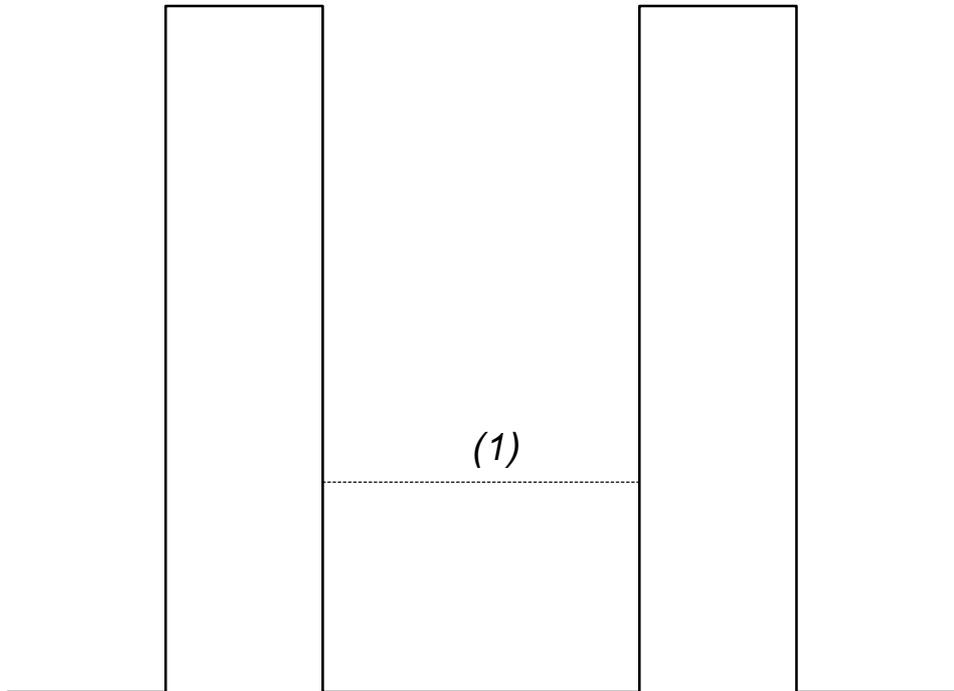


figura i.5.- Pozo rectangular simple.

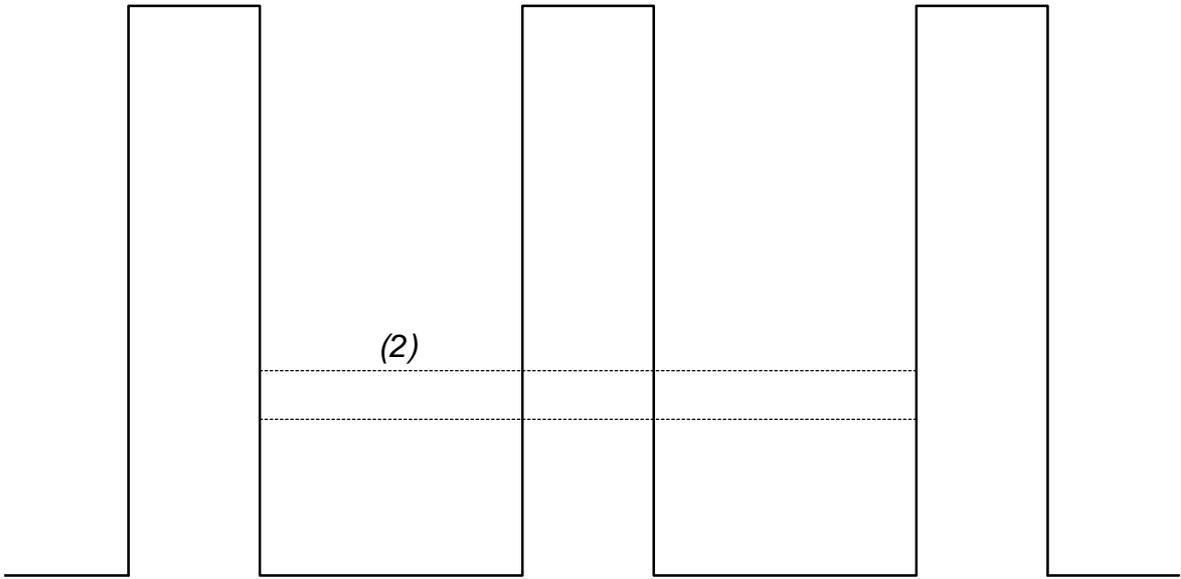


figura i.6.- Doble pozo rectangular

En la figura i.7 puede apreciarse la distribución de niveles correspondientes al estado fundamental para los casos: (1) pozo rectangular simple, (2) doble pozo rectangular, (3) triple pozo rectangular y (4) cuádruple pozo rectangular. Las dimensiones de los pozos y barreras son iguales a las descritas para las figuras i.5 e i.6. Así, pues, la incorporación de un nuevo pozo produce la aparición de un nuevo nivel.

Estos agrupamientos de niveles constituyen las denominadas *minibandas*^[8] de la superred y reflejan la ruptura de la degeneración ocasionada por el potencial de las interfaces V_0 . (ecuación I.3). Es importante reseñar que esta separación de niveles ha sido observada experimentalmente^[2], siendo el grado de separación dependiente del

ancho de las barreras y de la altura de las mismas (valor del potencial efectivo en las interfaces).

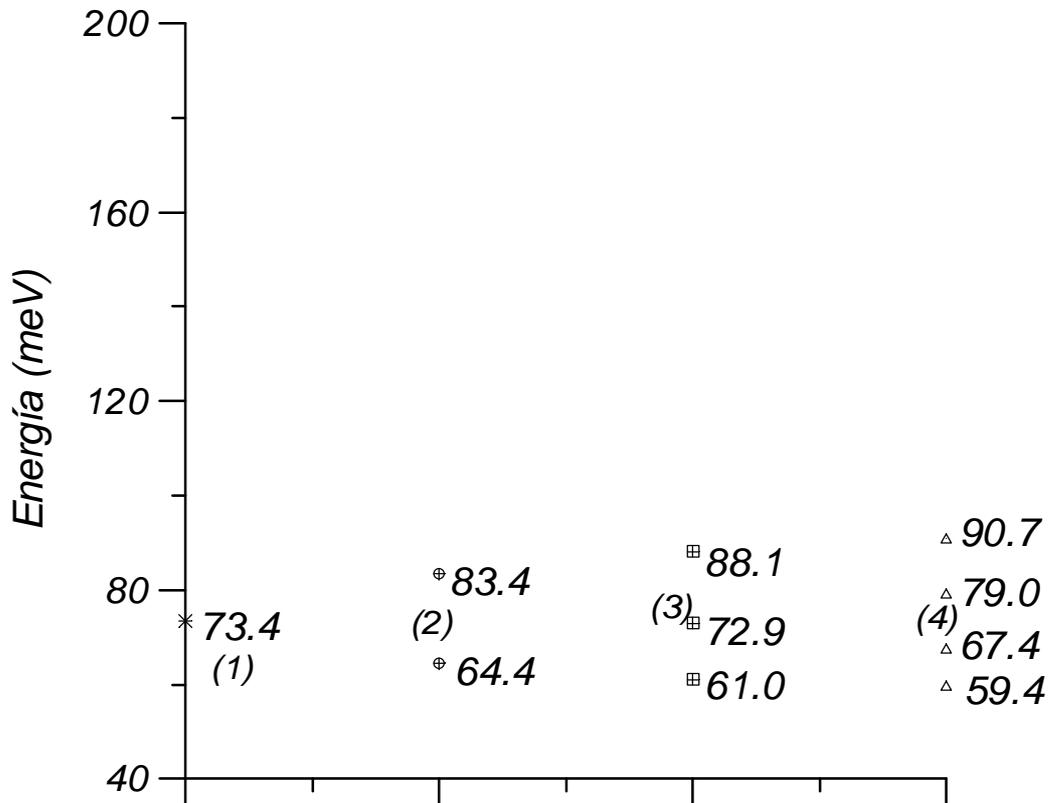


figura i.7.- Separación de niveles para el estado fundamental en un pozo simple (1), doble pozo (2), triple pozo (3) y cuádruple pozo (4).

Dentro de estas minibandas, el portador puede estar localizado en cualquiera de los pozos que componen la superred con lo que se puede hablar de *deslocalización*. No obstante, en ausencia de campos externos, si se representara el paquete de ondas asociado al portador, los pozos centrales de la superred presentarían una mayor probabilidad de ocupación.

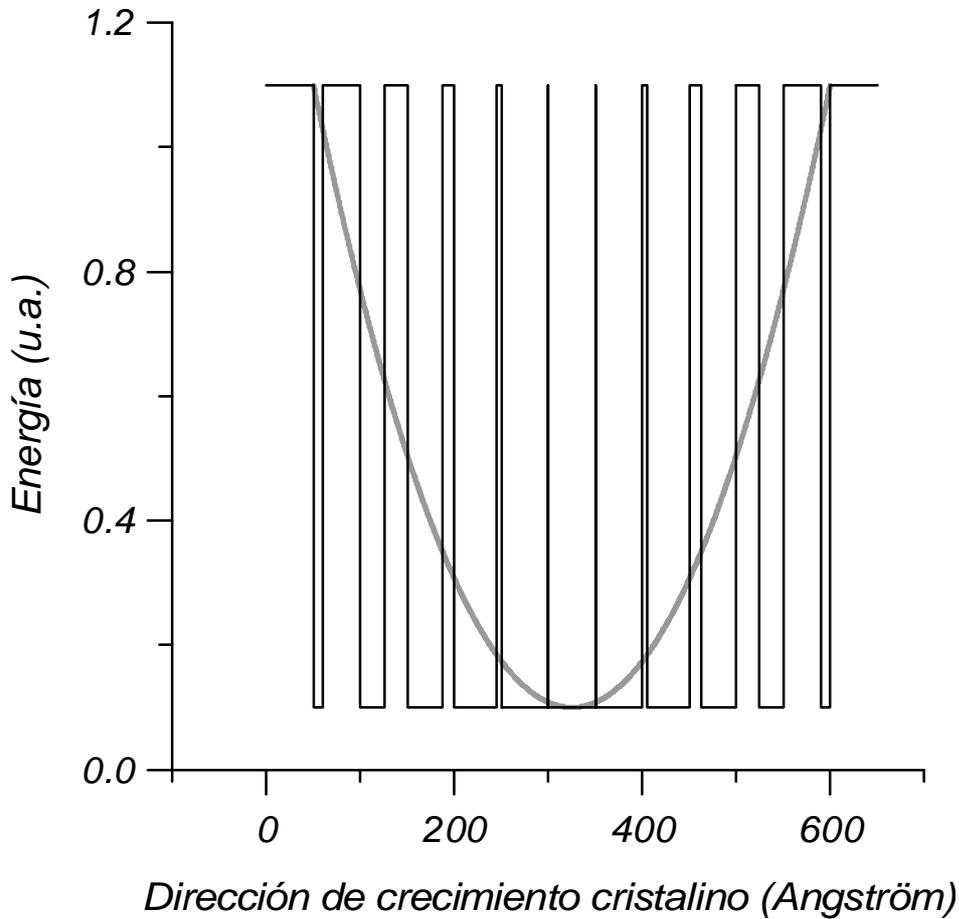


figura i.8.- Superred que emula a un pozo parabólico con superposición del perfil de potencial del pozo teórico.

Un caso particular de la aplicación de las superredes es aquél que simula al denominado *pozo parabólico*^[9-12] cuya peculiaridad, aparte de presentar un perfil de potencial parabólico, es la de poseer niveles resonantes equidistantes. La técnica consiste simplemente en ajustar los anchos de los pozos con el fin de obtener una relación de dispersión $E = E(\vec{k})$ prácticamente igual a la de un determinado pozo parabólico (figura i.8). Este caso será estudiado en esta memoria.

Para la determinación de la superred de la figura i.8 se ha seguido el siguiente procedimiento. Se parte de la necesidad de emular un pozo parabólico de longitud L . Esta magnitud se divide en n segmentos iguales de longitud l : para el caso concreto de la figura i.8, $L=550\text{Å}$ y $l=50\text{Å}$. Cada segmento corresponde a un par de capas de las que una será una barrera y otra será un pozo (el potencial de la barrera de elegirá del mismo valor que el del pozo parabólico ideal); hay una excepción a esta regla y es para el segmento central que estará formado por una sola capa de pozo. Por simetría se calcularán los anchos de barreras y pozos de la mitad de la superred. Para obtener la magnitud de los anchos de las barreras se usará la expresión

$$z_{b,i} = \left(\frac{p}{m} \right)^2 \quad (\text{I.6})$$

donde $m=n-1$ (se quita el segmento central) y p es un entero impar que va desde 1 hasta el valor más cercano a m (para el caso de la figura i.8, $p=1,3,5,7,9$ y $m=10$). Los anchos de las capas de pozo correspondientes a cada segmento serán $z_{w,i} = l - z_{b,i}$.

La razón de usar estas estructuras y no las ideales, que correspondería al crecimiento del material con una variación galio-aluminio que guardara una relación parabólica, estriba en el hecho de estudiar dichos pozos tal y como habitualmente se crecen en el laboratorio. Asimismo, se podrán aplicar de manera más sencilla las aproximaciones y modelos que ya han sido descritos para estructuras tan elementales como son los pozos rectangulares simples o dobles pozos, lo

que va a facilitar el cálculo numérico que vaya a realizarse. Una de las razones de estudiar el pozo parabólico, como se tendrá ocasión de comprobar, es que debido a su peculiar distribución de niveles es ideal para visualizar de un modo sencillo los fenómenos tanto coherentes como dispersivos en grandes heteroestructuras.

Procesos de tuneleo

El tuneleo de portadores a través de heteroestructuras involucra dos fenómenos diferentes: el proceso de tuneleo *coherente*, que acaba de describirse y que conlleva transiciones elásticas entre estados de pozos (o sea, transiciones con conservación de la energía del portador) ; y el tuneleo asociado a procesos dispersivos, tanto elásticos (como el asociado a la interface rugosa; en adelante *IR*) como inelásticos (como el asociado a fonones ópticos longitudinales; en adelante *LO*). En ambos casos, la transición se produce por la presencia de *anomalías* en la red cristalina. Éstas son ocasionadas por las limitaciones de la técnica empleada para el crecimiento de las muestras así como de las características vibracionales de los átomos de la red.

A pesar de no poder describir con exactitud todas las *anomalías* que se producen en las muestras reales, pueden modelizarse las más importantes. En tales modelos se consideran que las imperfecciones no son demasiado significativas, con lo que los procesos dispersivos pueden ser tratados por métodos perturbativos. Ésto supone una gran ventaja pues permite trabajar en situaciones ideales, a la vez que se dan explicaciones satisfactorias a las medidas realizadas en laboratorio.

Pueden esquematizarse los procesos *dispersivos* que, de modo más determinante, afectan al comportamiento de un portador en el seno de un dispositivo^[5] tal y como se refleja en la figura i.9.

En el primer grupo se sitúan todos aquellos defectos producidos durante el crecimiento, tales como una mala calidad del proceso seguido para el mismo (dislocaciones, interfaces rugosas), la falta de pureza del material empleado (átomos neutros o partículas ionizadas) o un mal acoplamiento de los distintos átomos dentro de la red cristalina al ser, por ejemplo, materiales con parámetros de red muy diferentes. No hay que olvidar que todas estas clases de impurezas pueden introducirse en la muestra intencionadamente, como es el caso del dopaje para producir portadores libres.

Otro grupo engloba el conjunto de efectos asociados al hecho de que los átomos que conforman la red no están fijos en la misma, sino vibrando en torno a sus puntos teóricos de equilibrio. Las interacciones de los portadores con estas perturbaciones se tratan con la descripción mecano-cuántica de las vibraciones: en ella, a cada vibración se le asocia un *fonón* o cuanto de movimiento que puede considerarse como una partícula con energía y momento determinados. Dentro de las vibraciones de un átomo se distinguen aquellas que se producen en fase con las de los átomos vecinos, denominadas *acústicas*, o en oposición de fase, en cuyo caso se habla de fonones *ópticos*.

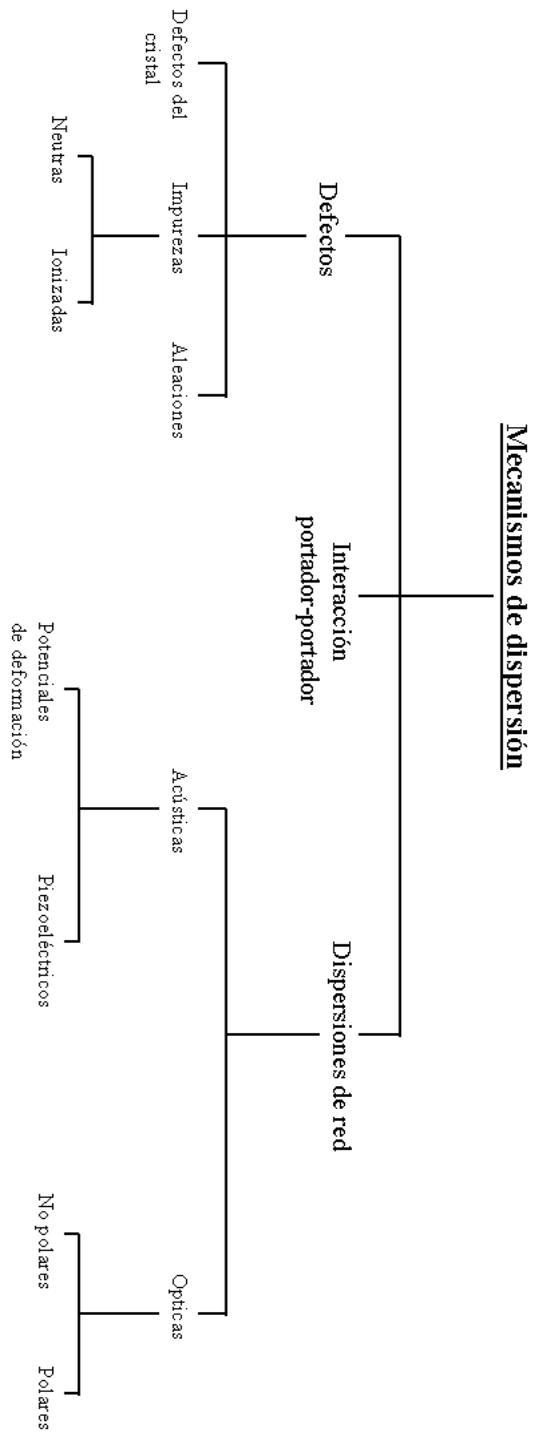


figura i.9.- Principales mecanismos de dispersión

Dentro de esta clasificación podría distinguirse de un modo más genérico entre aquellas vibraciones o fonones cuyo momento fuera tan elevado que al intercambiarlo, por conservación con el electrón, éste pudiera saltar dentro del espacio de las fases a otro *valle* de mínima energía con modificación del gap. Estos casos no van a tratarse en esta memoria y, por tanto, no volverán a ser mencionados. Luego, nuestro estudio se ceñirá a las transiciones *intravalle*. Volviendo a los fonones acústicos se puede hacer una nueva clasificación en la que se distinguirán dos casos: en unos de ellos el perfil del potencial cristalino sufrirá deformaciones debido a los cambios espaciales de los átomos de la red. Por otra parte, podrá considerarse que debido a ionizaciones parciales del cristal se puedan producir potenciales perturbadores eléctricos.

Respecto a los fonones ópticos, éstos se clasifican en *polares*, debido a la aparición de potenciales asociados a la polarización de las cargas de los átomos que conforman la red; o *no polares*, si no es el caso.

Finalmente, deben mencionarse las interacciones producidas entre portadores con la aparición de fenómenos de apantallamiento. Como se verá su influencia es determinante para la justificación de comportamientos asociados a emisiones.

Nota.- La palabra *interface* es un término inglés. El neologismo propuesto por la *Real Academia Española* para su traducción es el de *interfaz*. No obstante, a lo largo de toda la memoria se usará el término inglés que es el que habitualmente se emplea en la literatura científica.

Capítulo I
Estudio de magnetotúnel en una
heteroestructura semiconductor

Capítulo I

Estudio de magnetotúnel en una heteroestructura semiconductora

Introducción

La aplicación de un campo eléctrico en la dirección de crecimiento cristalino (se tomará el eje z) de un pozo produce una alteración en el diagrama dispersivo $E = E(k_z)$, como consecuencia de la energía aportada por el mismo. Supóngase que el material en estudio es un pozo situado entre dos electrodos dopados con el fin de disponer de portadores libres (el arseniuro de galio, material con el que se va a trabajar, no los posee a las temperaturas que se usarán en este análisis). En el electrodo izquierdo se encuentra una nube electrónica con energías inferiores al denominado nivel de *Fermi*. Al ser la energía aportada por el campo eléctrico, F , dependiente del espacio, $E_f = E_i + eFz$ (siendo e la carga del portador, que para el electrón valdrá $-e$), la variación producida en el electrodo izquierdo será distinta que la del pozo así como la del electrodo derecho. Cuando el valor de la energía de un nivel del pozo se sitúa por debajo del nivel de *Fermi* del electrodo izquierdo la probabilidad de tuneleo será máxima. Se produce entonces una transición (*crossing*) en la que se ha conservado el momento $\hbar\vec{k}$ del electrón y, por lo tanto, es coherente pues permanece constante la fase asociada a la función de onda del

portador. En realidad, la fase es constante salvo un factor que no va a tenerse en cuenta en este estudio.

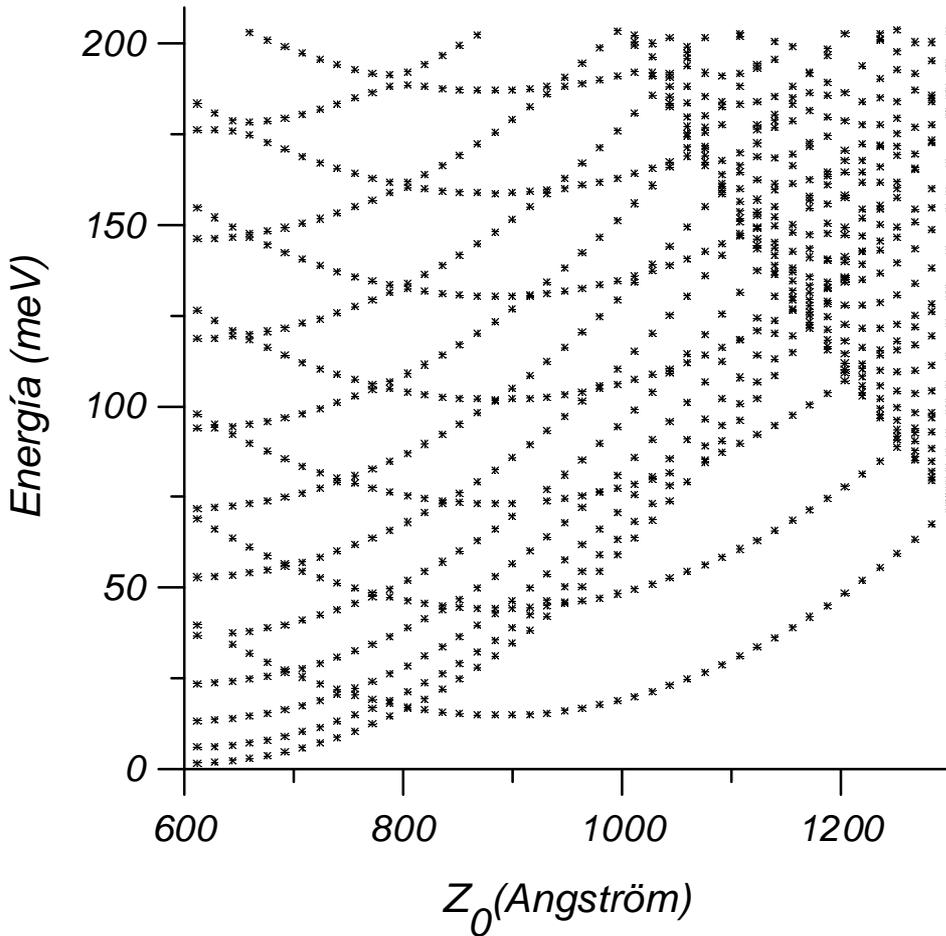


figura 1.1.- Diagrama dispersivo $E=E(k_y)$ para un pozo parabólico de 550\AA sometido a un campo magnético de 5 Teslas.

La aplicación de un campo magnético, perpendicular a la dirección de crecimiento cristalino (se tomará el eje y), altera la relación de dispersión del sistema $E = E(k_y)$ con la consecuente cuantización de

niveles en el plano k_y - k_x del espacio de las fases tal y como se observa en la figura 1.1.

Los valores de las transiciones coherentes en presencia de campos magnéticos son diferentes, como se tendrá ocasión de mostrar en este estudio.

En la figura 1.1 se ha representado $E=E(z_0)$ en vez de $E=E(k_y)$. En los párrafos siguientes se explicará el valor de z_0 . Como se tendrá ocasión de comprobar (ecuación 1.9) ambos parámetros son equivalentes. En la gráfica se aprecia la alteración de niveles ocasionada por la aplicación de un campo magnético. Para valores de z_0 grandes se observa una nube de puntos que se corresponden a estados del continuo. Es decir, estados situados por encima de los potenciales de las barreras.

El campo magnético reduce los grados de libertad de los portadores en el sistema, pasando de dos (el potencial V_0 produce una cuantización de la energía del portador en k_z) a uno por la cuantización de la energía del portador en k_y .

En cualquier caso, puede expresarse la contribución de cada portador a la densidad de corriente, en la dirección z , como

$$\frac{\hbar k_z}{2 m^*} T(E_{k_z}) f(E_{k_z}) \quad (1.1)$$

que recoge la velocidad asociada a la energía cinética del portador, el coeficiente de transmisión o probabilidad que posee el mismo de tunelear en función de su energía, así como la función de distribución asociada a la estadística de *Fermi-Dirac*^[13,14], que puede expresarse de forma genérica como

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \quad (1.2)$$

y que recoge la relación entre el número de electrones ocupando un nivel de energía E y el número de niveles con energía E ^[5].

En la figura 1.2, puede observarse la función de distribución de *Fermi* para los casos $E_F = 50meV$, con $T = 300K$, $T = 100K$ y $T = 4K$. Con posterioridad se discutirá el nivel de *Fermi* que va a elegirse para las muestras que se analizarán, así como la temperatura de trabajo que, como se tendrá ocasión de comprobar, serán determinantes para el estudio que va a realizarse.

De la ecuación 1.1 queda por mencionar el factor 2 que recoge la contribución promedio del momento de espín del portador a la energía total del mismo. Conviene mencionar que en ningún momento se tendrá en cuenta ningún efecto asociado al espín del portador. Se considerará que el momento de espín se conserva en toda la estructura.

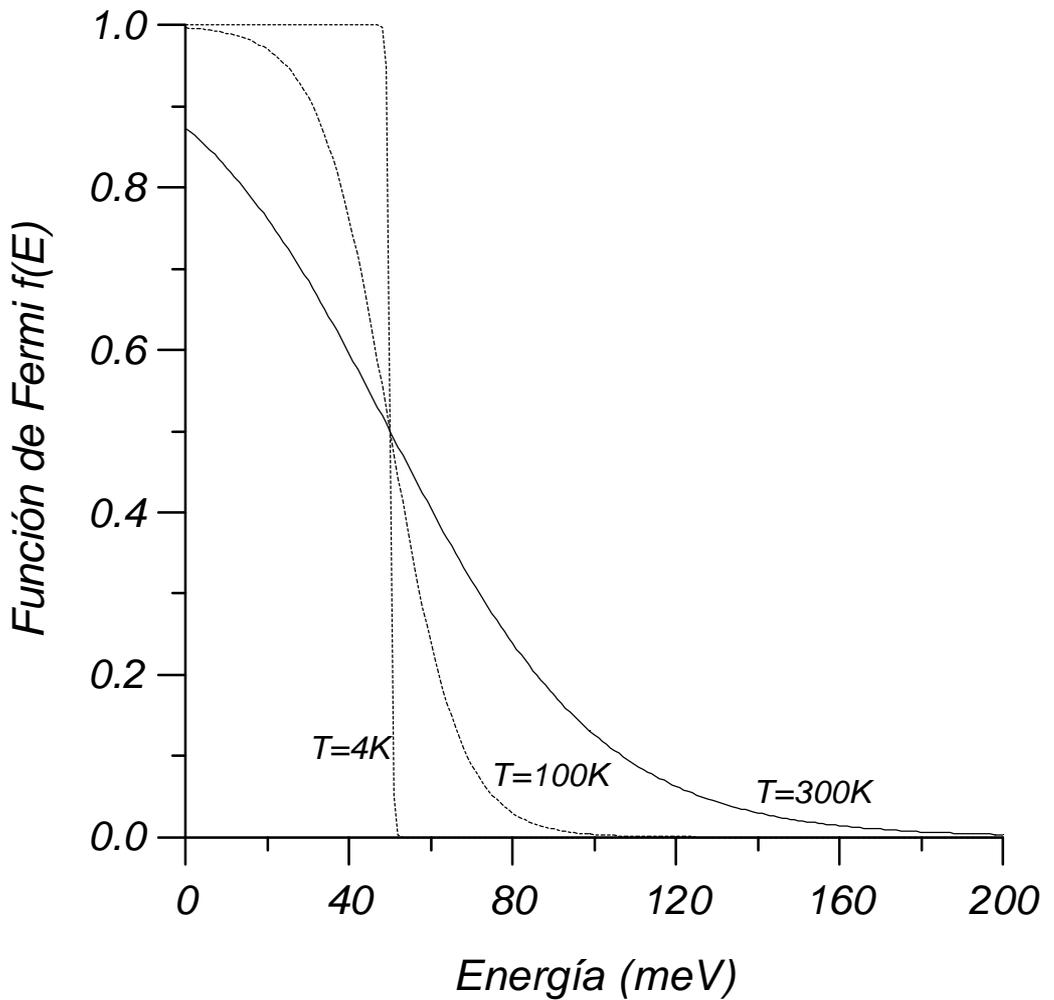


figura 1.2.- Función de distribución de Fermi.

Respecto al coeficiente de transmisión coherente^[15], éste es característico de cada muestra y presenta una singularidad matemática para cada transición que se produzca entre estados resonantes, lo que se interpretará como una probabilidad máxima cuyo valor será normalizado.

La contribución del conjunto de portadores a la densidad de corriente coherente que circula a lo largo de la dirección de crecimiento cristalino del dispositivo puede representarse por

$$J(F, B) = \sum_{k_z} N \frac{\hbar k_z}{2m^*} T(E_{k_z}) f(E_{k_z}) \quad (1.3)$$

donde N representa el dopado del electrodo o concentración de portadores libres. Para este estudio se utilizará $N = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Esta magnitud se ajusta con el valor de E_F deseado a través de la expresión

$$N = \left(\frac{2m^* KT}{2\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{E_F - E_c}{KT}} \quad (1.4)$$

y en la que K es la constante de *Boltzman*, T es la temperatura y E_c es el valor mínimo de la energía en la banda de conducción, o el valor máximo en la banda de valencia, según sea el caso: si se toma como valor de referencia dentro de la banda, puede igualarse a cero.

En este estudio va a realizarse un análisis comparativo del efecto del magnetotúnel resonante sobre la corriente de electrones para dos tipos de estructuras: un pozo rectangular simple, que ya ha sido ampliamente analizado, y un pozo parabólico, cuyo tratamiento será una extensión del que se realice para el pozo simple.

Modelo

Para la aplicación de la ecuación 1.3 sobre las estructuras en estudio debe resolverse, en primer lugar, la ecuación de *Schrödinger* que, por simplicidad, será considerada independiente del tiempo. Para ello se aplicará el hamiltoniano correspondiente a una partícula sin espín en el seno de una capa semiconductor y sometido a campos eléctricos $\vec{F} = eF \hat{z}$ (siendo e la carga de la partícula) y magnéticos $\vec{B} = B \hat{y}$ que, con el empleo de la masa efectiva, queda

$$H = \frac{1}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c^2} \vec{A} \right)^2 + V_0(z) + eFz \quad (1.5)$$

donde $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ es el momento cinético de la partícula, \vec{A} es el potencial vector o *gauge* asociado al campo magnético, que viene dado por $\vec{A} = (0, -Bz, 0)$ y $V_0(z)$ es el potencial efectivo que ya ha sido descrito en el capítulo introductorio. El hamiltoniano puede reescribirse como^[16]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{e^2 B^2 z^2}{2m^* c^2} - \frac{ie\hbar Bz}{m^* c} \frac{\partial}{\partial y} + V(z) + eFz \quad (1.6)$$

La resolución de la ecuación de Schrödinger asociada daría lugar a un conjunto de funciones de onda que se expresarían en los siguientes términos: para el pozo *iésimo* se tendría^[17]

$$\begin{aligned} \Psi_{w,i}(z) = & A_{w,i} U \left[-C_{\mu}, 2^{\frac{1}{2}}(z - z_0 - \gamma_{B,w}) / r_{B,w} \right] \\ & + B_{w,i} V \left[-C_{\mu}, 2^{\frac{1}{2}}(z - z_0 - \gamma_{B,w}) / r_{B,w} \right] \end{aligned} \quad (1.7)$$

y para la barrera j -ésima,

$$\begin{aligned} \Psi_{b,j}(z) = & A_{b,j} U \left[-C_{\mu} + v_0^{(M)}, 2^{\frac{1}{2}}(z - z_0 - \gamma_{B,b}) / r_{B,b} \right] \\ & + B_{b,j} V \left[-C_{\mu} + v_0^{(M)}, 2^{\frac{1}{2}}(z - z_0 - \gamma_{B,b}) / r_{B,b} \right] \end{aligned} \quad (1.8)$$

donde $U(c, \mathbf{z})$, $V(c, \mathbf{z})$ son funciones cilíndricas parabólicas de *Weber*^[18] y tanto A_i como B_i son las constantes de integración. En estas expresiones,

$$z_0 = -\frac{\hbar k_y c}{eB} \quad (1.9)$$

representa la denominada coordenada del centro de órbita de ciclotrón clásico, y

$$r_B = \left(\frac{\hbar}{eB} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.10)$$

es el radio magnético. Asimismo,

$$\begin{aligned}
C_m &= \frac{(E - \frac{p_z^2}{2m^*}) - \frac{1}{2}eFz + \frac{1}{2}eF(2z_0 - g_B)}{\hbar \omega_B} \\
g_B &= \frac{F}{\omega_B B} \\
n_0^{(M)} &= \frac{V_b}{\hbar \omega_B}
\end{aligned} \tag{1.11}$$

son parámetros en los que

$$\omega_B = \frac{eB}{mc} \tag{1.12}$$

es la denominada frecuencia ciclotrón, V_b es la altura de la barrera, E es la energía de la carga y p_z es el momento cinético.

En los contactos, o interfaces con los electrodos, las funciones de onda quedan

$$\Psi_{b,l} = A_\infty^{(-)} U \left[-C_\mu + v_0^{(M)}, 2^{\frac{1}{2}}(z_0 - z + \gamma_B) / r_{B,b} \right] \tag{1.13}$$

$$\Psi_{b,r} = A_\infty^{(+)} U \left[-C_\mu + v_0^{(M)}, 2^{\frac{1}{2}}(z - z_0 - \gamma_{B,b}) \right] \tag{1.14}$$

para los laterales izquierdo y derecho, respectivamente.

Para la determinación completa de las funciones propias del sistema, es necesario conocer los autovalores del mismo, o sea, es preciso

calcular la relación de dispersión de la heteroestructura. Dada la complejidad de los cálculos a realizar y con el fin de implementar los mismos en un ordenador, en el siguiente apartado va a proponerse un método simplificado para el cálculo de las energías basado en lo que habitualmente se ha denominado *método de los elementos finitos*.

Previamente, se describirá la técnica empleada para calcular los coeficientes de transmisión que son precisos determinar para evaluar la corriente que circula por el dispositivo que se está analizando (ecuación 1.3). Al método empleado se le denomina *método de la matriz de transferencia*.

Métodos de la matriz de transferencia y de los elementos finitos

Antes de profundizar en estos métodos conviene citar que existen otras aproximaciones que pueden emplearse para el estudio de fenómenos de tuneo resonante tales como el método *Wentzel-Kramers-Brillouin* (WKB) y el de la solución de la ecuación de transporte de *Boltzmann* por el método de *Monte Carlo*. El primero es válido cuando las energías de las barreras varían lentamente comparadas con la escala de longitudes de onda del electrón. Éste no es el caso en estudio donde los potenciales asociados a las barreras estarán estrictamente localizados en las interfaces de barreras estrechas, siendo las energías del electrón bajas. Respecto al método de *Monte Carlo*, si bien es cómodo para el cálculo de los efectos dispersivos tales como el producido por fonones, no resulta muy práctico para cuantificar soluciones.

El método de la matriz de transferencia^[15,19] fue desarrollado por *Tsu* y *Esaki*. Consiste en aplicar las condiciones de continuidad de la función de onda que ya fueron citadas en el capítulo anterior (ecuaciones i.5 y figura i.3) a cada una de las interfaces que componen la heteroestructura. Así, para la interface *iésima* se tendría

$$\Psi_{b,i}(z_i) = \Psi_{w,i}(z_i) \quad (1.15)$$

$$\frac{1}{m_b^*} \frac{\partial \Psi_{b,i}(z_i)}{\partial z} = \frac{1}{m_w^*} \frac{\partial \Psi_{w,i}(z_i)}{\partial z}$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones 1.7, 1.8, 1.13 y 1.14, las condiciones 1.15 pueden expresarse matricialmente como

$$\begin{pmatrix} U_b(z_i) & V_b(z_i) \\ U'_b(z_i)/m_b^* & V'_b(z_i)/m_b^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{b,i} \\ B_{b,i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_w(z_i) & V_w(z_i) \\ U'_w(z_i)/m_w^* & V'_w(z_i)/m_w^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{w,i} \\ B_{w,i} \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

Aplicando sucesivamente estas condiciones a cada una de las interfaces que componen la superred se llegará a una matriz de transmisión M que será producto de las matrices formadas en cada una de las interfaces

$$M = [S_b(z_I)]^{-1} S_w(z_I) [S_w(z_2)]^{-1} S_b(z_2) \dots \quad (1.17)$$

La transmisión será máxima para $M_{22} = 0$. Ya se ha comentado que la probabilidad de transmisión máxima se produce para valores de energía correspondientes a estados resonantes del sistema. Luego

mediante un proceso iterativo se determinarán los valores de energía que minimizan M_{22} .

Para aplicarlo a la superred propuesta no van a emplearse las funciones de onda que se han obtenido mediante resolución analítica del hamiltoniano (ecuación 1.5), sino que se empleará un método numérico de elementos finitos basado en funciones de onda planas^[15,20]. El error cometido con esta aproximación no es significativo y los cálculos de ordenador se simplifican considerablemente. Para ello, se segmentará la estructura en trozos infinitesimales rectangulares en la dirección z , dirección del crecimiento cristalino. A cada capa constituyente semiconductor, comprendida en el segmento $z_j - z_{j+1}$, le corresponderá un potencial efectivo, V_{ef} , que se elegirá igual al del punto medio del mismo $z_i = (z_j + z_{j+1})/2$. Éste recogerá potencial interface, V_0 , así como el generado por el efecto de la aplicación de un campo magnético.

El hamiltoniano se simplifica tomando la forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} \omega_B^2 (z - z_0)^2 + V_0(z) + eFz \quad (1.18)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_{ef}(z) + eFz$$

En cada una de las interfaces se generará, igualmente, una matriz de transferencia 2×2 formada a partir de las condiciones de continuidad ya descritas. Las condiciones 1.5 no tienen que aplicarse necesariamente

en una interface o superficie de separación entre una barrera y un pozo. De hecho, con el método de los elementos finitos se dividirá cada barrera o pozo en un conjunto de segmentos: cada uno de ellos se considerará separado de los segmentos vecinos por interfaces hipotéticas a las que se les aplicará las condiciones de continuidad.

Se partirá, pues, de un electrón situado en el electrodo izquierdo. El mismo puede representarse por una función de onda formada por una onda plana incidente y otra reflejada

$$y_1(z) = e^{ik_1z} + R \cdot e^{-ik_1z} \quad (1.19)$$

donde $\hbar k_1 = \sqrt{2m_1^*E}$ es el momento cinético del electrón en la dirección z , siendo m_1^* la masa efectiva del mismo en el material semiconductor que forma la capa (*GaAs*) y R una constante que, normalizada, representará el coeficiente de reflexión. Para calcular la función de onda en el resto de las capas se aplicará la ecuación de *Schrödinger* con el hamiltoniano ya citado (ecuación 1.18).

Para el último segmento, n , que se corresponderá con la capa correspondiente al electrodo derecho, se tendrá un electrón con función de onda (en este caso no se considera una onda plana reflejada en el punto de conexión con el circuito exterior pues la incorporación de este proceso se sale del propósito de este estudio)

$$y_n(z) = t e^{ik_nz} \quad (1.20)$$

siendo t una constante que, normalizada, representará el coeficiente de transmisión que es precisamente el dato que se pretende determinar.

Como consecuencia de la aplicación de las condiciones de continuidad a cada una de las interfaces que posee la superred, se obtiene una relación entre la función de onda entrante y saliente de la forma

$$\begin{pmatrix} t \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} \\ N_{21} & N_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ R \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

de donde resulta

$$t = \frac{N_{11}N_{22} - N_{12}N_{21}}{N_{22}} = \frac{1}{N_{22}} \quad (1.22)$$

De este modo, se calculará el coeficiente de transmisión coherente que se necesita para evaluar la densidad de corriente que circula por la muestra que se vaya a estudiar (en esta ecuación se ha tenido en cuenta que se trabajará con funciones de onda normalizadas, por lo que el determinante de la matriz N será igual a la unidad). Asimismo, se utilizará para determinar los estados resonantes de la superred. Para ello, simplemente se calcularán, como ya se ha comentado, por iteración los valores de energía para los que $N_{22} = 0$. Aunque ésto represente una singularidad del coeficiente de transmisión, se traducirá en un valor I del mismo que equivale a una probabilidad total de tuneleo.

Ejemplos de aplicación del método de la matriz de transferencia para la obtención del coeficiente de transmisión son las figuras 1.3 y 1.4.

La figura 1.3 es la representación gráfica del coeficiente de transmisión en función de la energía de un doble pozo de 50\AA y 40\AA de $GaAs$ separados por una barrera de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ de 25\AA para los casos $B=0T$ (línea continua) y $B=5T$ (línea discontinua). En éste último se ha empleado $k_{xy} = 0$ ($z_0 = 0$). La figura 1.4 es la representación gráfica del coeficiente de transmisión en función de la energía de un pozo parabólico de 550\AA con los mismos casos $B=0T$ y $B=5T$. En ambos casos, el campo eléctrico aplicado es nulo.

Puede observarse en la figura 1.4 el desplazamiento de la gráfica correspondiente al caso $B=5T$ respecto al caso $B=0T$. Ésto se debe a que, en presencia de campos magnéticos (en la dirección y), el coeficiente de transmisión es dependiente de k_y . Para la representación de la curva se ha elegido un valor determinado del mismo: no se ha promediado sobre k_y pues los desplazamientos son importantes, como ya se mostrará posteriormente en este mismo capítulo, y la curva resultante no visualiza ninguna información de interés.

Es un hecho destacable que la aplicación de un campo magnético “*agudiza*” las resonancias respecto a las no resonancias. Ésto se aprecia claramente en la figura 1.3.

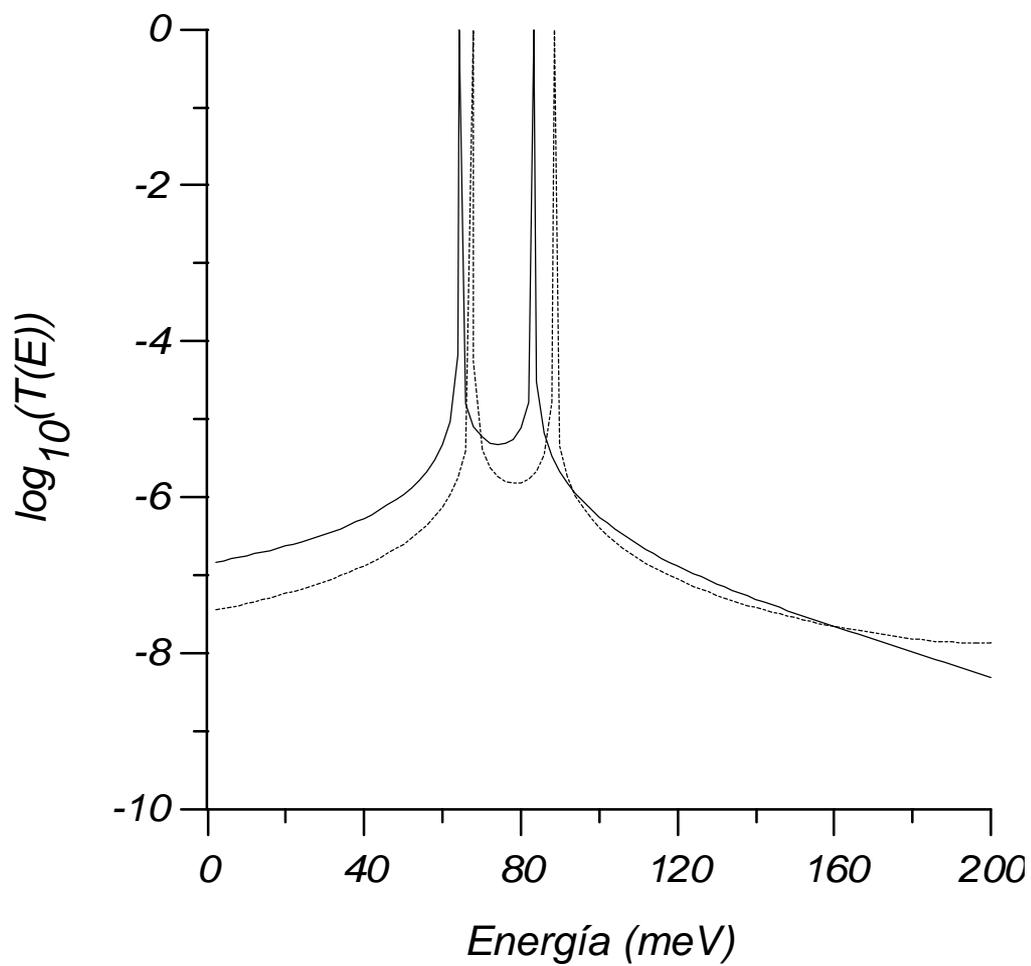


figura 1. 3.- Coeficiente de transmisión de un doble pozo rectangular.

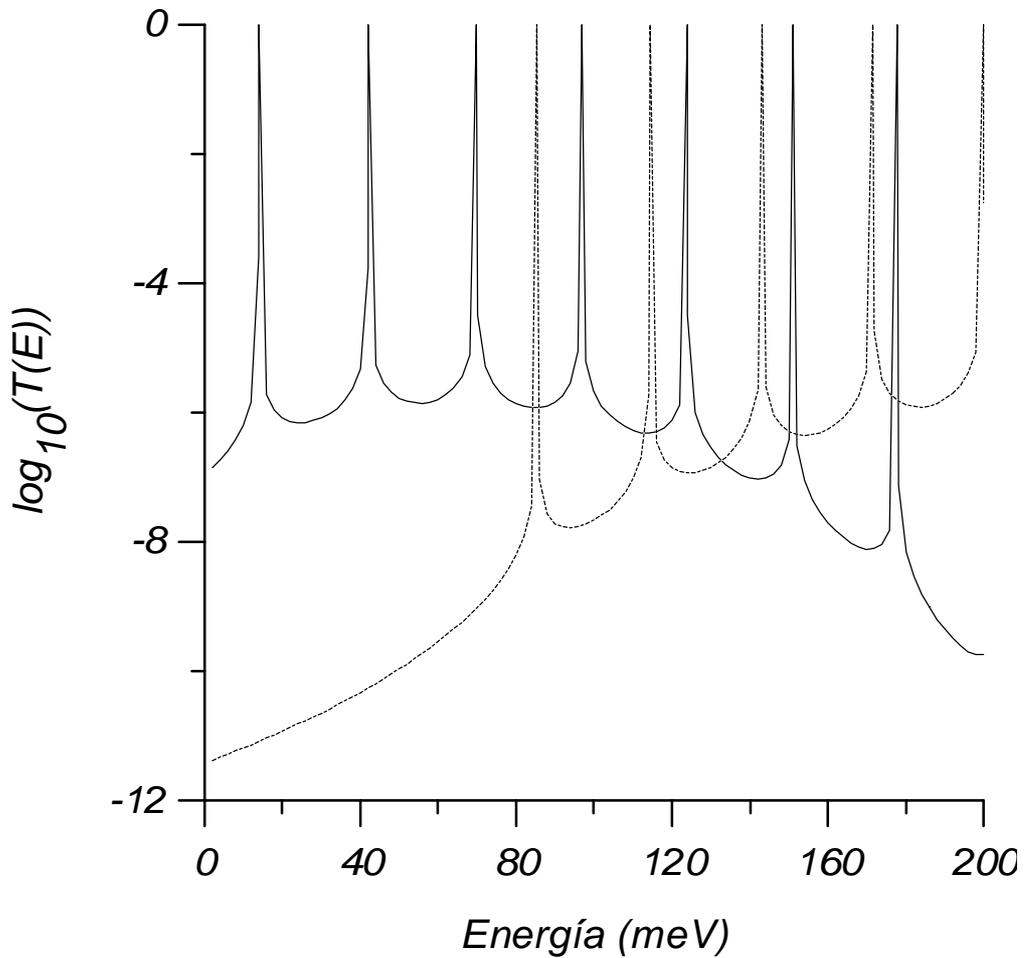


figura 1. 4.- Coeficiente de transmisión de un pozo parabólico.

Densidad de corriente coherente

De acuerdo al modelo que se ha descrito se procederá a calcular la densidad de corriente coherente de las muestras que se han citado. En ellas se utilizará electrodos de 600\AA . El tamaño de éstos va a influir en los resultados que se obtengan. De hecho, la pendiente de subida de los picos de corriente, que podrá observarse en las gráficas siguientes, es variable

de acuerdo al tamaño elegido del electrodo (es, en realidad , una cuestión de referencias y depende del punto que se tome como $z=0$. No obstante, una hipotética medida se realizaría de extremo a extremo).

Asimismo, en relación con lo ya mencionado respecto al nivel de *Fermi*, puede observarse que, debido a la separación de niveles, en especial del pozo parabólico, que es de unos 27meV independientemente del campo, según sea su valor se tendrán distintos valores de la relación pico-valle para la densidad de corriente. En este momento conviene aclarar que el interés de estos sistemas radica en obtener máximos de estas relaciones. Es por ello que E_F se seleccionará inferior a la separación de niveles consecutivos (para otros tipos de pozos distintos del parabólico ésto no tiene sentido). Ésto se conseguirá ajustando la concentración de impurezas en el electrodo, tal y como ya se ha mencionado. Además, para evitar el enmascaramiento de la función de distribución de *Fermi* se trabajará a bajas temperaturas (figura 1.2).

Las siguientes gráficas visualizan los comentarios que acaban de realizarse :

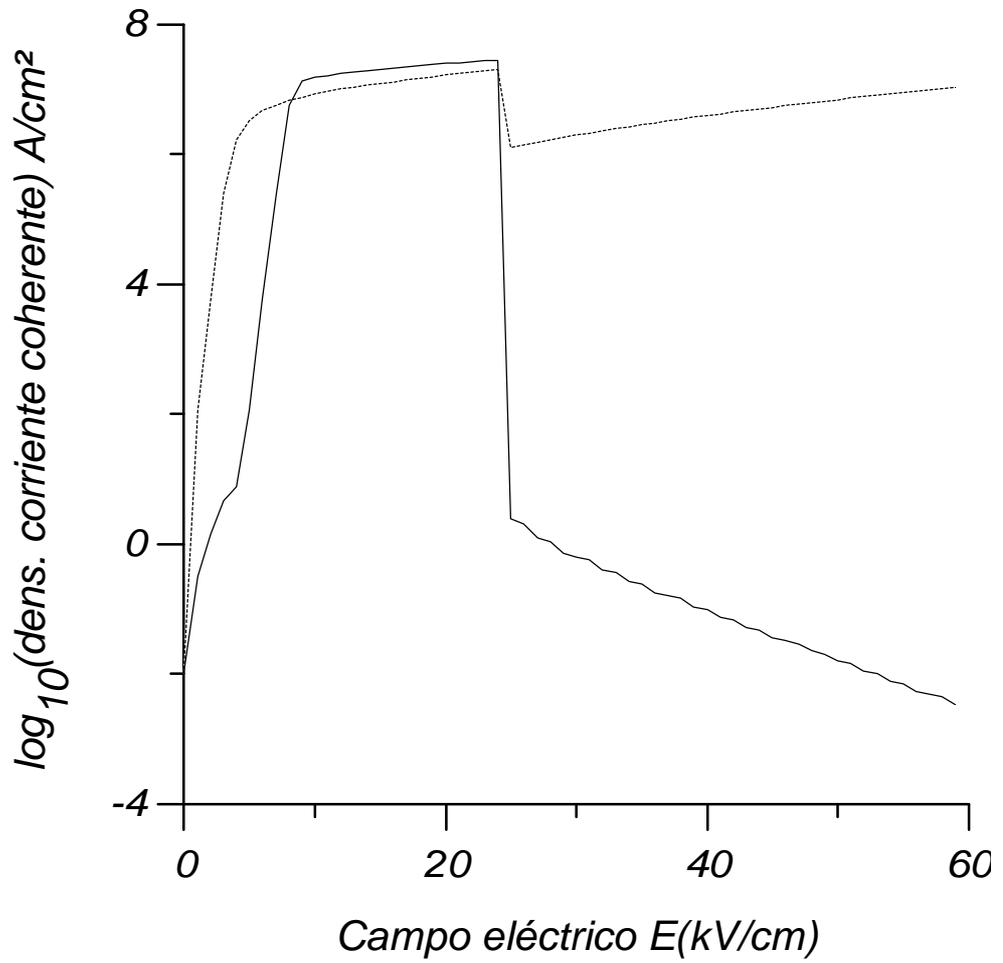


figura 1. 5.-Caso de pozo rectangular simple con $E_F = 20\text{meV}$ y $T = 4\text{K}$ (línea continua) o $T = 300\text{K}$ (línea discontinua) con $B = 0\text{T}$.

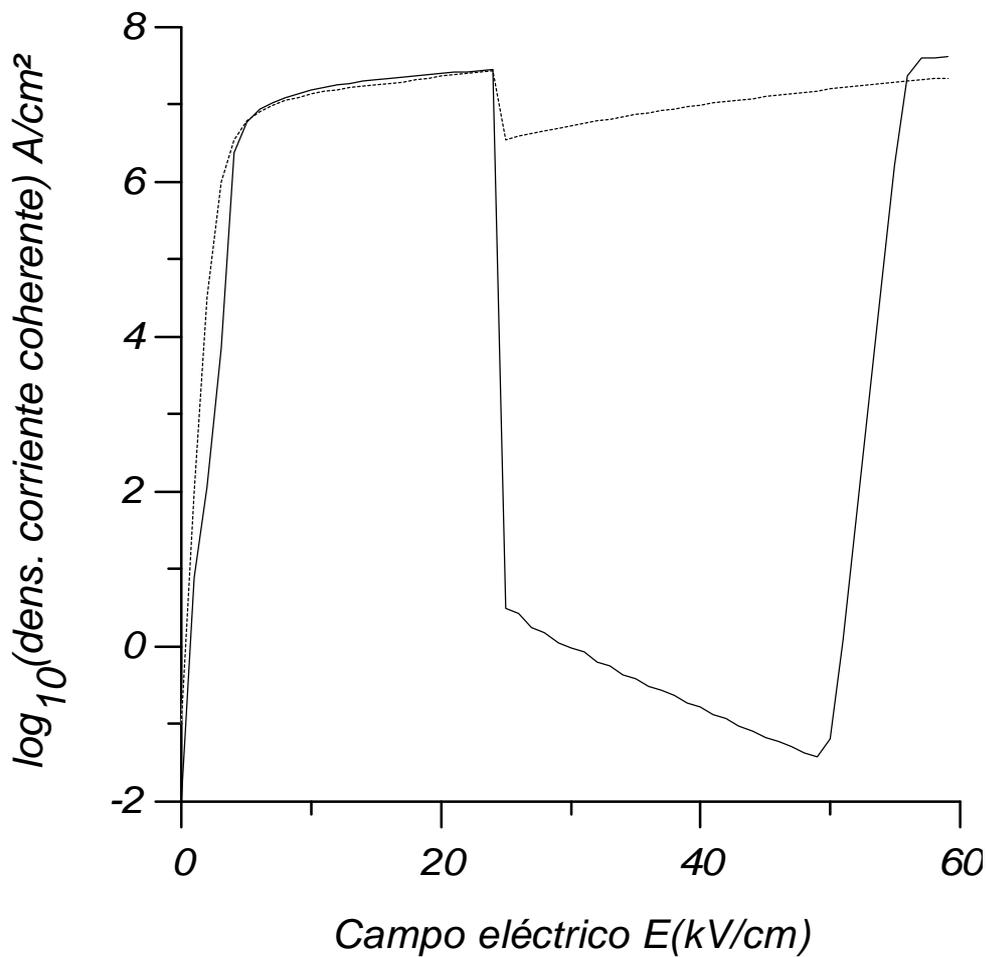


figura 1. 6.- Caso de pozo rectangular simple con $E_F = 50\text{meV}$ y $T = 4\text{K}$ (línea continua) o $T = 300\text{K}$ (línea discontinua) con $B = 0\text{T}$.

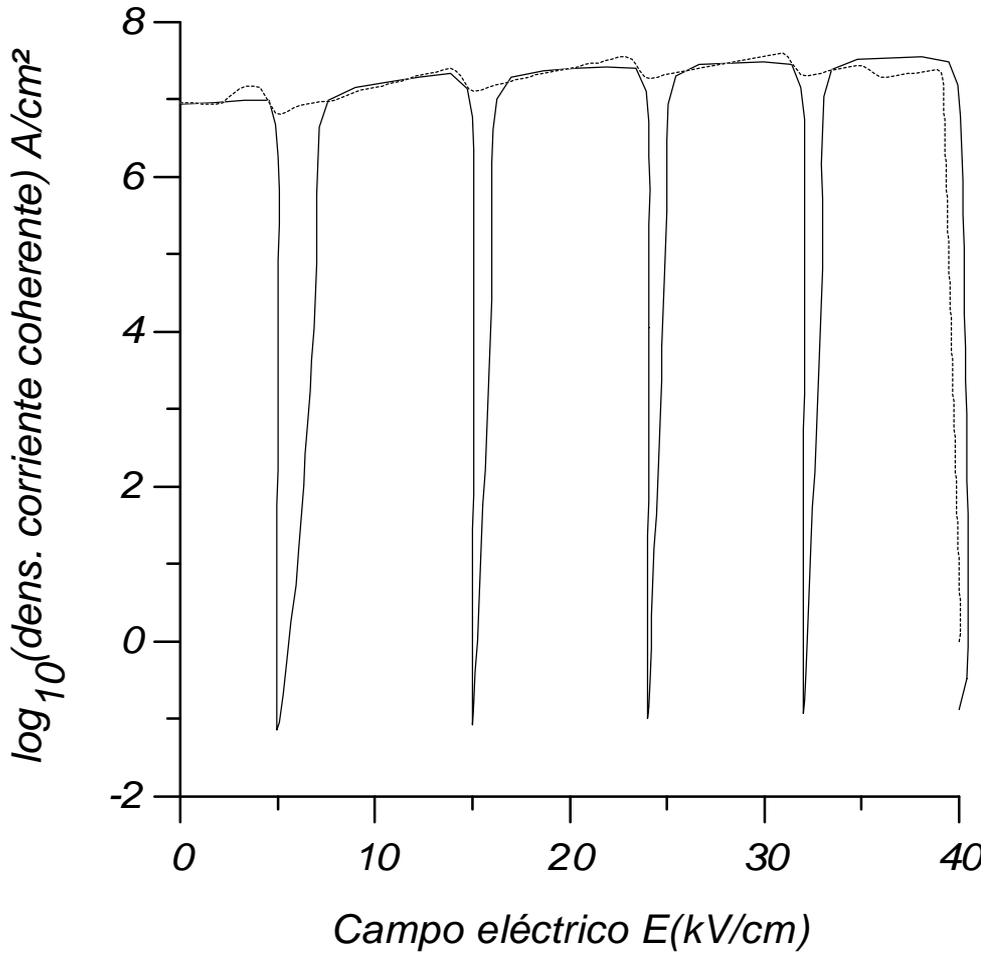


figura 1. 7.- Caso de pozo parabólico con $E_F = 20\text{meV}$ y $T = 4\text{K}$ (línea continua) o $T = 300\text{K}$ (línea discontinua) con $B = 0\text{T}$. Se han eliminado los 3 últimos valores (muy pequeños) por claridad.

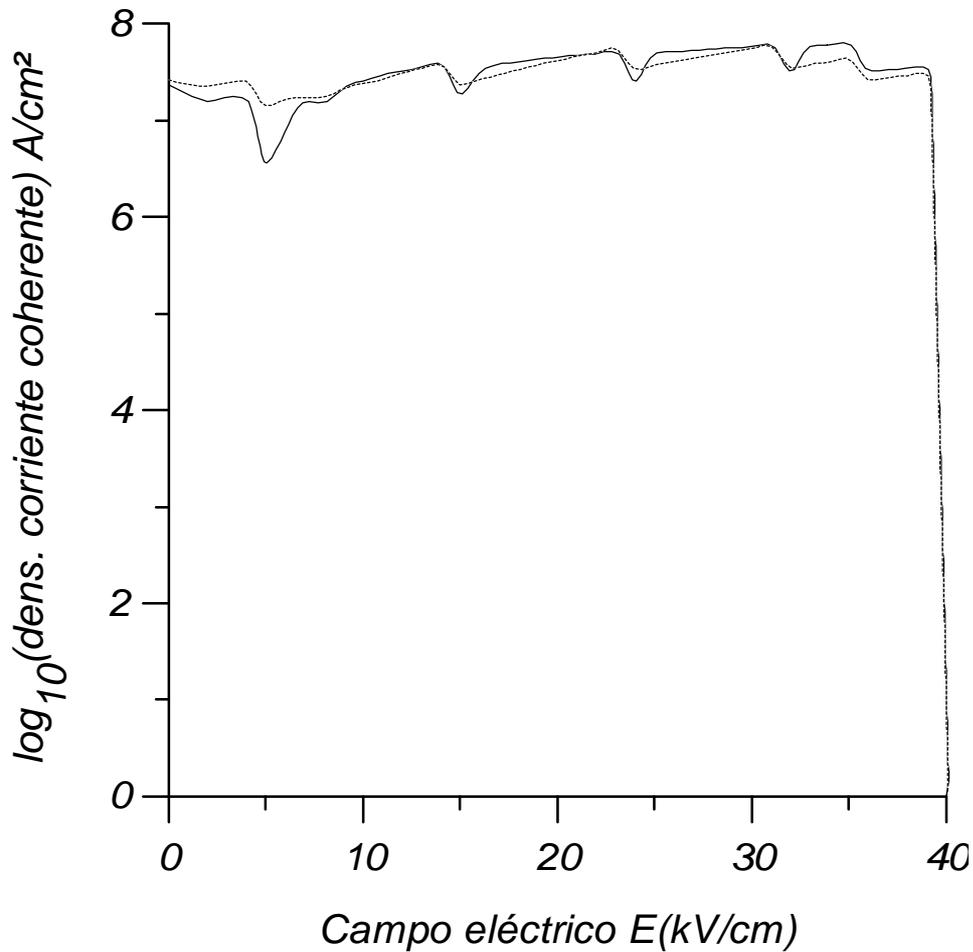


figura 1.8.- Caso de pozo parabólico con $E_F = 50\text{meV}$ y $T = 4\text{K}$ (línea continua) y $T = 300\text{K}$ (línea discontinua) con $B = 0\text{T}$. Se han eliminado los 3 últimos valores (muy pequeños) por claridad.

Tanto en la figura 1.5 como en la figura 1.6, correspondientes al caso de un pozo simple de 100\AA flanqueado por barreras de 25\AA , se han dibujado los picos de corriente correspondientes al nivel del estado fundamental. Existe otro segundo nivel con pico de corriente coincidente con valores superiores del campo eléctrico y que no ha sido representado

por claridad. Respecto a las figuras 1.7 y 1.8, ambas presentan un pico de corriente para campo eléctrico nulo pues el nivel correspondiente al estado fundamental cae por debajo del nivel de *Fermi*.

Procesos perturbativos

Las medidas realizadas con pozos cuánticos simples o dobles han reflejado una relación pico-valle, correspondiente a la densidad de corriente, que no se corresponde con la información suministrada por los distintos estudios realizados únicamente en torno a procesos de transmisión directa o coherente. Ésto ha obligado a realizar un nuevo planteamiento de los procesos de tuneo implicados, incorporando para ello fenómenos dispersivos como los que ya se citaron en la introducción. Dos son los procesos considerados de más influencia en los materiales semiconductores de este estudio: por una parte la interacción electrón - fonón óptico longitudinal (en adelante *LO*) y por otra, la interface rugosa (en adelante *IR*). Sus contribuciones a la densidad de corriente total, tanto de un pozo rectangular simple como de uno parabólico, van a ser sometidas ahora a examen. Para ello, se partirá de una hipótesis simplificadora: las alteraciones que estas anomalías producen en el hamiltoniano del sistema son suficientemente pequeñas como para poder ser tratadas por métodos perturbativos. De este modo, el analisis se realizará a través de hamiltonianos independientes del descrito para un proceso de tuneo directo. Ello permitirá utilizar de partida las mismas funciones de onda que las empleadas en el caso coherente (o sea, funciones de onda planas).

Para obtener la corriente asociada a estos procesos, se necesita calcular el coeficiente de transmisión asociado. Para ello, se utilizará la “regla de oro” de *Fermi* que, en la aproximación de *Born*, puede escribirse^[21]

$$S(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_j N_j^\pm \left| \langle \vec{k}' | H_j | \vec{k} \rangle \right|^2 [1 - f(E_{\vec{k}'})] \times \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \pm \hbar\omega_j) \quad (1.23)$$

donde \vec{k} corresponde al estado inicial y \vec{k}' al estado final. N_j^\pm son los factores de *Bose* para procesos dispersivos inelásticos, H_j es el hamiltoniano perturbativo asociado al proceso dispersivo j , f es la función de distribución de *Fermi* y \mathbf{d} representa la condición umbral para que la transición tenga lugar.

En esta expresión se ha realizado la suma sobre todo el conjunto de procesos perturbativos. Además, puede comprobarse que, para que exista una probabilidad significativa de transición, es necesario que haya solapamiento entre los estados inicial y final. Para garantizar esta condición se exigirá que uno de los estados implicados sea un estado resonante. En concreto, que el estado final sea un estado resonante del pozo. A esta suposición, se añadirá la seguridad de la continuidad entre estados del pozo y del electrodo derecho o colector que se avalará con la estadística de *Fermi*. Por supuesto, los estados del colector han de estar vacíos.

De este modo se estudiarán las transiciones entre todos aquellos estados no resonantes del emisor, o lo que es lo mismo, sin continuidad

con un estado resonante de pozo y que transitan a un estado resonante de pozo no accesible directamente desde el emisor.

Así, pues, se obtendrá la probabilidad W de que un electrón del emisor sin continuidad con colector llegue al mismo por medios dispersivos

$$W(\vec{k}_e) = \frac{Lm^*}{\hbar k_z} \sum_{\vec{k}'=\vec{k}_w} S(\vec{k}_e - \vec{k}') \quad (1.24)$$

siendo L la magnitud de la estructura a lo largo del eje z .

Las definiciones son totalmente análogas a las del caso de tuneleo coherente. Es importante comprender las dos situaciones que se van a estudiar, pues es determinante para asimilar las conclusiones. Lo que se ha impuesto es simplemente un filtro para estudiar la densidad de corriente en los denominados valles o, lo que es lo mismo, fuera de las zonas donde se pueden producir transiciones coherentes que se corresponderían con los picos de corriente. No se entrará a estudiar la reducción de valor de tales picos por pérdida de coherencia como ya han apuntado algunos autores^[22,23].

Interface rugosa

Ya se ha hecho referencia anteriormente a la dificultad de crecer cristales con la suficiente perfección como para poder soslayar los efectos asociados a las anomalías producidas en la frontera de separación entre el

cristal de $GaAs$ y el de $Al_xGa_{1-x}As$. A pesar de poseer constantes de red prácticamente iguales, es imposible, por el momento, realizar un control suficientemente fino del instrumental para obtener una superficie perfecta. Para tratar de cuantificar las consecuencias que ésto acarrea, se utilizará el modelo creado por *Leo y Mcdonald*^[24] para la interface rugosa.

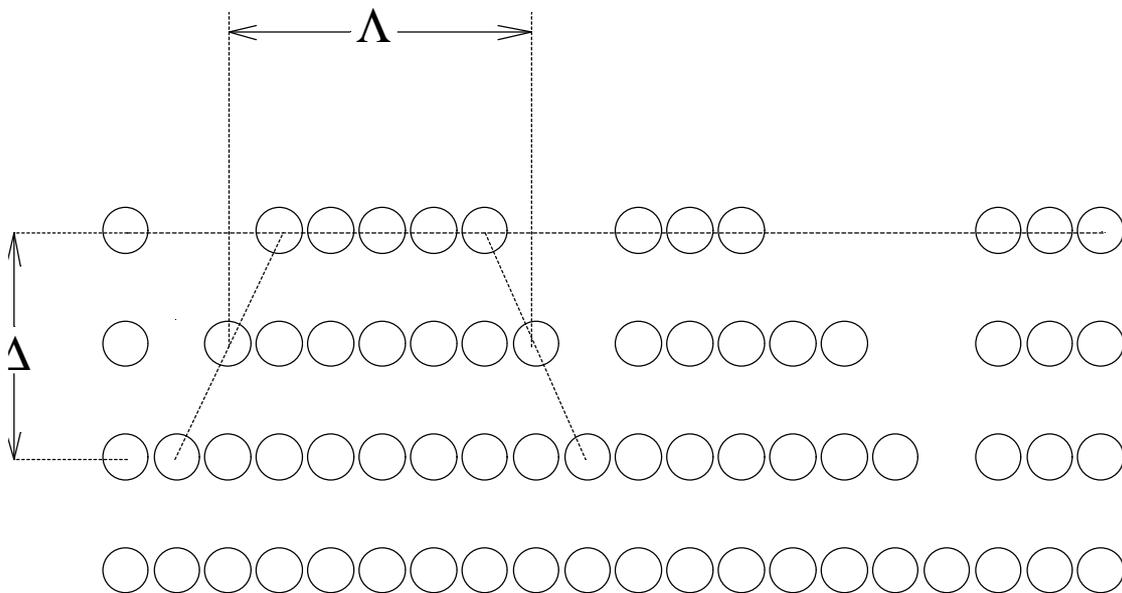


figura 1.9.- Modelo de Leo y Mcdonald para la interface rugosa en una red cristalina.

En el mismo, los autores consideran las superficies como una serie de terrazas con valores determinados, que son promedios estadísticos, de amplitud L y profundidad D . Mediante el ajuste de estos dos parámetros podrá justificarse con mayor o menor éxito los datos medidos.

Puede partirse de unos valores que minimicen las perturbaciones y luego justificar las consecuencias derivadas de valores mayores. Así,

pues, una profundidad de terraza que afecte sólo a la capa atómica más superficial, se traduce en un valor de 3\AA de altura, siendo la amplitud de 6.5 nm , que es la considerada como valor experimental.

Para el cálculo del coeficiente de transmisión se particularizarán las expresiones que acaban de citarse. De este modo, aplicando la ecuación 1.23

$$S(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') = \frac{2\mathbf{p}}{\hbar} \left| \langle \vec{k}' | H_{IR} | \vec{k} \rangle \right|^2 \left[1 - n_F(\vec{k}') \right] \times \mathbf{d}(E_{\vec{k}'}, -E_{\vec{k}}) \quad (1.25)$$

para el caso de la interface rugosa, siendo H_{IR} el hamiltoniano perturbativo asociado, que puede expresarse como un potencial de la forma

$$V^{IR}(\vec{r}) = V_b \Delta \mathbf{d}(z - z_i) F(\vec{R}) \quad (1.26)$$

donde V_b el valor del potencial de la barrera en estudio, $\mathbf{d}(z - z_i)$ es la función *delta* de *Dirac* que centra el potencial en la interface i , y F que es una función de correlación para las fluctuaciones,

$$\langle F(\vec{R}) | F(\vec{R}') \rangle = e^{-\frac{|\vec{R} - \vec{R}'|^2}{\Lambda^2}} \quad (1.27)$$

donde \vec{R} y \vec{R}' son vectores en la dirección paralela a las interfaces.

Como puede observarse, en la expresión para S se han omitido los factores de *Bose* N_j^\pm pues el proceso perturbativo que se está describiendo es de tipo elástico.

A partir de estas expresiones se deducirá la probabilidad de transición como

$$W^{IR}(\mathbf{e}_z, \mathbf{e}_{xy}) = \frac{2\mathbf{p}m^* \Delta^2 V_b^2}{\hbar^2} D(\mathbf{e}_{xy,w}) \frac{F^{IR}(\mathbf{e}_z)}{k_z} G_\Lambda^{IR}(\mathbf{e}_z, \mathbf{e}_{xy}) \quad (1.28)$$

donde $D(\mathbf{e}_{xy,w})$ representa la densidad de estados^[19] de los niveles de pozo o estados finales, $F^{IR}(\mathbf{e}_z)$ es un factor de forma que garantiza el solapamiento de los estados inicial y final, y que puede expresarse como

$$F^{IR}(\mathbf{e}_z) = |\mathbf{x}_{k_z}(z_i)|^2 |\mathbf{x}_w(z_i)|^2 \quad (1.29)$$

en la que z_i representa a la posición de la interface en estudio y ξ son las componentes z de las funciones de onda. Finalmente, G_L^{IR} recoge las fluctuaciones producidas en el plano xy del espacio de las fases, como consecuencia de las irregularidades de la superficie,

$$G_\Lambda^{IR}(\mathbf{e}_z, \mathbf{e}_{xy}) = \mathbf{p}\Lambda^2 e^{-\frac{(k_{xy}^2 + k_{xy,w}^2)\Lambda^2}{4}} I_0\left(\frac{k_{xy}k_{xy,w}\Lambda^2}{2}\right) \quad (1.30)$$

siendo $I_0(x)$ la función de *Bessel* de primera especie de orden cero que, en primera aproximación, puede escribirse como $I_0(x) = 1 + x^2/2^2$.

Partiendo de un estado inicial, W^R deberá ser calculada para cada uno de los posibles estados finales así como para cada una de las interfaces z_i de la heteroestructura que se esté estudiando.

Fonones LO

Todas aquellas oscilaciones que los átomos presentan en la red cristalina conforman una nube de fonones con un comportamiento peculiar dependiente, en gran medida, de la temperatura. De todas ellas este estudio se centrará en las *LO* por ser las que poseen más relevancia en los procesos perturbativos asociados a semiconductores, tal y como refleja la literatura científica^[5]. Para un análisis más profundo se utilizará un modelo basado en las fuerzas de interacción de *Frölich*.

Con este modelo, puede definirse el hamiltoniano de interacción electrón-fonón

$$H_{e-f} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_q \mathbf{a}_q \left[e^{i(\vec{q}\vec{r} - \mathbf{w}_q t)} \right] \quad (1.31)$$

siendo W el volumen de la muestra, $\vec{q} = \vec{q}(q_x, q_y, q_z)$ el vector de onda asociado al fonón cuyo momento será $\hbar\vec{q}$, y \mathbf{a}_q que se corresponde con la expresión

$$\mathbf{a}_q = \frac{\mathbf{a}_{LO}}{q}, \mathbf{a}_{LO} = \sqrt{\frac{e^2 \hbar \mathbf{w}_{LO}}{2e_p}}, \mathbf{e}_p^{-1} = \mathbf{e}_\infty^{-1} - \mathbf{e}_s^{-1} \quad (1.32)$$

siendo ϵ_s y ϵ_{\neq} las permitividades estática y dinámica respectivamente. Se ha supuesto que la interacción está deslocalizada en toda la estructura.

Análogamente al caso de la interface rugosa, las expresiones particularizadas para el cálculo del coeficiente de transmisión son

$$S(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} N_{LO}^{\pm} \left| \langle \vec{k}' | H_{ILO} | \vec{k} \rangle \right|^2 [1 - f(\vec{k}')] \times \delta(E_{\vec{k}'} - E_{\vec{k}} \pm \hbar\omega_{LO}) \quad (1.33)$$

donde $\hbar\omega_{LO}$ representa la energía asociada al fonón y

$$N_{LO}^{-} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{LO}}{KT}} - 1}, \quad N_{LO}^{+} = N_{LO}^{-} + 1 \quad (1.34)$$

son los factores de *Bose* para absorción y emisión de fonones respectivamente.

La probabilidad de transición asociada puede ser evaluada como

$$W_{LO}^{\pm}(\epsilon_z, \epsilon_{xy}) = \frac{e^2 \omega_{LO} m^*}{2\hbar \epsilon_p} N_{LO}^{\pm} \frac{1}{k_z} D(\epsilon_{xy,w}) \int_0^{\pi} \frac{F^{LO}(\epsilon_z, Q_{\theta})}{Q_{\theta}} d\theta \quad (1.35)$$

donde $Q_{\mathbf{q}} = \sqrt{k_{xy}^2 + k_{xy,w}^2 - 2k_{xy}k_{xy,w} \cos \mathbf{q}}$ y F^{LO} , en analogía con F^{IR} , es el factor de forma o factor de solapamiento entre los estados inicial y final calculado como

$$F^{LO}(\epsilon_z, Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \xi_{k_z'}^*(z) \xi_w(z) e^{-Q(z-z')} \xi_{k_z}(z') \xi_w^*(z') \quad (1.36)$$

Al igual que en el caso de la interface rugosa, para cada valor de energía ϵ asociada al estado inicial se calculará W^{LO} para todos los posibles valores de estados resonantes finales dentro del pozo, con el fin de sumar todas sus contribuciones al valor de la densidad de corriente.

Resultados

Tras el análisis realizado se procede, a continuación, a comentar los resultados obtenidos.

Aunque el estudio central se ha realizado sobre un pozo parabólico, se ha añadido a éste el efectuado sobre un pozo rectangular simple. Ésto es adecuado para hacer una comparación de ambas estructuras con el fin de contrastar los datos obtenidos en este estudio con los que se pueden encontrar en la literatura científica y que, generalmente, se basan mayoritariamente en estudios sobre pozos cuánticos rectangulares simples o dobles.

Estructuras analizadas.- En concreto se ha sometido a análisis una superred con un perfil de potencial equivalente al de un pozo parabólico de 550Å de $AsGa$ situado entre barreras estrechas de $AsGa_{0.7}Al_{0.3}$ y flanqueado por electrodos de $AsGa$ de 600Å . Asimismo, se ha aplicado los mismos cálculos para el caso de un pozo simple de $AsGa$ de 100Å rodeado de barreras de $AsGa_{0.7}Al_{0.3}$ de 25Å igualmente flanqueado por

electrodos de $AsGa$ de 600\AA . En ambos casos, se han considerado dopajes de electrodos de 10^{18} cm^{-3} lo que, como ya se ha citado, fija el nivel de *Fermi*.

Densidad de corriente coherente.- Se ha calculado en ambas estructuras tal corriente para los campos magnéticos $B = 0, 1$ y 3 Tesla . En las siguientes gráficas (figuras 1.10 y 1.11) se observa la forma típica de los picos y valles de la densidad de corriente coherente

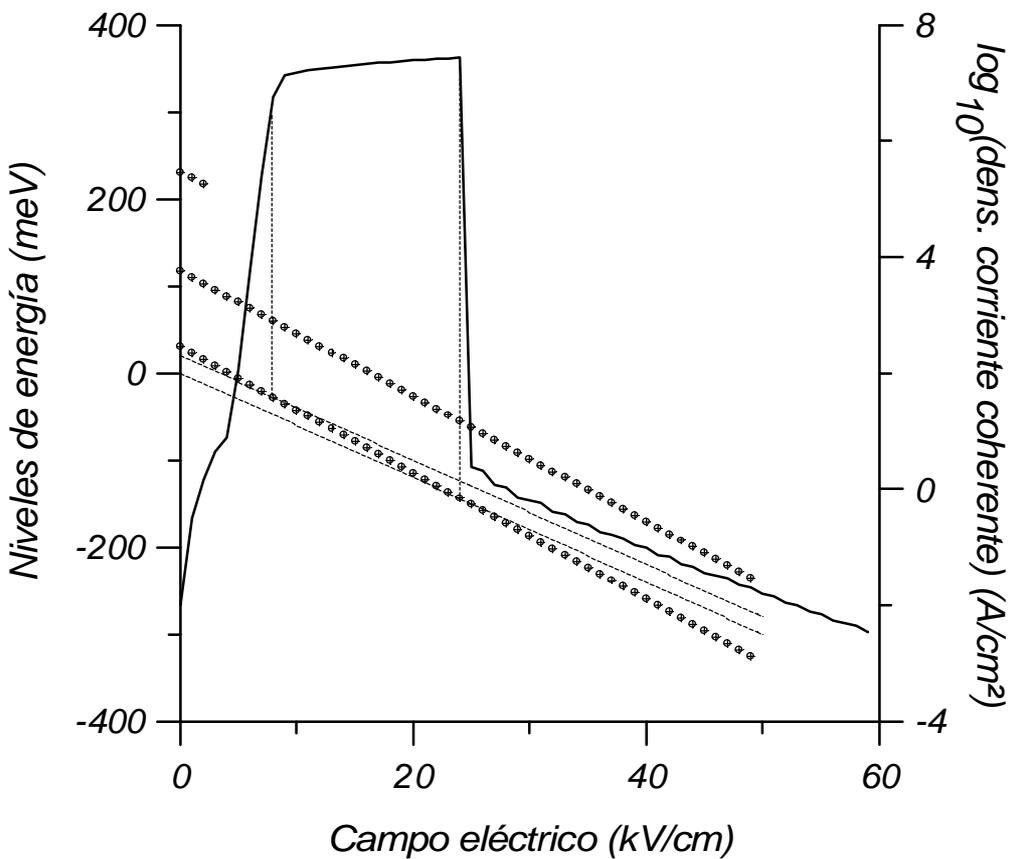


figura 1.10.- Densidad de corriente coherente en un pozo rectangular.

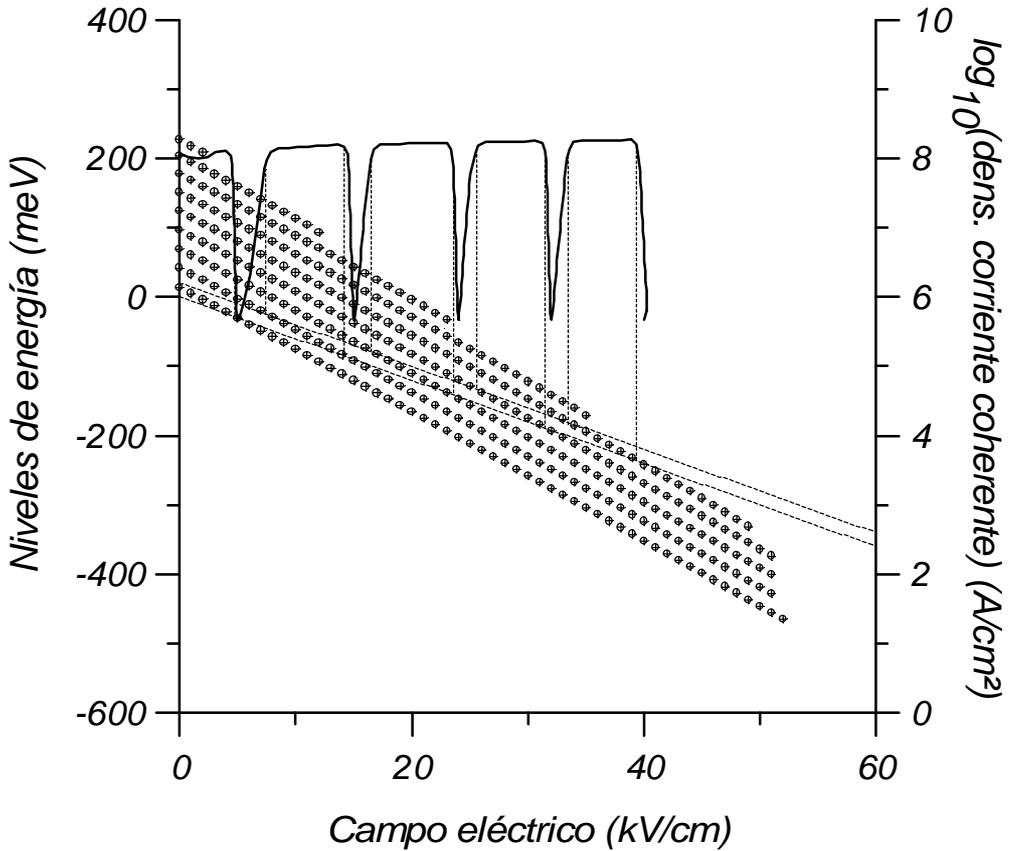


figura 1.11.- Densidad de corriente coherente en un pozo parabólico.

En ambas figuras, se ha representado una superposición de los niveles de energía asociados a cada estructura así como la franja de conducción asociada a la estadística de *Fermi* (que aparecen en las gráficas con líneas discontinuas) para $B = 0T$. Además, se han reflejado las gráficas de las densidades de corriente coherente para el citado campo magnético. Se ha señalado con líneas punteadas las correspondencias entre niveles energéticos entrantes y salientes, según sea el caso, y las consecuentes subidas o bajadas de los picos de corriente.

Continuando con la descripción de procesos coherentes, se someterán las estructuras a distintos campos magnéticos obteniendo una serie de curvas que pueden resumirse en las figuras 1.12 y 1.13.

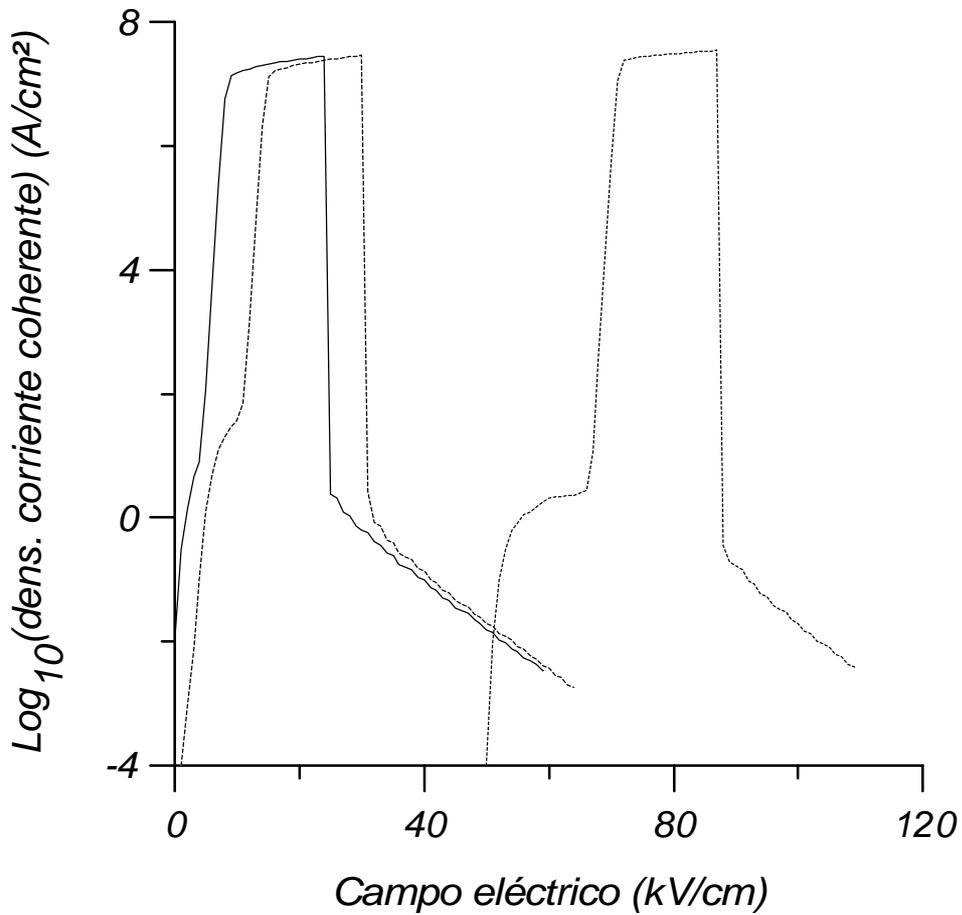


figura 1.12.- Densidad de corriente coherente en un pozo simple para campos $B=0\text{T}$ (línea continua), $B=1\text{T}$ (línea a trazos) y $B=3\text{T}$ (línea punteada).

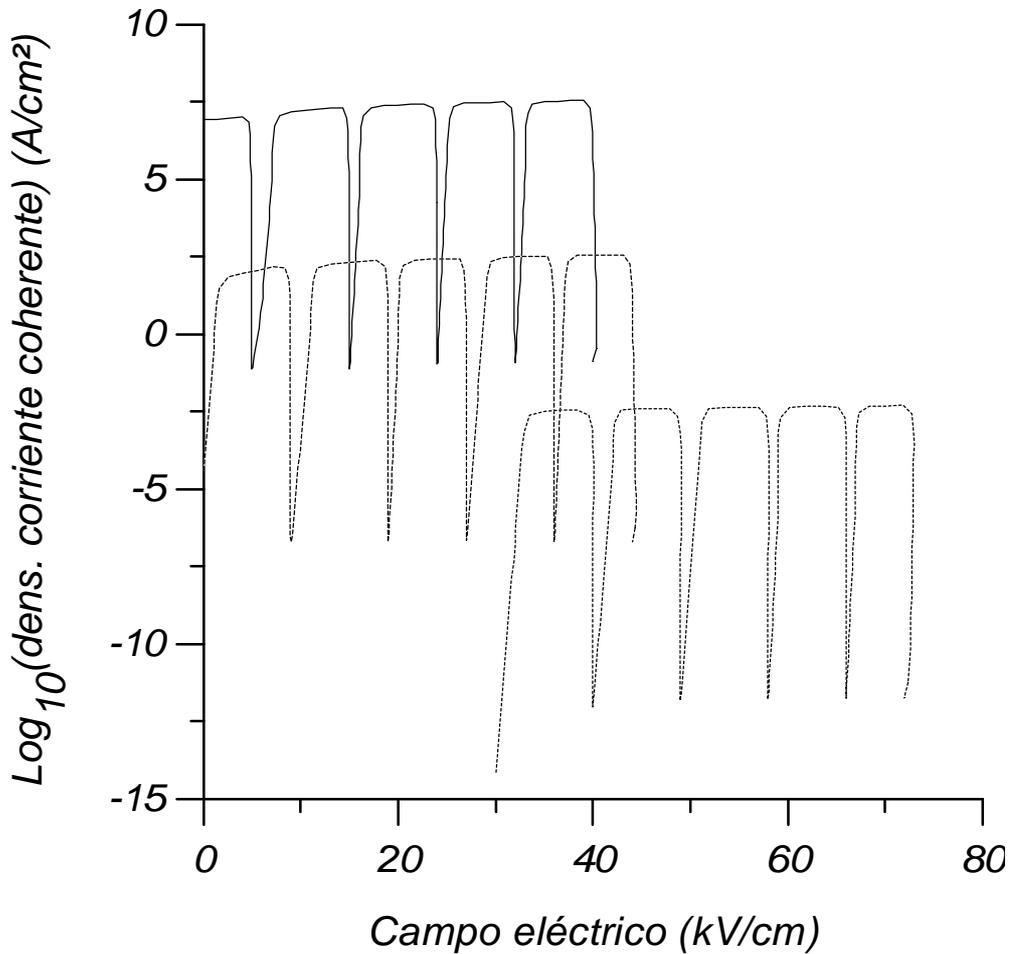


figura 1.13.- Densidad de corriente coherente en un pozo parabólico para campos $B=0T$ (línea continua), $B=1T$ (línea a trazos) y $B=3T$ (línea punteada).

En estas gráficas se han recortado las curvas por claridad. Asimismo, para el caso de la figura 1.13, se ha desplazado cinco órdenes de magnitud la curva correspondiente al campo $B = 1T$ y diez órdenes de magnitud para el campo $B = 3T$. En ambos casos, se aprecia un desplazamiento de los picos hacia campos eléctricos crecientes hecho con el que se coincide con otros autores^[25,26]. Ésto, en realidad, depende de los valores que se elijan tanto para k_{xy} como para el campo magnético,

para el cálculo de la curva correspondiente. El campo magnético, B , acentúa la dependencia de k_{xy} siendo ésta nula para $B = 0$. Las siguientes gráficas realizadas sobre el pozo simple evidencian este hecho

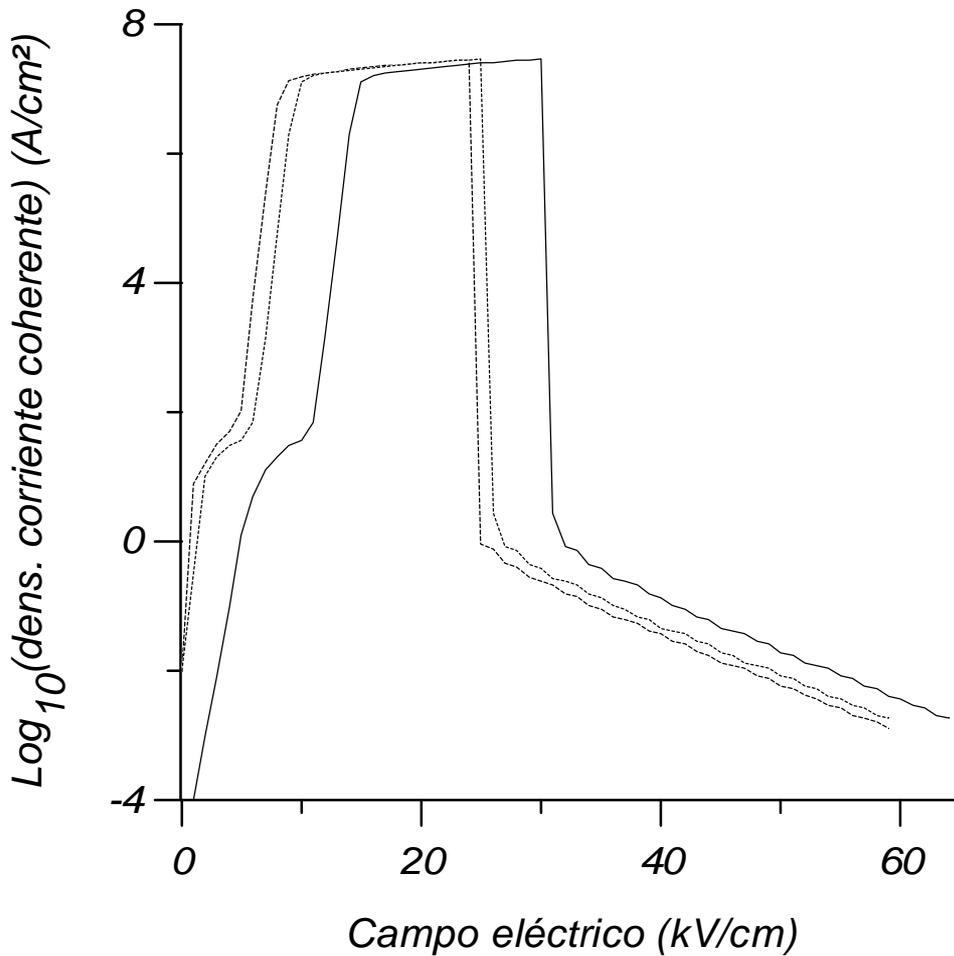


figura 1.14.- Densidad de corriente coherente en un pozo simple para $B=1T$ y distintos valores de k_{xy} .

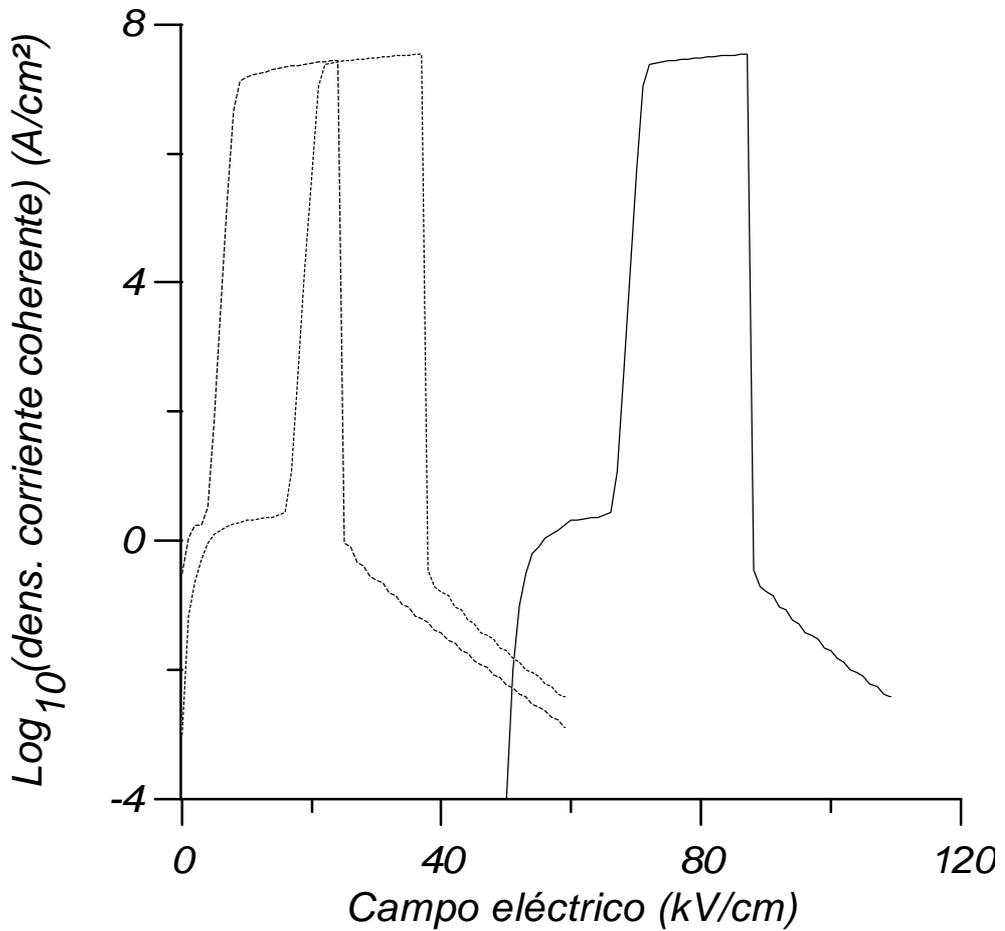


figura 1.15.- Densidad de corriente coherente en un pozo simple para $B=3T$ y distintos valores de k_{xy} .

Las curvas de la figura 1.14 han sido calculadas para $B=1T$ y las de la figura 1.15, para $B = 3T$. La curva continua se corresponde a un valor de $k_{xy1} = 1.19 \times 10^{16} \text{ m}^{-1}$ para la figura 1.14 y $k_{xy1} = 3.58 \times 10^{16} \text{ m}^{-1}$ para la figura 1.15; la curva a trazos posee $k_{xy2} = 50k_{xy1}$ y la curva punteada con $k_{xy3} = 100k_{xy1}$ para ambas figuras.

Los autores que acaban de citarse en las referencias muestran, asimismo, en sus gráficas valores de pico de corriente menores para campos magnéticos crecientes. Esta diferencia respecto a las gráficas presentadas aquí pueden ser achacables a diferencias respecto al modo de normalización de los coeficientes de transmisión que se ha empleado.

Densidad de corriente secuencial. Interface rugosa (IR).- En las siguientes gráficas puede comprobarse el efecto de la IR en la corriente total: en las mismas, las líneas continuas recogen las aportaciones de la corriente tanto coherente como dispersiva asociada a IR . Las líneas discontinuas contemplan sólo la corriente coherente.

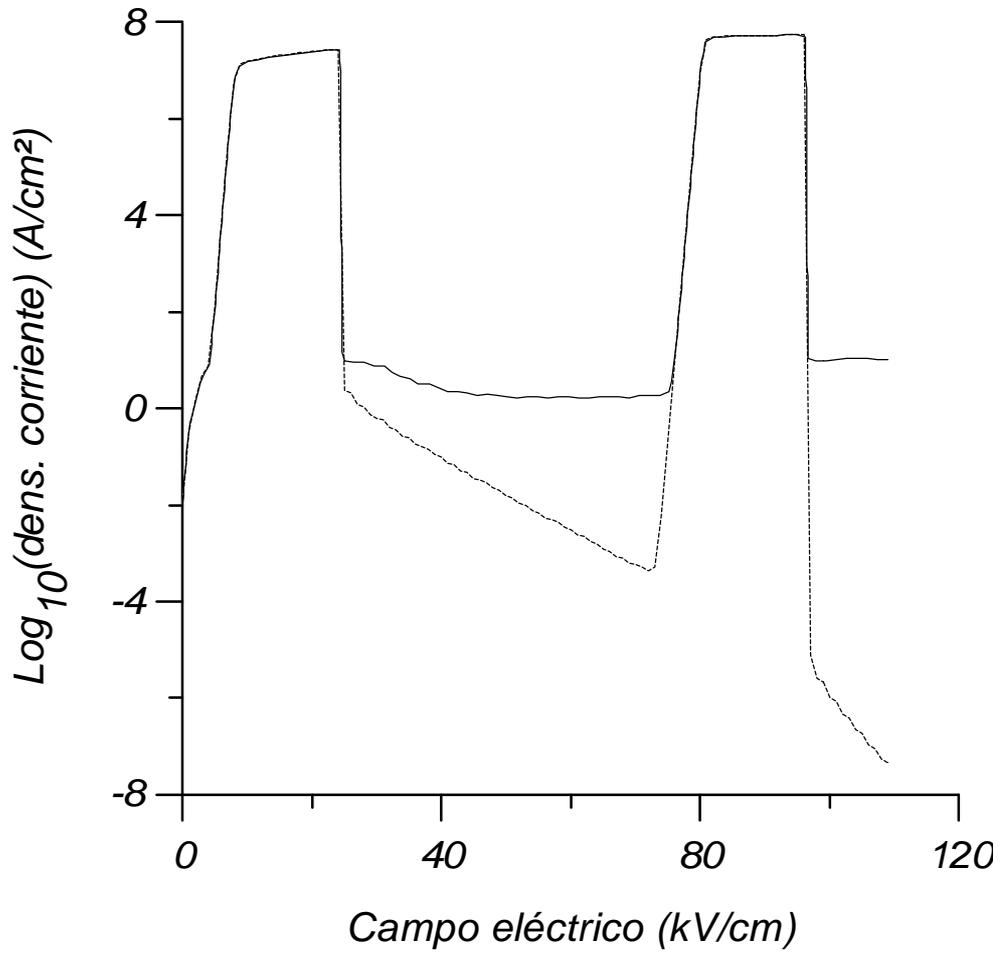


figura 1.16.- Pozo rectangular simple con $B = 0\text{T}$.

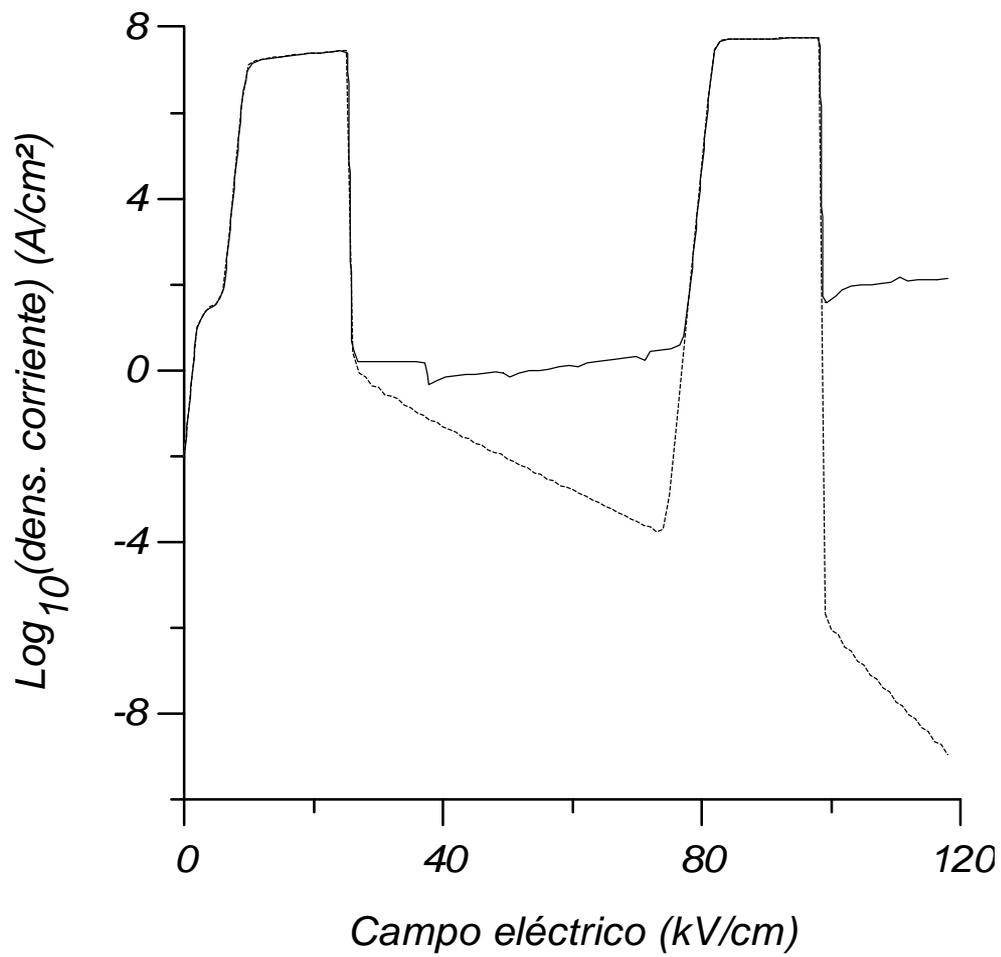


figura 1.17.- Pozo rectangular simple con $B = 1T$.

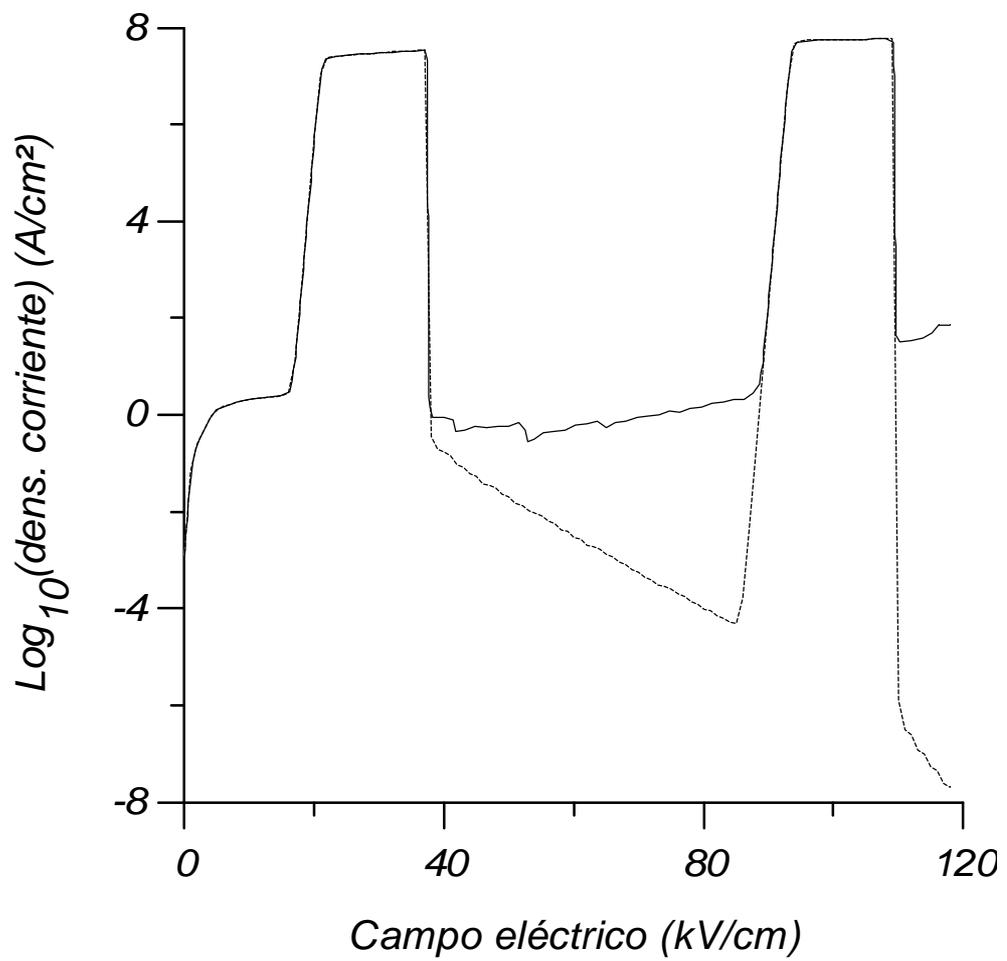


figura 1.18.- Pozo rectangular simple con $B = 3T$.

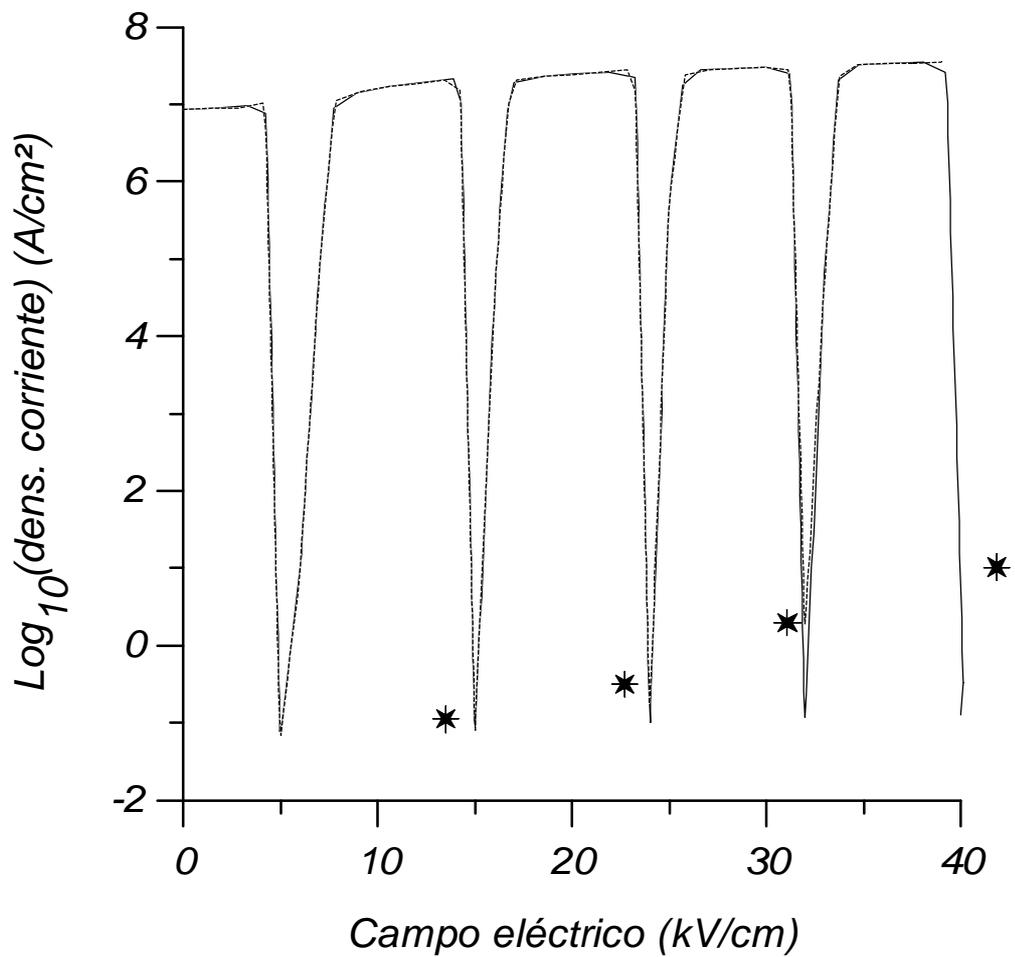


figura 1.19.- Pozo parabólico con $B = 0T$.

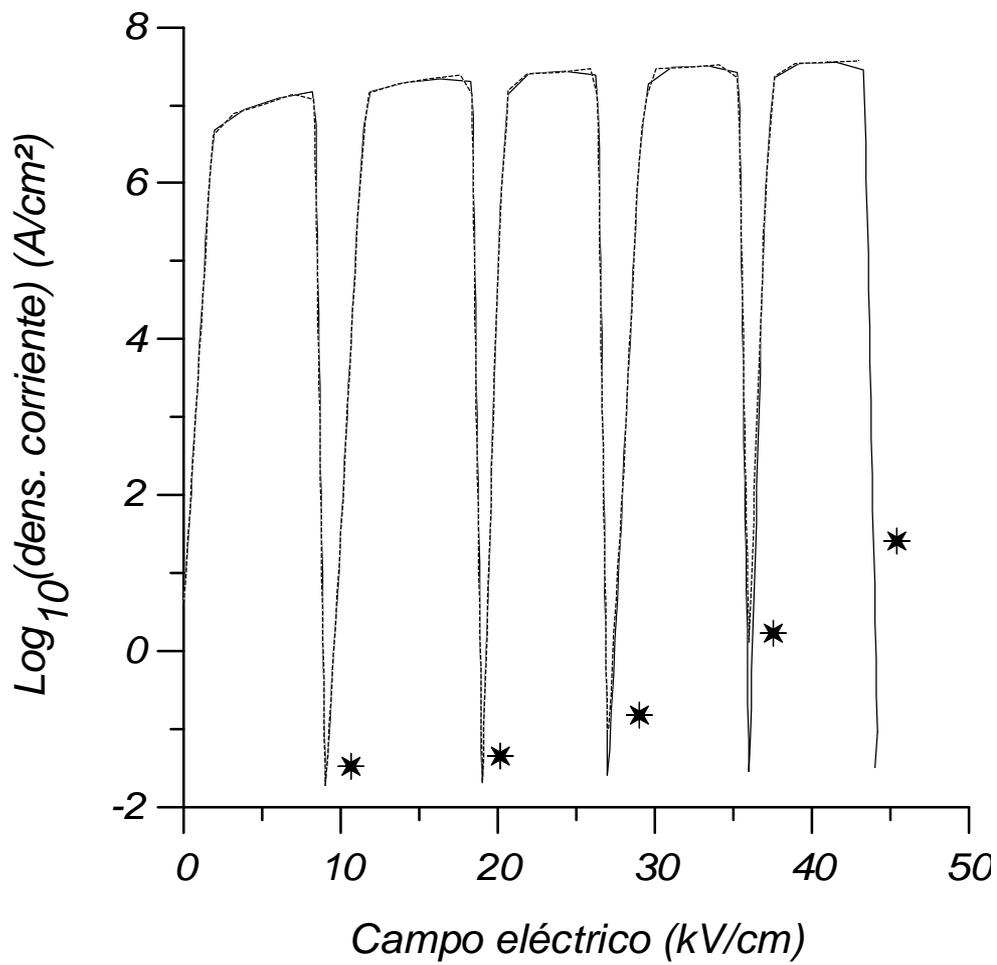


figura 1.20.- Pozo parabólico con $B = 1T$.

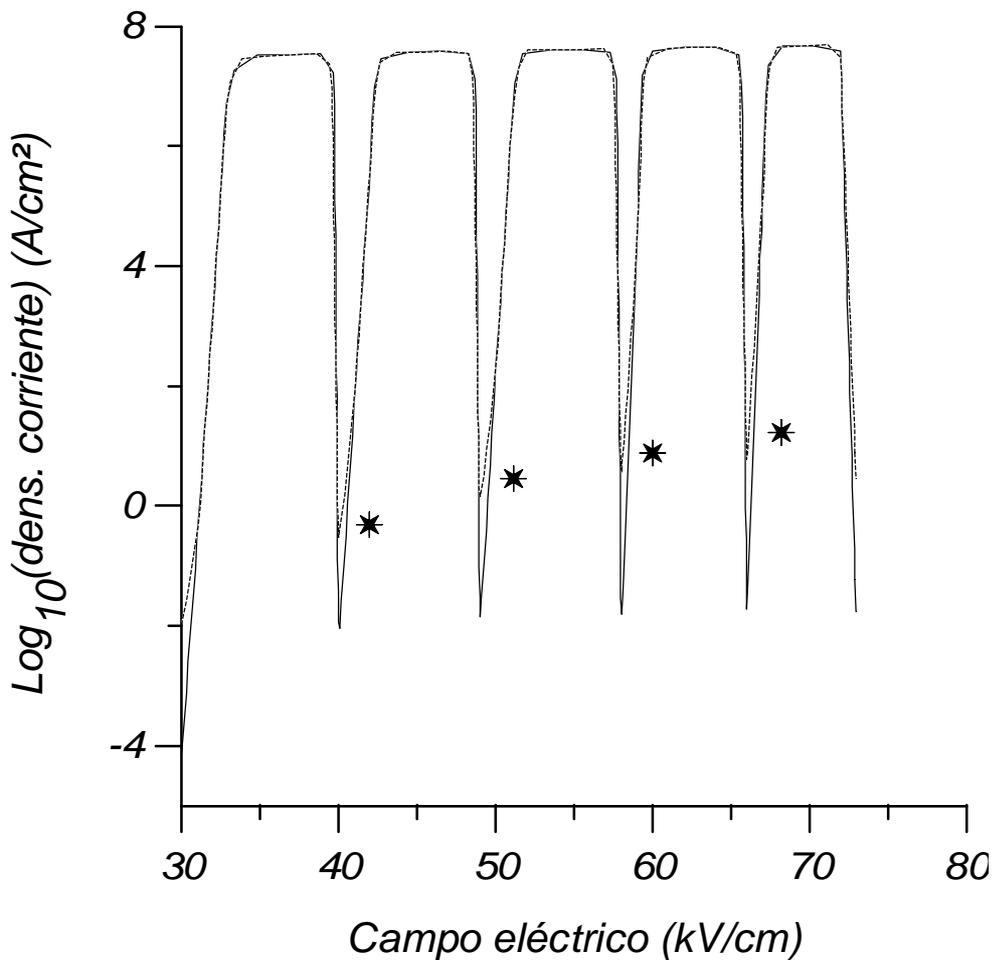


figura 1.21.- Pozo parabólico con $B = 3T$.

De las gráficas (los puntos en las curvas del pozo parabólico indican la profundidad de los *valles* incluyendo IR) puede deducirse inmediatamente el hecho de una reducción pico-valle significativa por el simple hecho de introducir fenómenos dispersivos debidos a IR . En concreto, para el caso del pozo simple pueden encontrarse las siguientes reducciones:

$\text{Log}_{10} (J_{\text{pico}}/J_{\text{valle}})$			
	<i>sin IR (línea discontinua)</i>	<i>con IR (línea continua)</i>	<i>F (kV/cm)</i>
$B = 0T$	12.87	6.78	96
$B = 1T$	13.43	6.17	98
$B = 3T$	13.66	6.26	109

Estas relaciones han sido obtenidas para el segundo pico, en el que la reducción es ligeramente superior. Este hecho se justifica por las hipótesis que se han establecido para el cálculo del tuneo producido por procesos dispersivos: el hecho de que el estado fundamental se sitúa por debajo de la franja de conducción aumenta la probabilidad en la región *valle* de transición procedente de estados no resonantes.

En esta ocasión se han dibujado los dos picos de corriente para el pozo simple. La relación pico-valle *coherente* es superior para el segundo estado. A ésto contribuyen dos hechos: para el cálculo de la corriente asociada a procesos de tuneo coherente no sólo se han tenido en cuenta los estados resonantes, pues el resto de energías posee una probabilidad no nula de tuneo coherente (figuras 1.3 y 1.4). Asimismo, sólo se han dibujado contribuciones asociadas a procesos de tuneo del emisor al colector; las transiciones al continuo no se han representado, siendo éstas mayores para valores de campo eléctrico superiores, pues la altura efectiva de la barrera de unión con el colector es inferior en estos casos. Este fenómeno es menos patente en el caso del pozo parabólico pues la separación de picos de corriente es escasa lo que imposibilita ver con claridad el decaimiento de corriente en la región valle. No obstante, en la figura 1.3 puede apreciarse que los picos de transmisión correspondientes

a estados superiores son más acusados lo debería traducirse en una relación pico-valle ligeramente superior para tales estados.

Volviendo a la tabla, la conclusión más inmediata es que la reducción en la relación pico-valle es poco significativa respecto al campo magnético, si bien se nota una reducción ligeramente mayor en presencia del mismo.

Estos datos han sido calculados considerando parámetros mínimos para el modelo de *IR* empleado: 3\AA de profundidad de terrazas (*D*) y 6.5nm para la amplitud de las mismas (*L*). Si se tiene en cuenta que la probabilidad de captura por *IR* tiene una dependencia cuadrática respecto a *D* y *L*, las reducciones pico-valle serán aún mayores.

Para el caso del pozo parabólico los coeficientes calculados son:

$Log_{10} (J_{pico}/J_{valle})$			
	<i>sin IR (línea continua)</i>	<i>con IR (línea discontinua)</i>	<i>F (kV/cm)</i>
<i>B = 0T</i>	8.44	7.24	31
<i>B = 1T</i>	9.08	7.42	36
<i>B = 3T</i>	9.44	6.91	66

En este caso, la influencia del modelo de *IR* es de menor importancia que la reflejada en el caso de un pozo simple. Volviendo al comentario que se ha realizado en párrafos anteriores, el hecho de que los picos de corriente, o lo que es lo mismo los niveles resonantes, estén muy juntos enmascara el hecho de que la contribución de los procesos

asociados a IR en las regiones valle de un pozo parabólico debería ser superior al del caso de un pozo rectangular simple. La justificación radica en el hecho de que al intervenir más estados resonantes las transiciones de estados no resonantes, a estados resonantes fuera de la conducción, en los valles sería superior de acuerdo a las hipótesis establecidas inicialmente para tales transiciones

Otros aspectos de las gráficas que se pueden citar son: el margen de valores del campo eléctrico en los que se detecta conducción es superior en el caso del pozo simple. Ésto es así, pues, a pesar de poseer el mismo tamaño de electrodos, el pozo parabólico es más ancho, lo que provoca que la barrera final junto al colector disminuya rápidamente su altura y así cese la conducción que se pueda medir en el colector. Conviene señalar aquí que en todos los estudios reflejados en esta memoria sólo se ha puesto énfasis en la conducción asociada a fenómenos de tuneleo. Ello no quita que en las medidas que se pudieran realizar en un laboratorio se podría recoger la contribución de la corriente asociada a transiciones a los estados denominados del continuo. Ésto carece de interés en los estudios que se han realizado y, por lo tanto, no se volverá a hacer mención de ello.

Densidad de corriente secuencial. Fonones LO.- Ahora se procederá a incorporar a las gráficas, que acaban de presentarse, la contribución de fenómenos dispersivos asociados a la interacción electrón-fonón LO. En concreto, las gráficas que se presentan reflejan la dispersión asociada a la emisión de un fonón LO .

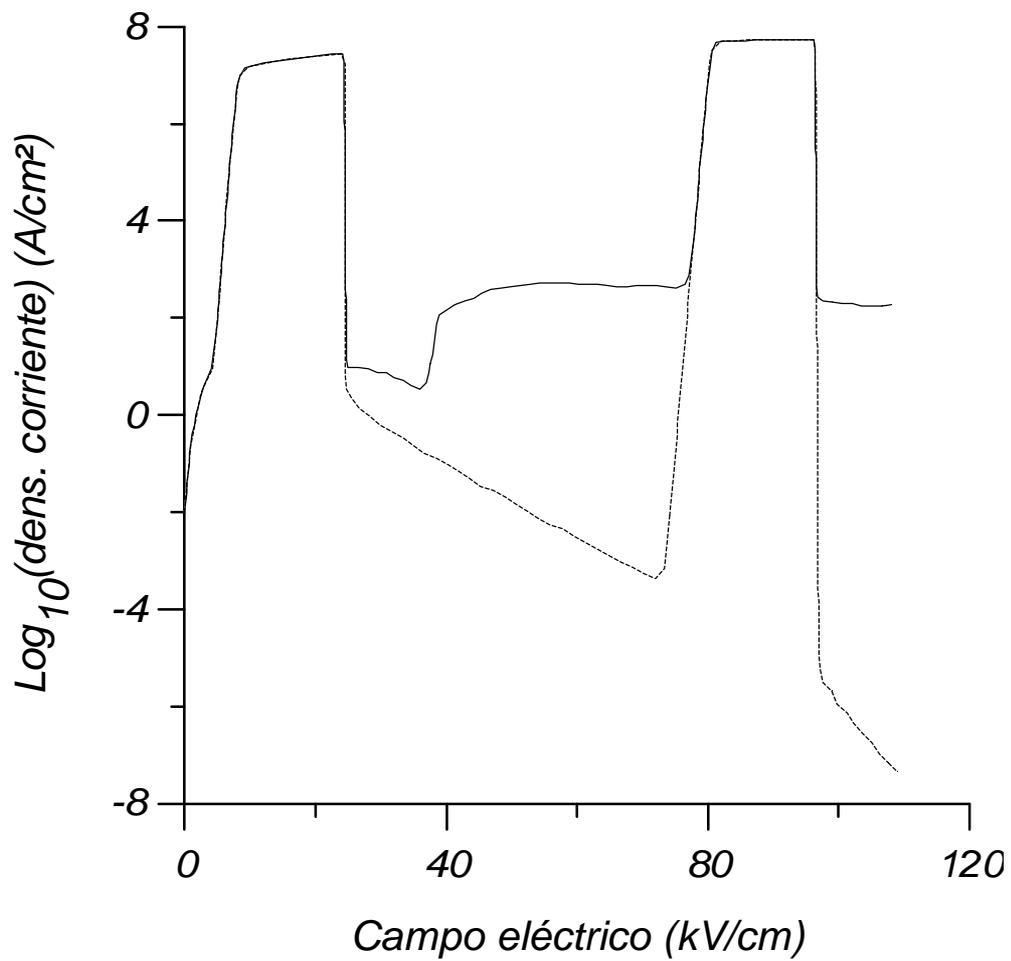


figura 1.22.- Pozo rectangular simple con $B = 0\text{T}$.

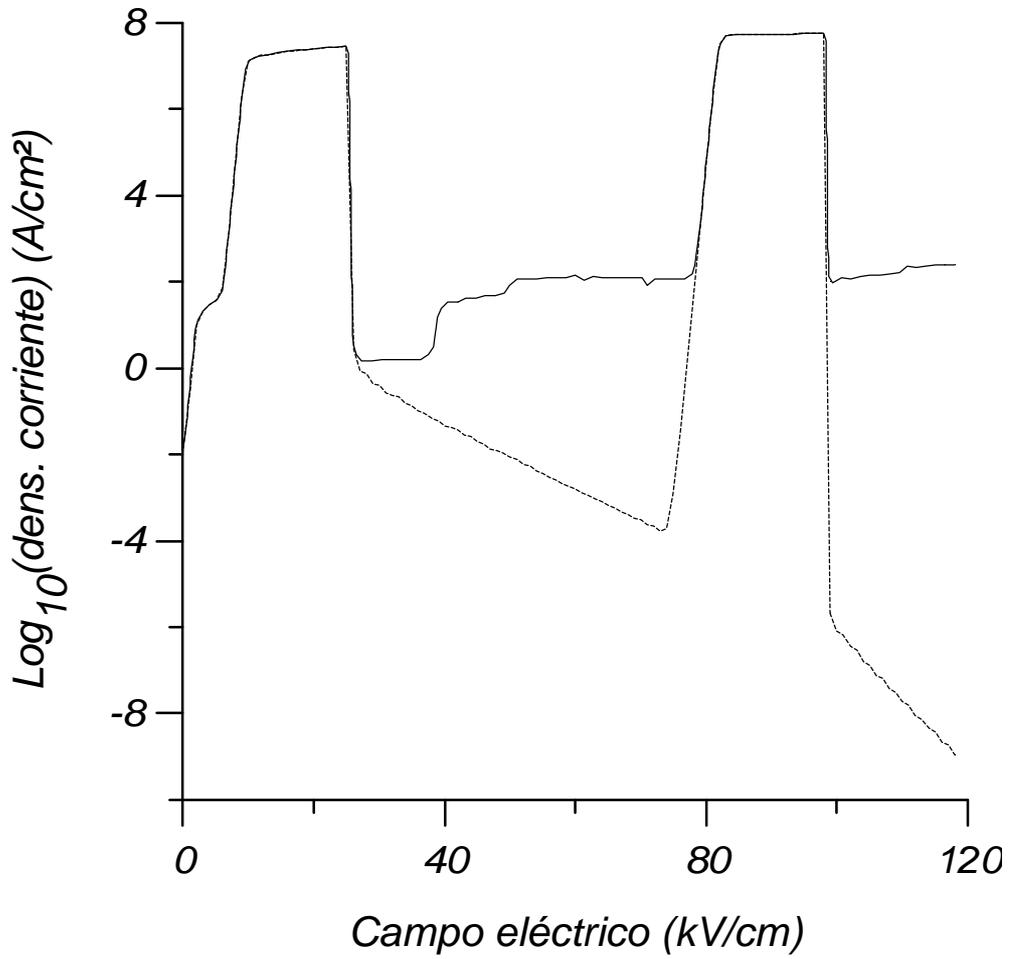


figura 1.23.- Pozo rectangular simple con $B = 1T$.

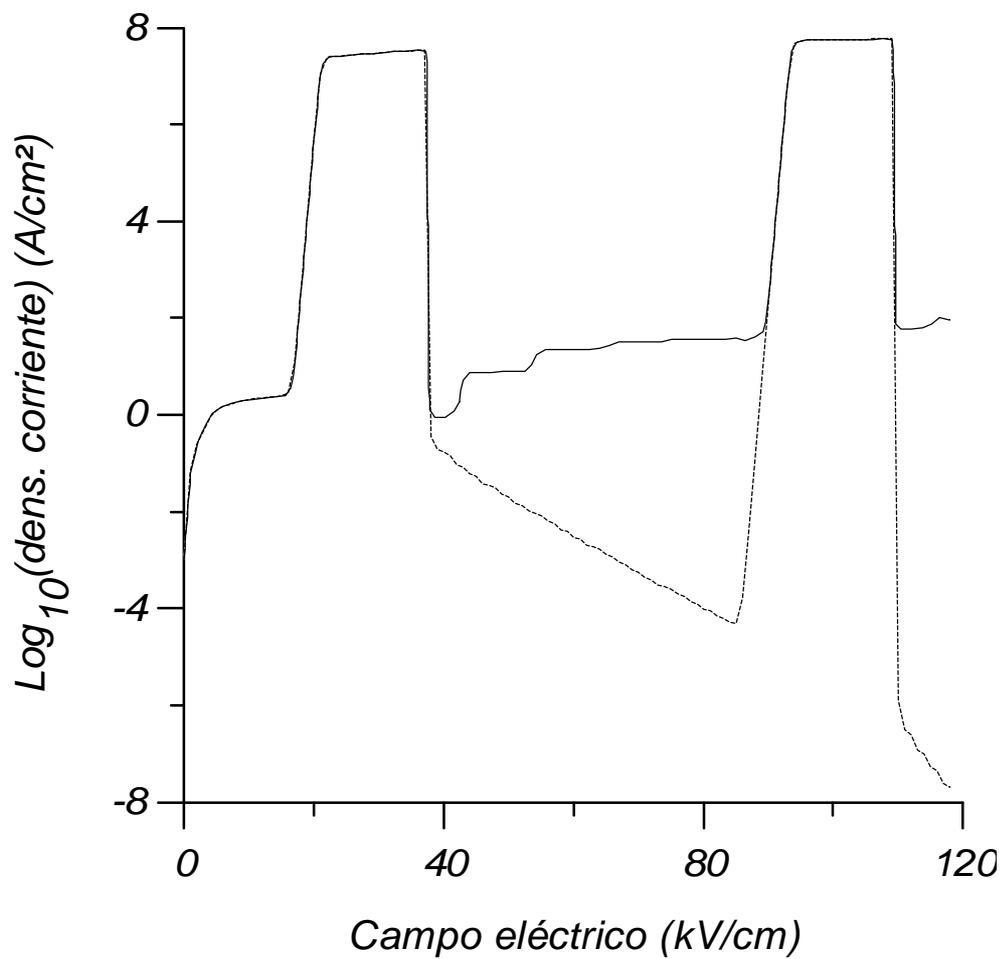


figura 1.24.- Pozo rectangular simple con $B = 3T$.

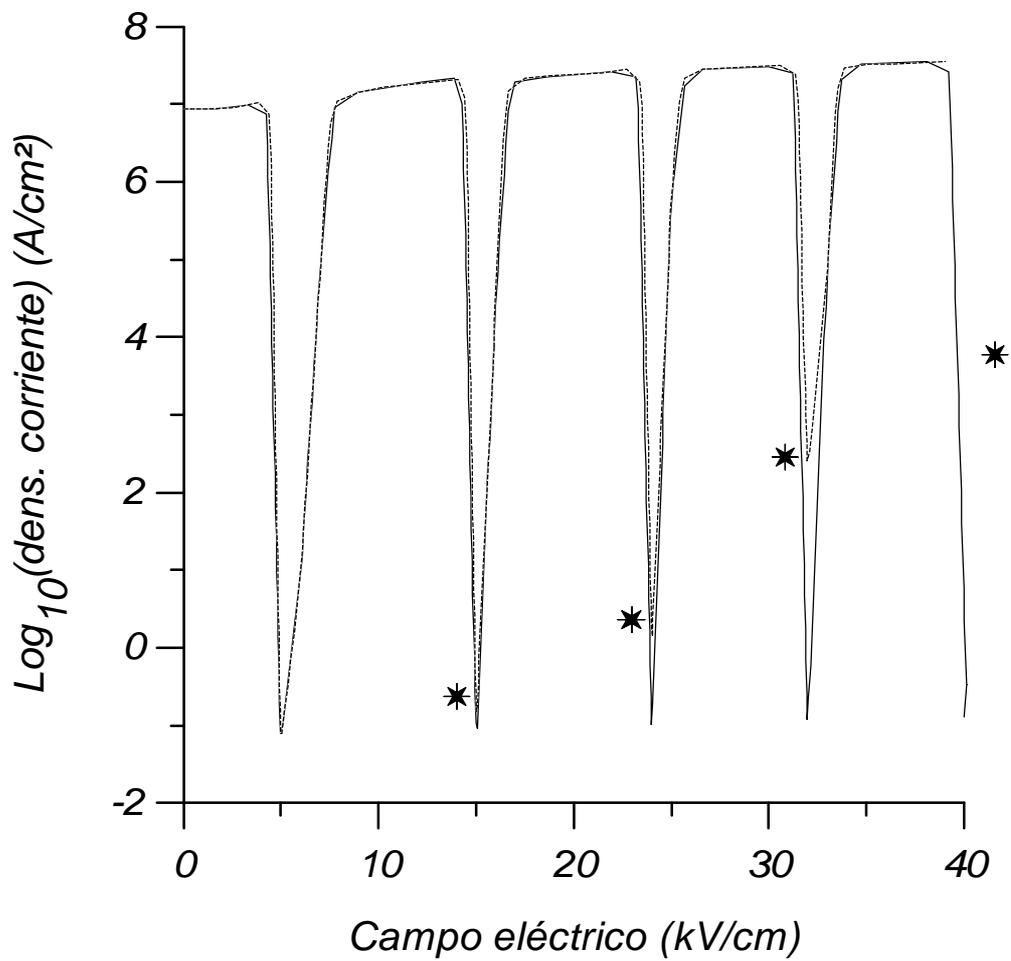


figura 1.25.- Pozo parabólico con $B = 0T$.

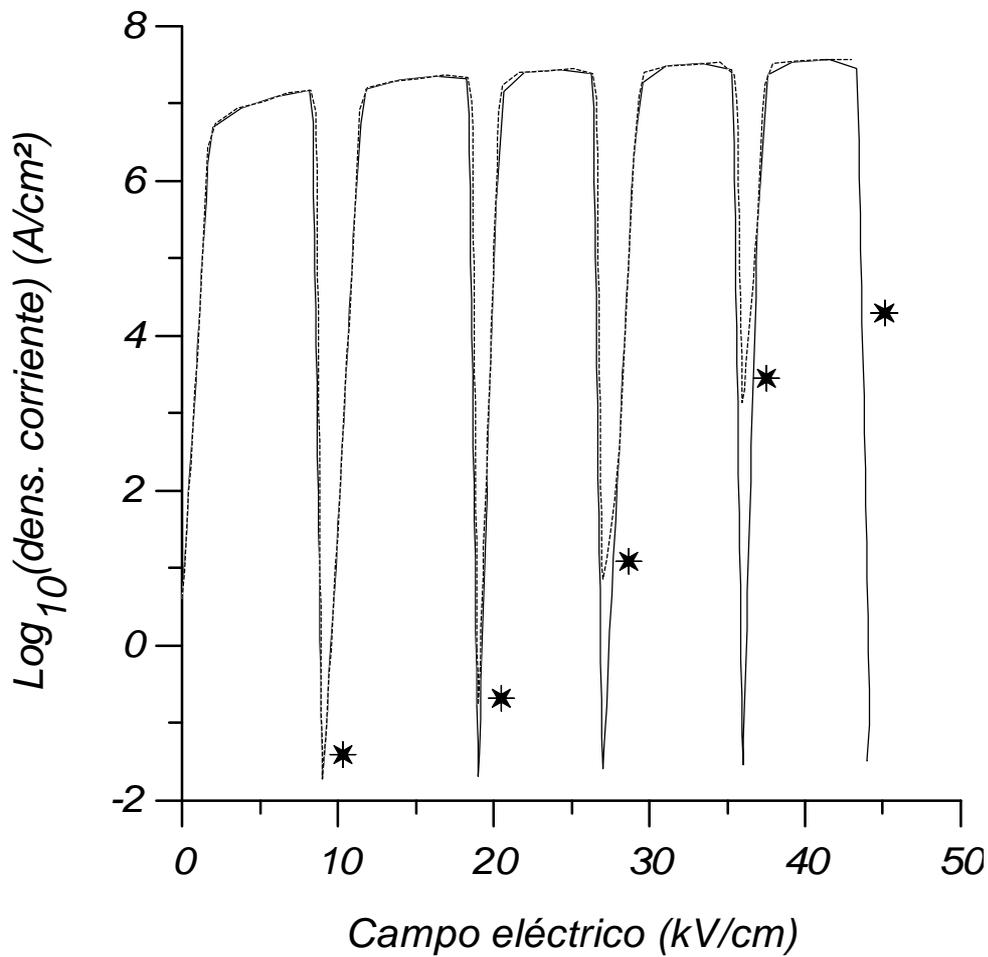


figura 1.26. - Pozo parabólico con $B = 1T$.

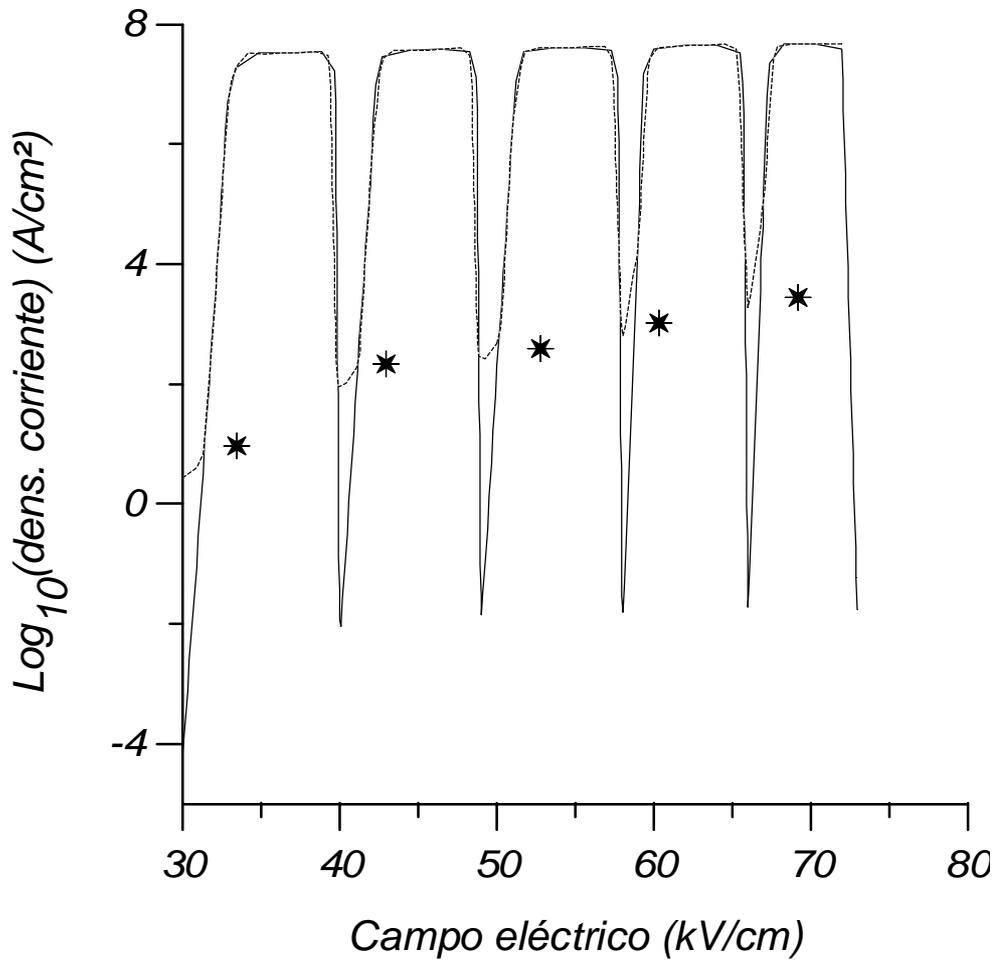


figura 1.27.- Pozo parabólico con $B = 3T$.

En las figuras correspondientes al pozo rectangular se observa el salto de corriente producido para los valores de campo eléctrico en los que se supera la condición umbra en el balance de energías puestas en juego (ecuación 1.33), incluyéndose en las mismas la energía del fonón LO que en el arseniuro de galio es de 36.6 meV .

Como puede observarse, las reducciones son más significativas con la incorporación de fonones *LO*. Para hacer más explícito este hecho, se repiten, seguidamente, las tablas anteriores pero con los nuevos datos obtenidos. Para el caso del pozo rectangular

$Log_{10} (J_{pico}/J_{valle})$			
	<i>sin IR ni LO(línea discontinua)</i>	<i>con IR y LO(línea continua)</i>	<i>F (kv./cm)</i>
<i>B = 0T</i>	12.87	5.38	96
<i>B = 1T</i>	13.43	5.76	98
<i>B = 3T</i>	13.66	6.0	109

Respecto al pozo parabólico, la tabla quedaría

$Log_{10} (J_{pico}/J_{valle})$			
	<i>sin IR ni LO(línea continua)</i>	<i>con IR y LO(línea discontinua)</i>	<i>F (kV/cm)</i>
<i>B = 0T</i>	8.44	5.11	31
<i>B = 1T</i>	9.08	4.40	36
<i>B = 3T</i>	9.44	4.40	66

Discusión

En las gráficas correspondientes a la doble barrera o pozo rectangular simple, puede apreciarse cómo inicialmente predomina la corriente valle asociada a *IR*. Cuando se alcanza el umbral preestablecido para la emisión de un fonón *LO*, su contribución es superior. En este aspecto se coincide con *François Chevoir* [21]. Aunque parezca paradójico, la emisión de fonones *LO* es muy poco dependiente de la

temperatura (no así la absorción de fonones que no han sido tenidos en cuenta en este estudio) llegando a predominar incluso a 4K. Este predominio es más acusado para $B=0T$, siendo la contribución LO más importante que la de IR para campos eléctricos inferiores conforme se aumenta el valor del campo magnético.

Lo mismo puede decirse respecto al caso del pozo parabólico, siendo la importancia de los procesos dispersivos asociados a la emisión LO incluso superior que en el caso de la doble barrera.

Respecto al peso de los procesos dispersivos asociados a la interface rugosa hay que recordar que las gráficas han sido realizadas siguiendo el modelo de Leo y Macdonald con unos valores mínimos tanto para longitud de correlación L como para la profundidad de la rugosidad D . La situación real de las muestras puede ser muy distinta llegando a tener este proceso dispersivo una contribución mayor en la corriente valle que la que se le ha atribuido.

Conclusiones

En este trabajo, se ha realizado un estudio sobre las características $I-V$ de una heteroestructura tan compleja como la de un pozo parabólico obteniendo resultados que son una extensión de los conseguidos por otros autores en estructuras más sencillas como son el simple o doble pozo rectangular.

Se ha aplicado el método de la matriz de transferencia a estructuras complejas lo que representa una gran simplificación respecto a la resolución analítica de la ecuación de Schrödinger. Ello supone una gran ventaja de cara a la implementación en un ordenador personal de los cálculos y a su posterior utilización para otro tipo de muestras. Se ha comprobado la bondad del método comparando los resultados con las medidas experimentales existentes para sistemas más sencillos, como son los pozos rectangulares simples.

Capítulo II
Efectos de mezcla en la banda de valencia sobre
la emisión de teraHertz de un triple pozo
cuántico asimétrico

Capítulo II

Efectos de mezcla en la banda de valencia sobre la emisión de *teraHertz* de un triple pozo cuántico asimétrico

Introducción

En este capítulo, se acometerá el estudio de la dinámica de la carga en el seno de una estructura formada por un triple pozo cuántico. El interés del mismo radica en la sencillez del tratamiento teórico^[27-36] que puede emplearse para el análisis de la emisión de radiación electromagnética en la banda de los *teraHertz* de dispositivos con esta configuración, así como su modulación, y cuyas aplicaciones prácticas se podrían situar en la construcción de detectores o generadores de tal radiación o en otros elementos de la electrónica de alta velocidad.

La razón de elegir el triple pozo cuántico asimétrico (figuras 2.1 y 2.2) radica en sus posibilidades de ajuste de anchos de pozos y barreras, con el fin de conseguir diseños con resonancias simultáneas de electrones en la banda de conducción y de huecos en la banda de valencia. De este modo, puede controlarse la emisión asociada al excitón formado. En este estudio se va a ir más allá del simple tuneo de huecos asociado al desplazamiento espacial de carga de un pozo a otro, incorporando al mismo el tuneo asociado a la transferencia de carga entre estados de

hueco pesado y de hueco ligero, que se denominará *tuneleo de mezcla*, que se produce para $k_{\text{re}}^1 0^{[37]}$. Se pondrá de manifiesto la alteración que este nuevo efecto produce en el tuneleo espacial.

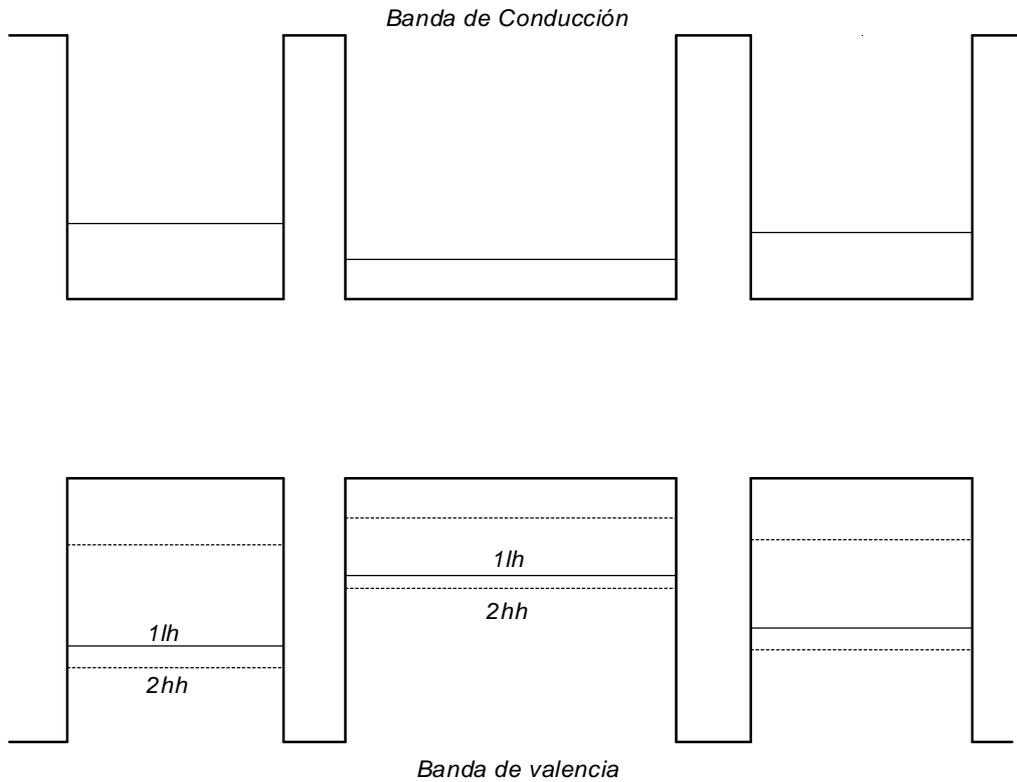


figura 2.1.- Triple pozo cuántico rectangular asimétrico con campo eléctrico nulo.

Para el análisis se empleará la integración numérica espacial y temporal de la ecuación de *Schrödinger* dependiente del tiempo, que incorporará el hamiltoniano de *Luttinger* para el estudio del tuneleo de mezcla y del tuneleo espacial de huecos. A este respecto ya se ha realizado un trabajo en pozos cuánticos simétricos^[38] para el caso estático. El estudio presente se restringirá al entorno de la resonancia

donde estará garantizado el acoplamiento entre pozos. Asimismo, se despreciará inicialmente la interacción coulombiana entre electrones y huecos, que afectan a la dinámica del excitón^[28] y, por tanto, a la emisión dipolar electromagnética, salvo en la dirección z que se corresponderá con la de crecimiento cristalino.

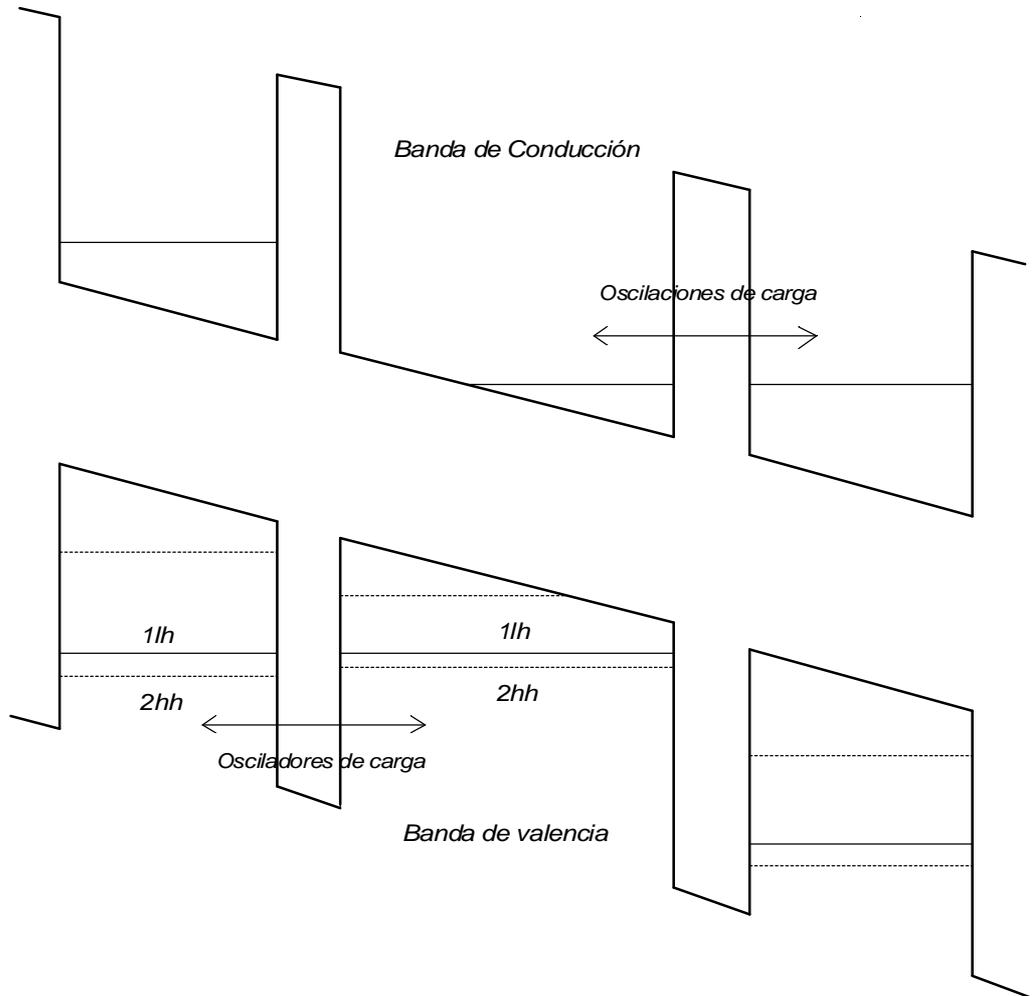


figura 2.2.- Triple pozo cuántico en condiciones de resonancia simultánea tanto en la banda de conducción como en la banda de valencia ($k_{\text{ex}}=0$)

Modelo

La relación de dispersión en la banda de valencia puede calcularse a partir del hamiltoniano de *Luttinger-Kohn*, adaptado a este caso concreto, e incluyendo campo eléctrico^[39]. Las soluciones para las funciones de onda del sistema pueden expresarse en función de las correspondientes soluciones para $k_{||} = 0$, que son combinaciones lineales de funciones de *Airy*, correspondientes a *hibridizaciones* (es decir, funciones asociadas a estados de huecos que poseen un carácter parcialmente ligero y pesado) de las mismas, asociadas a estados de huecos pesados y huecos ligeros^[37]. Dada la complejidad del cálculo, no se usará este proceso analítico. Con el fin de obtener soluciones estáticas puede reescribirse el hamiltoniano de *Luttinger* como

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} a_+ & c & b & 0 \\ c^* & a_- & 0 & -b \\ b^* & 0 & a_- & c \\ 0 & -b^* & c^* & a_+ \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

donde

$$\begin{aligned} a_{\pm} &= E_V - \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{g}_1 \pm \mathbf{g}_2) (k_x^2 - k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}z} (\mathbf{g}_1 \mp \mathbf{g}_2) \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}z} + Fz \\ b &= \sqrt{3} \mathbf{g}_3 \hbar (k_x - ik_y) \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I}z} \\ c &= \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \hbar^2 [\mathbf{g}_2 (k_x^2 - k_y^2) - 2i \mathbf{g}_3 k_x k_y] \end{aligned} \quad (2.2)$$

siendo \mathbf{g} los parámetros estándar de *Luttinger* y F el campo eléctrico en la dirección z , que es perpendicular a las capas semiconductoras.

Se tiene, pues, un sistema de cuatro ecuaciones diferenciales acopladas que va a resolverse en la dirección $(1,0,0)$ (que corresponde al punto X en el diagrama de dispersión (figura i.1); es necesario elegir $k_{\parallel} \neq 0$ para que se produzca el tuneo de mezcla) del espacio de las fases y , de este modo, obtener la distribución de niveles de energía. Para su resolución, se usarán ocho funciones pares de prueba gaussianas y otras ocho funciones impares. De acuerdo a la referencia [39] se transformará el sistema en uno más sencillo que sólo precise dos pares de funciones mezcladas de prueba. Finalmente, por el método variacional se obtendrá la distribución de niveles de energía para la banda de valencia y las funciones de onda. Ésta es una buena herramienta para identificar las resonancias cuando se trabaja con evolución temporal.

Con el fin de estudiar la dinámica de tuneo de excitones es necesario resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, correspondiente al hamiltoniano excitónico sin espín, que puede escribirse como

$$H(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = -\frac{\hbar^2}{2m_{xy}} \nabla_{xy}^2 + \sum_{i=e,h} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \frac{\nabla_{z_i}^2}{\hbar^2 z_i^2} + V_i(z_i) \right] + V_c(\mathbf{r}, z_e - z_h) \quad (2.3)$$

donde los subíndices e, h se refieren a electrones y huecos respectivamente, y $V_e(z_e)$, $V_h(z_h)$ son los potenciales del pozo cuántico.

Además, m_e^* y m_h^* son las correspondientes masas efectivas, m_{xy} es la masa electrón-hueco reducida en el plano x - y y $\rho = \rho_e - \rho_h$ es el desplazamiento relativo dentro del plano del pozo cuántico. A estos parámetros debe añadirse el carácter ligero o pesado para el caso de los huecos, salvo en el caso del potencial V_h que es único.

Despreciando diferencias en las constantes dieléctricas para pozos y barreras, el potencial coulombiano se expresará como

$$V_{C,h}(\mathbf{r}, z_e - z_h) = -\frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\mathbf{r}^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (2.4)$$

en el que con el índice h se ha querido reflejar los posibles estados de hueco

$$h = |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, |4\rangle \quad (o \quad |\frac{3}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle, |\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{3}{2}\rangle)$$

Para simplificar el cálculo, se separarán las funciones de onda excitónicas $\Phi(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ en una componente a lo largo de la dirección z y otra en el plano de las capas que componen la heteroestructura. Luego,

$$\Phi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \Psi(z_e, z_h) \mathbf{f}(\mathbf{r}) \quad (2.5)$$

Considerando interacción coulombiana sólo en la dirección z , puede expresarse el hamiltoniano correspondiente como

$$H(z_e, z_h) = \sum_{i=e,h} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \frac{\mathcal{I}^2}{\mathcal{I} z_i^2} + V_i(z_i) \right] + W(z_e - z_h) \quad (2.6)$$

De acuerdo a esta nueva formulación, se reescribirán los operadores del hamiltoniano de *Luttinger*

$$\begin{aligned} a_+ &= V_h(z_{hh}) + W_e(z_{hh}) - \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{g}_1 + \mathbf{g}_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} z} (\mathbf{g}_1 - 2\mathbf{g}_2) \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} z} \\ a_- &= V_h(z_{lh}) + W_e(z_{lh}) - \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{g}_1 - \mathbf{g}_2)(k_x^2 + k_y^2) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} z} (\mathbf{g}_1 + 2\mathbf{g}_2) \frac{\mathcal{I}}{\mathcal{I} z} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Los subíndices *hh* y *lh* corresponden a “huecos pesados” y “huecos ligeros” para $k_{\alpha} = 0$. Los otros dos parámetros, *b* y *c*, mantienen su forma.

Así, pues, el hamiltoniano total formado por el descrito para electrones y el de *Luttinger*, para huecos, puede expresarse de forma matricial como

$$\hat{H}(z_e, z_h) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\mathcal{I}^2}{\mathcal{I} z_e^2} + V_e(z_e) \right) \hat{I} + \hat{H}_L^{\text{mod}} \quad (2.8)$$

siendo \hat{I} la matriz unitaria y \hat{H}_L^{mod} el hamiltoniano de *Luttinger* con los operadores modificados.

La función W_e se obtiene a partir del vector de interacción de *Coulomb*

$$\vec{W}(z) = \int_0^\infty d\rho \rho \left[\begin{array}{c} \left(\begin{array}{c} I/\mu_{xy|1} \\ I/\mu_{xy|2} \\ I/\mu_{xy|3} \\ I/\mu_{xy|4} \end{array} \right) \left[\partial_\rho \phi(\rho) \right]^2 - \frac{e^2}{\epsilon} \left(\begin{array}{c} I/\sqrt{\rho^2 + z_{|1}^2} \\ I/\sqrt{\rho^2 + z_{|2}^2} \\ I/\sqrt{\rho^2 + z_{|3}^2} \\ I/\sqrt{\rho^2 + z_{|4}^2} \end{array} \right) \phi^2(\rho) \end{array} \right] \quad (2.9)$$

Si se expresa

$$\vec{W}_h(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' (\psi_1^2, \psi_2^2, \psi_3^2, \psi_4^2) \begin{pmatrix} W_1(z-z') \\ W_2(z-z') \\ W_3(z-z') \\ W_4(z-z') \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

siendo W_i los elementos del vector anterior, se tendrá el potencial de interacción

$$\vec{W}_e(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \psi_e^2 \vec{W}(z-z') \quad (2.11)$$

que deberá añadirse al hamiltoniano^[40] (el carácter vectorial que se está empleando es solo una conveniencia para simplificar la formulación, pues los potenciales son en realidad escalares). Por simplificación, se factoriza la función de onda

$$\Psi(z_e, z_h) = \mathbf{y}(z_e) \mathbf{y}(z_h) \quad (2.12)$$

con lo que la ecuación de *Schrödinger* correspondiente queda

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V_e(z_e) + W_h(z_e) \right) \Psi_e(z_e) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_e(z_e) \quad (2.13)$$

para electrones, y

$$\hat{H}_L^{\text{mod}} \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1(z_h) \\ \mathbf{y}_2(z_h) \\ \mathbf{y}_3(z_h) \\ \mathbf{y}_4(z_h) \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\mathbb{1}}{\mathbb{1}t} \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1(z_h) \\ \mathbf{y}_2(z_h) \\ \mathbf{y}_3(z_h) \\ \mathbf{y}_4(z_h) \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

para huecos. Ambas ecuaciones tienen que resolverse conjuntamente pues están acopladas a través de los $\vec{W}_i(z)$.

Para la resolución de las ecuaciones en el plano de las capas que componen la heteroestructura, se empleará una función de onda de prueba o *ansatz*^[41]

$$\phi(\rho) = \frac{2}{a} e^{-\frac{\rho}{a}} \quad (2.15)$$

siendo a el radio excitónico bidimensional (distancia entre el electrón y el hueco en el plano x - y). Se empleará el mismo valor del radio tanto para huecos ligeros como para huecos pesados.

Para calcular numéricamente la evolución espacio-temporal del sistema, se realizará una discretización tanto en el espacio como en el

tiempo. Así, pues, se pasará de usar la función de onda para electrones, en la banda de conducción, \mathbf{y}_e a usar \mathbf{x}_n^n donde el subíndice n corresponde a la segmentación espacial en la banda de conducción y el superíndice n a la temporal. Del mismo modo, en la banda de valencia se pasará de la función de onda $\mathbf{y}_{i,h}$ a la discretizada $\mathbf{j}_{i,k}^n$, cuyo subíndice k recoge la segmentación espacial en esta banda.

Otras transformaciones a tener en cuenta son: $z_e \rightarrow v \delta z$ para la banda de conducción, $z_{i,h} \rightarrow \kappa \delta z_i$ para la banda de valencia siendo δz la unidad básica espacial (en los cálculos presentes, se tomará $\delta z_i = \delta z$). Análogamente, para el tiempo se tendrá la discretización $n \delta t$. Ahora, la derivada segunda espacial puede aproximarse por

$$\xi_v'' = \frac{I}{\delta z^2} (\xi_{v+l} - 2\xi_v + \xi_{v-l}) + O(\delta z^2) \quad (2.16)$$

para la banda de conducción, siendo para la banda de valencia

$$\varphi''_{i,k} = \frac{I}{\delta z^2} (\varphi_{i,k+l} - 2\varphi_{i,k} + \varphi_{i,k-l}) + O(\delta z^2) \quad (2.17)$$

Para calcular el desarrollo temporal, se ha usado un esquema de propagación unitaria para el operador evolución tanto en la banda de valencia como en la banda de conducción^[42]

$$\xi_v^{n+1} \bar{\phi}_\kappa^{n+1} = \left(\hat{I} - i\hat{H} \frac{\delta t}{2} \right) \xi_v^n \bar{\phi}_\kappa^n \left(\hat{I} + i\hat{H} \frac{\delta t}{2} \right)^{-1} \quad (2.18)$$

obteniendo cuatro sistemas tridiagonales que se resuelven por métodos numéricos estándar. Para resolver la evolución espacio-temporal se ha supuesto que, inicialmente, se crea un par electrón-hueco en el pozo central (se considera que para este instante $t=0$), y que el par excitónico se forma por la superposición de los paquetes de onda asociados al electrón y al hueco que están situados en el pozo central para $t = 0$. De este modo, las ecuaciones de *Schrödinger* planteadas se resuelven numéricamente, para un valor de $k_{||}$ determinado, usando $\delta z = 0.5 \text{ \AA}$ y $\delta t = 1 \text{ fs}$. Se supondrá al sistema inmerso en una caja finita suficientemente grande (2000 \AA) para poder despreciar los efectos de bordes.

La integración numérica en el espacio permitirá obtener la densidad de carga de portadores en una región semiconductor determinada y para cualquier tiempo, lo que podrá expresarse como

$$Q_{ab}^{e,h}(t) = \int_a^b dz_{e,h} \left| \Psi^{e,h}(z_{e,h}, t) \right|^2 \quad (2.19)$$

Resultados y discusión

Cuando la estructura formada por un triple pozo cuántico asimétrico no está sometida a ningún campo eléctrico, los estados excitados de electrón y hueco están prácticamente localizados en sus

respectivos pozos. La aplicación de un campo F_r , determinado, provoca simultáneamente la resonancia mecano-cuántica y la deslocalización de las funciones de onda del electrón en la banda de conducción de los pozos central y derecho. En principio, los huecos no tienen que estar en resonancia para ese mismo valor del campo. No obstante, la selección de la estructura que se ha realizado, permite simultanear, junto a la resonancia de la banda de conducción, la resonancia de los huecos en la banda de valencia entre los pozos central e izquierdo. Además, el sistema en estudio ofrece la posibilidad de discriminar transiciones ópticas en los tres pozos por sus diferentes posiciones espectrales. De este modo, se realizará la excitación óptica del pozo central creando con ello los paquetes de onda de electrón y hueco de partida. Ambos paquetes son no estacionarios ya que están formados por la combinación lineal de dos estados, tanto en la banda de conducción como en la banda de valencia. Luego, se tendrá un paquete de ondas asociado al electrón oscilando entre el pozo central y el pozo derecho, y un paquete de ondas asociado al hueco oscilando entre el pozo central y el pozo izquierdo, siendo ambos periodos diferentes. Es conveniente recordar que se va a considerar la interacción coulombiana entre ambos portadores y, por tanto, se estudiará la evolución de los excitones.

Para el ajuste de esta estructura se ha elegido un pozo izquierdo de 60\AA de ancho ($GaAs$) seguido de una barrera de 15\AA ($Ga_{0.7}Al_{0.3}As$). A continuación el pozo central, con un ancho de 85\AA ($GaAs$), una barrera de 20\AA ($Ga_{0.7}Al_{0.3}As$) y el pozo derecho de 61\AA ($GaAs$). Estos valores han sido obtenidos fijando inicialmente los anchos de los pozos central y derecho, para, posteriormente, ajustar el ancho del pozo izquierdo, con el fin de conseguir simultanear las resonancias correspondientes a la del

electrón en la banda de conducción y a la del primer estado de hueco ligero en la banda de valencia (figura 2.3).

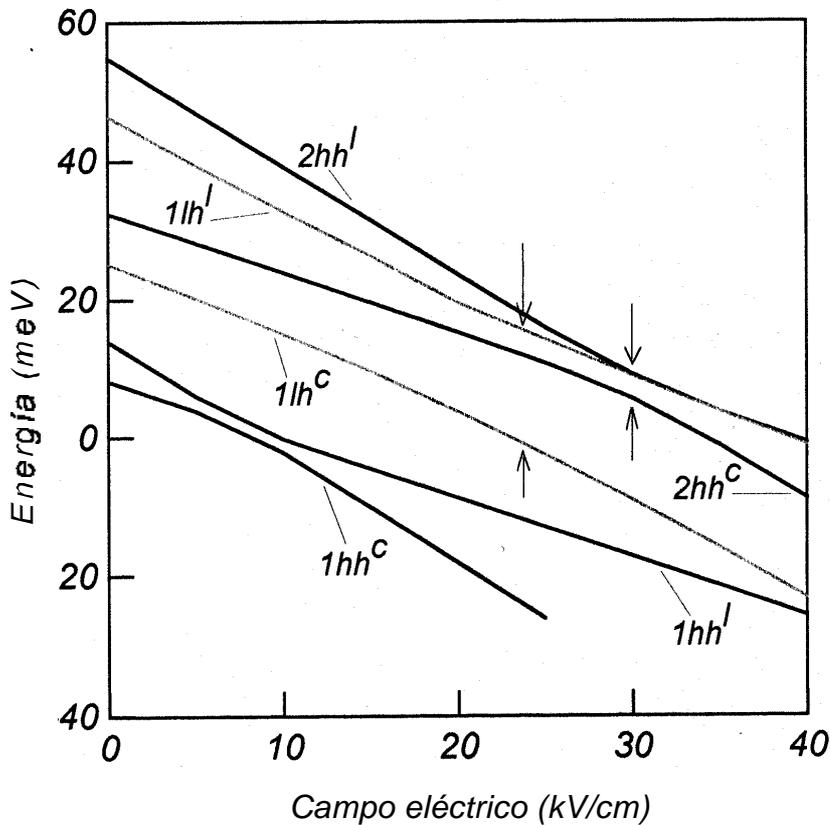


figura 2.3.- Detalle de los niveles resonantes en los momentos que se producen los tuneleos espacial y de mezcla en la banda de valencia.

En las siguientes gráficas (figuras 2.4 a 2.7) puede observarse que el hueco ligero “puro” ($k_x = 0$) tiene un tuneleo resonante para un valor del campo eléctrico $F @ 24kV/cm$ que coincide con el del electrón. Para $F @ 30kV/cm$, el segundo estado de hueco pesado tiene el tuneleo resonante.

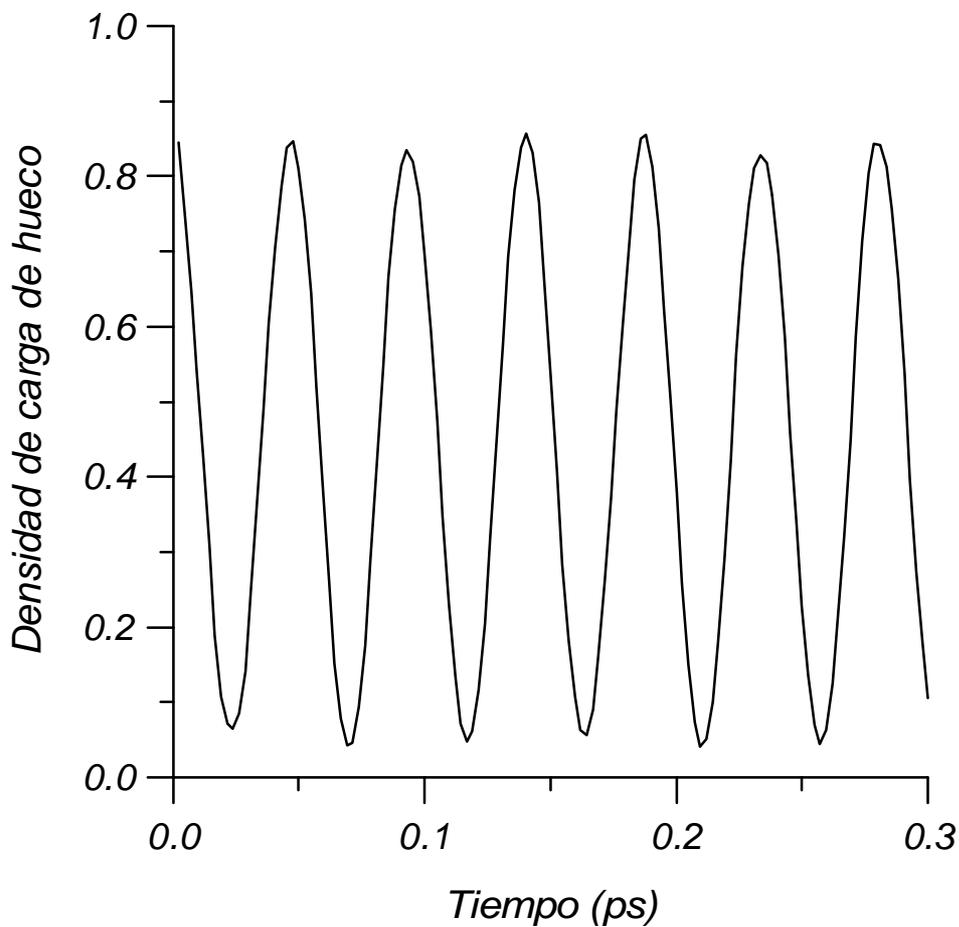


figura 2.4.- Oscilaciones de carga en la banda de valencia del pozo central para un valor de campo eléctrico $F_r = 24\text{kV/cm}$

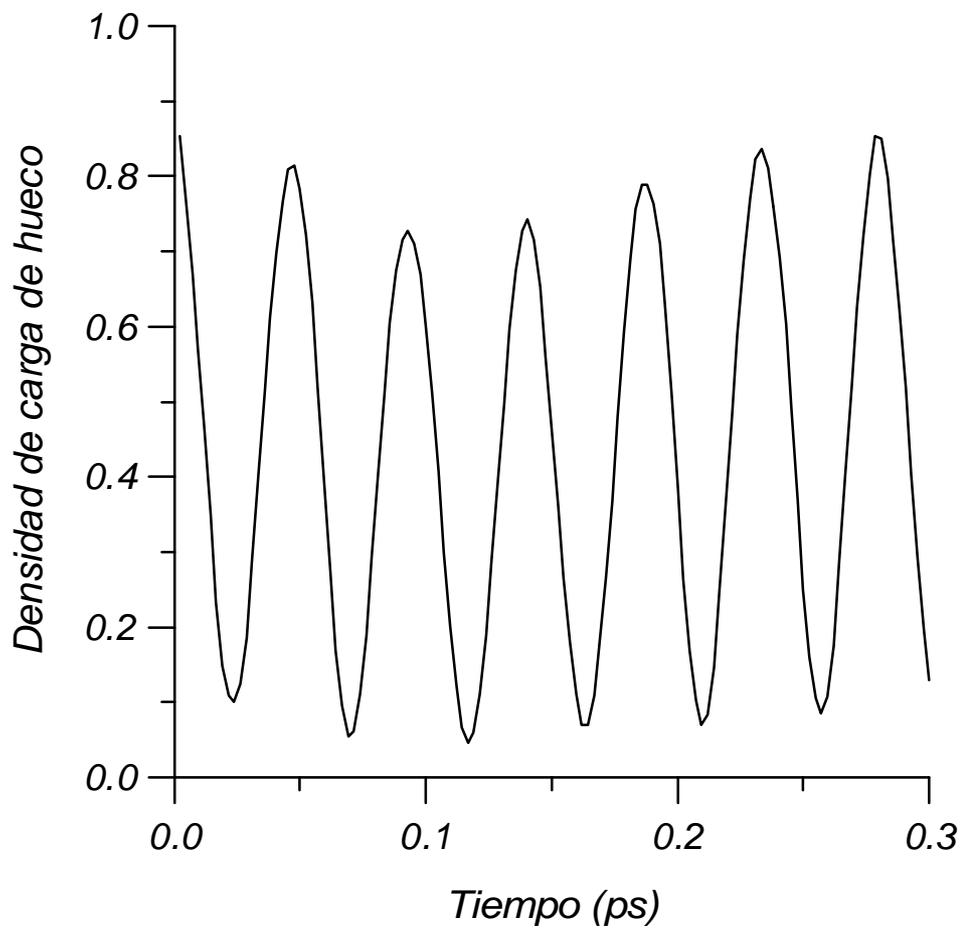


figura 2.5.- Oscilaciones de carga en la banda de valencia del pozo central para un valor de campo eléctrico $F_r = 29\text{kV/cm}$

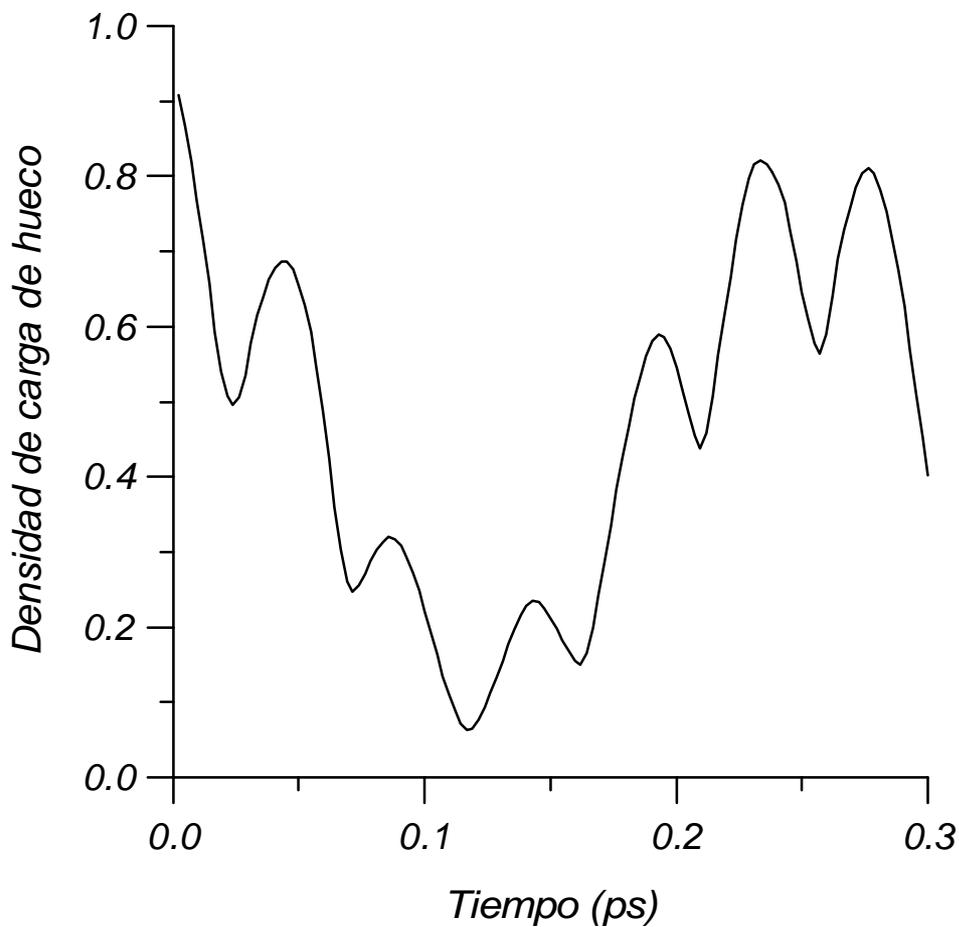


figura 2.6.- Oscilaciones de carga en la banda de valencia del pozo central para un valor de campo eléctrico $F_r = 30.5\text{kV/cm}$

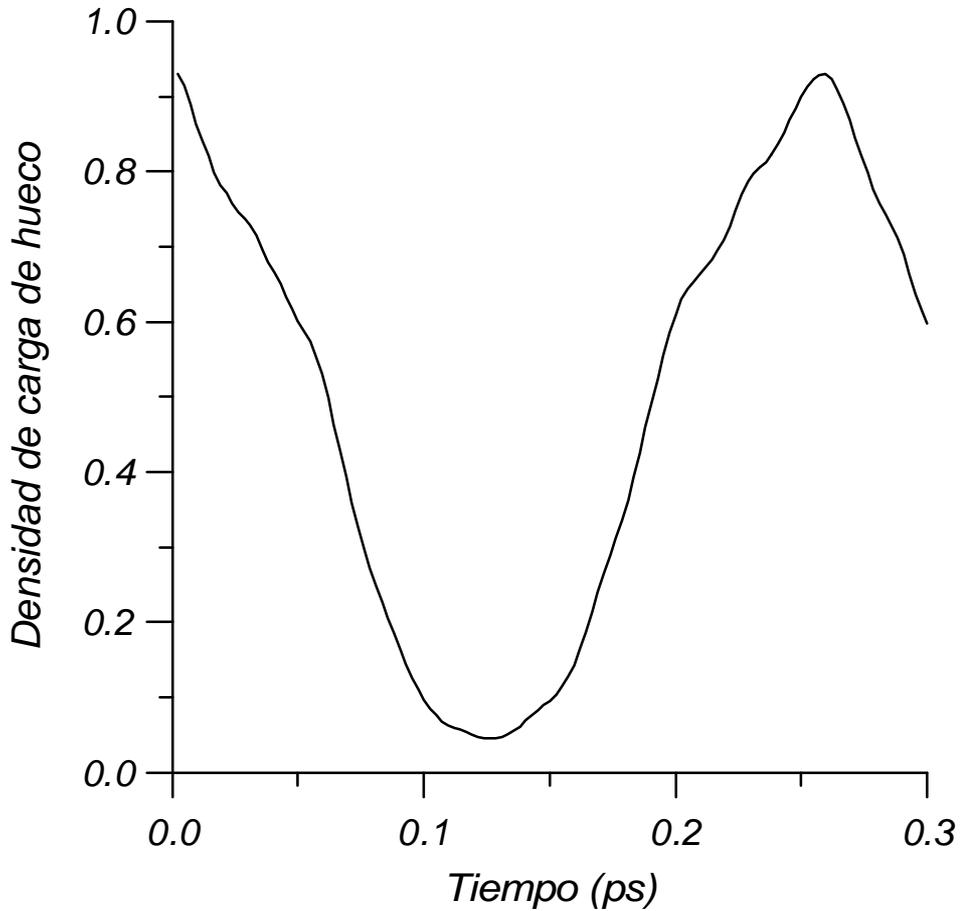


figura 2.7.- Oscilaciones de carga en la banda de valencia del pozo central para un valor de campo eléctrico $F_r = 33\text{kV/cm}$

Para el valor de campo eléctrico inicial, se fotoexcita el pozo central con un pulso de un valor adecuado de energía de fotón. El primer estado de hueco pesado no resulta ser ningún problema pues, a pesar de que puede excitarse, éste no resuena con el pozo izquierdo ni con el derecho para el valor de F que se ha fijado.

Así, pues, el hueco ligero resonará en la banda de valencia y el electrón en la banda de conducción. Conforme va aumentándose el valor del campo eléctrico, el carácter inicial del hueco va cambiando, llegando la función de onda asociada al segundo nivel de la banda de valencia del pozo central a estar completamente hibridizada. Con valores de campos eléctricos mayores se consigue el carácter de hueco pesado para este nivel.

Estos efectos de mezcla en la banda de valencia han sido estudiados para $k_{\alpha}=0.03(2\mathbf{p}/a)$, siendo a la constante de red del cristal de $GaAs$ ($5.65\text{\AA}^{[5]}$). Con este valor, las funciones de onda del primer nivel de hueco ligero y el segundo nivel de hueco pesado están completamente hibridizadas. De este modo se consigue simultáneamente el tuneo de mezcla y el tuneo espacial, tal y como puede observarse en las gráficas: en la figura 2.4 se observan las oscilaciones de carga del estado fundamental de hueco ligero en el pozo central, dentro de la banda de valencia, que resuena con el estado correspondiente en el pozo izquierdo. En la figura 2.5 comienza a apreciarse una modulación de este tuneo espacial ocasionado por la transformación que se está produciendo en el carácter del hueco. Luego para este valor de campo eléctrico se tiene una resonancia que se corresponde con un estado de hueco parcialmente ligero y pesado. En la figura 2.6 es más patente esta modulación. Para el caso de la figura 2.7 el tuneo de mezcla se ha completado, siendo el estado resonante de un hueco pesado (en concreto el segundo estado de hueco pesado en el pozo central).

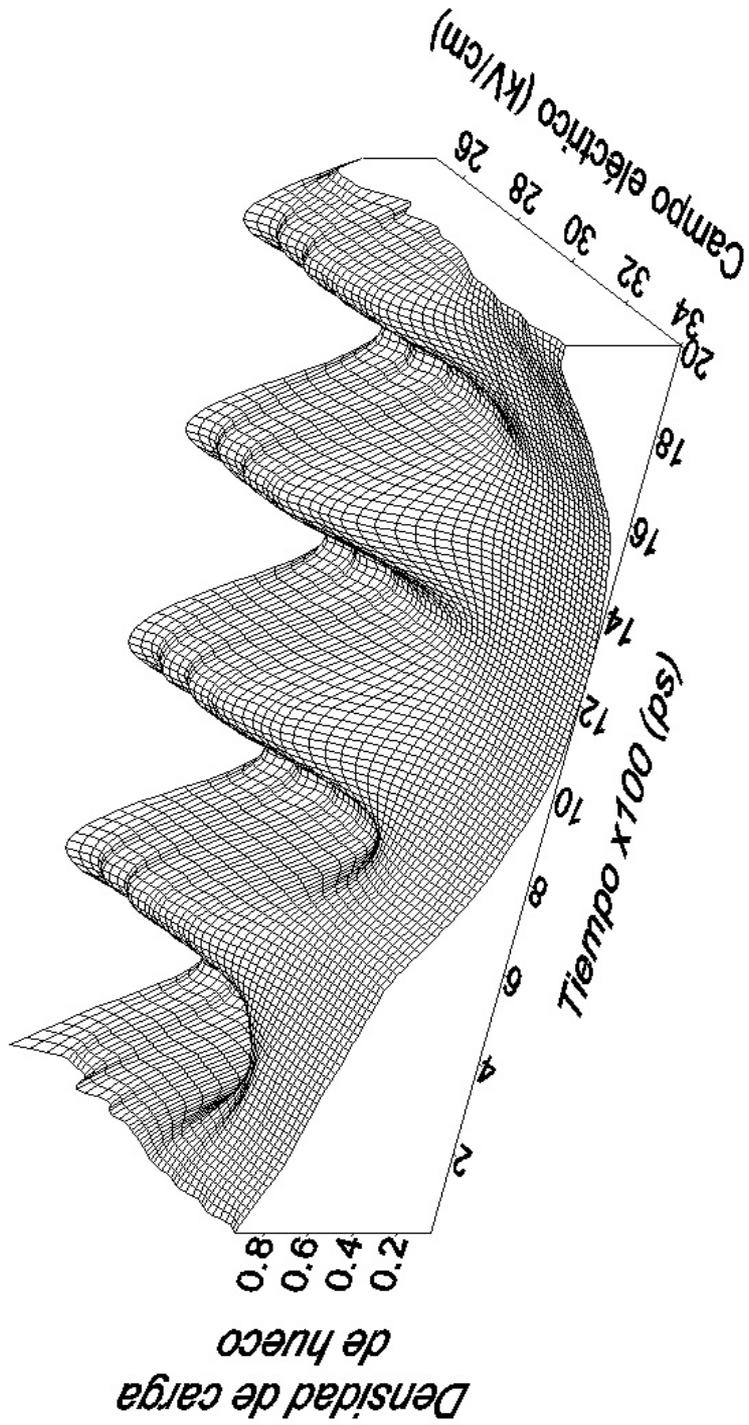


figura 2.8.- Evolución del tuneo de mezcla.

Para el valor de campo eléctrico inicial, $24kV/cm$, el hueco completa una oscilación en $0.04ps$. Fijando el valor de k_{α} indicado, puede verse, tal y como queda reflejada en la gráfica de la figura 2.8, cómo varía el periodo de oscilación hasta que finalmente para $F = 33kV/cm$ toma un valor de $0.13ps$.

Este aumento del periodo evidencia la transición a hueco pesado. Las diferencias en los tiempos de tuneleo, con y sin interacción electrón-hueco, son alrededor de un 10% , lo que está de acuerdo con los resultados obtenidos por *Mohaidat, Shum y Alfano*^[43] para el estudio de tuneleo en pozos cuánticos asimétricos.

Las siguientes gráficas muestran la densidad de carga excitónica en función del tiempo, en el pozo central, para distintos valores del campo eléctrico.

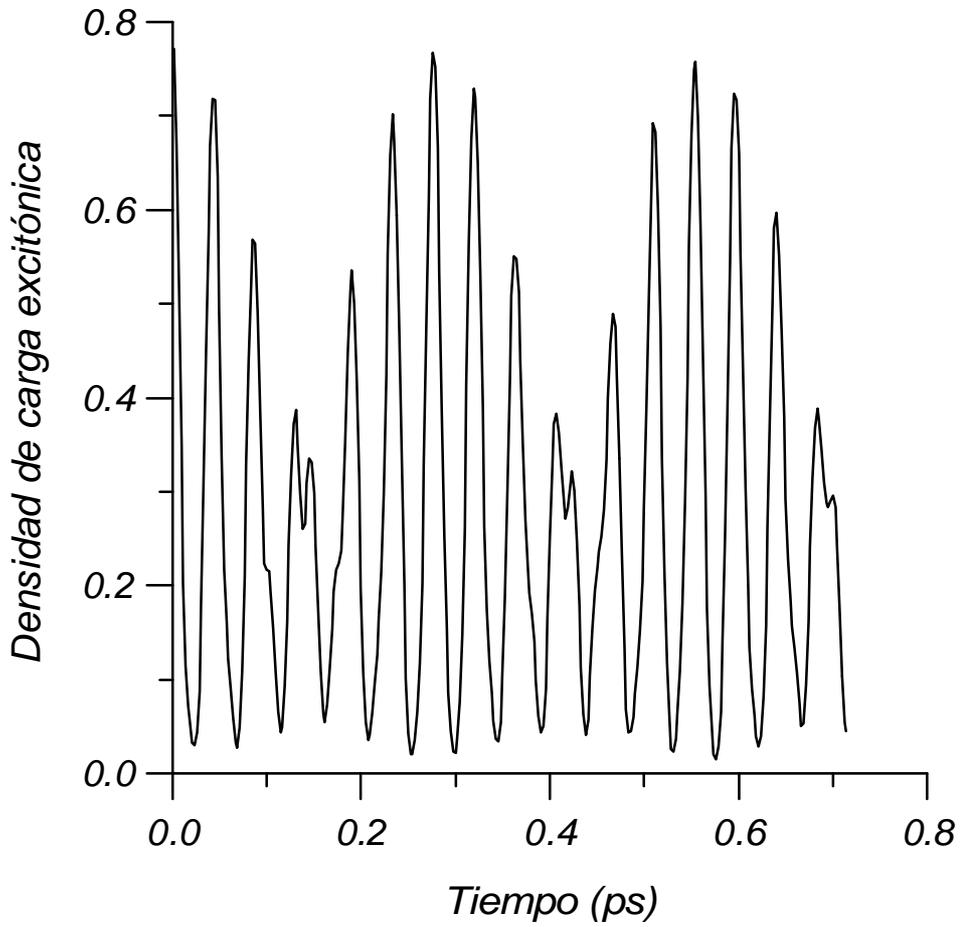


figura 2.9.- Oscilaciones de la carga excitónica para un valor de campo eléctrico $F_r = 25\text{kV/cm}$

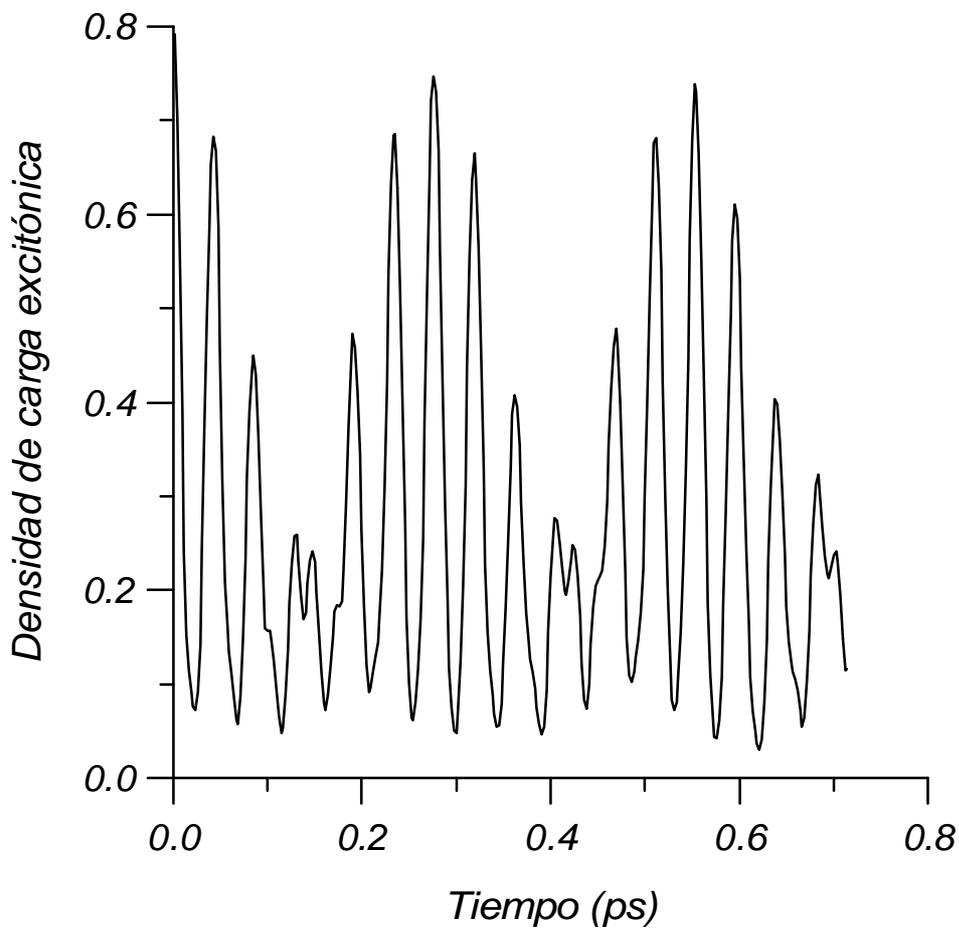


figura 2.10.- Oscilaciones de la carga excitónica para un valor de campo eléctrico $F_r = 29.5\text{kV/cm}$

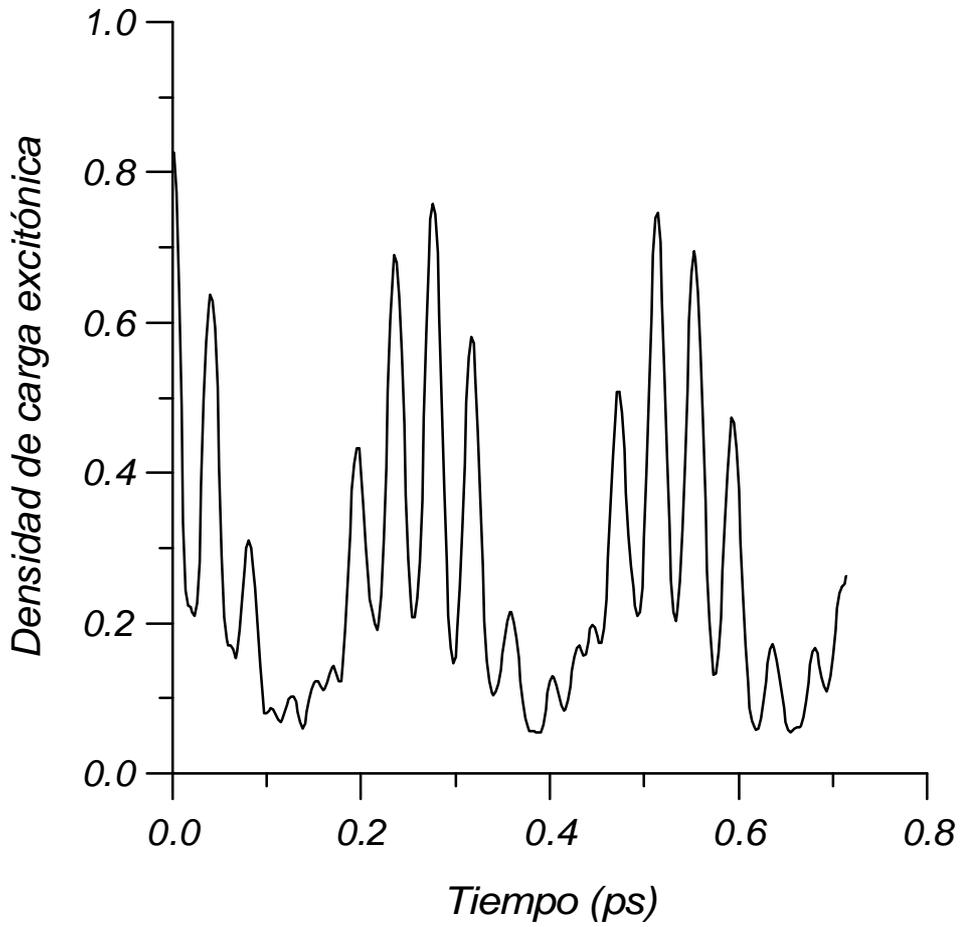


figura 2.11.- c Oscilaciones de la carga excitónica para un valor de campo eléctrico $F_r = 30.5\text{kV/cm}$

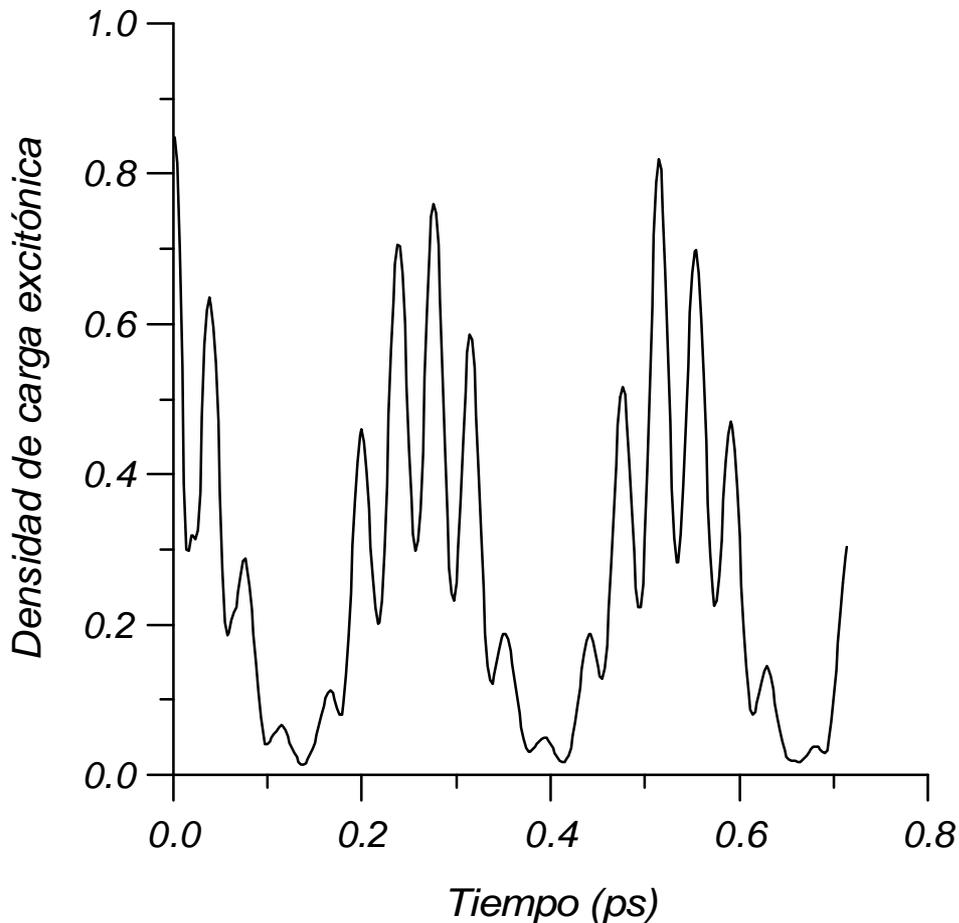


figura 2.12.- Oscilaciones de la carga excitónica para un valor de campo eléctrico $F_r = 33\text{kV/cm}$

Es preciso aclarar que el excitón posee una carga total neutra. El hecho de que el excitón esté formado por un par electrón-hueco y que cada una de estas partículas oscile a distintas frecuencias (por poseer masas efectivas distintas) entre distintos pozos, (el electrón, en la banda de conducción, entre el pozo central y derecho; y el hueco, en la banda de valencia, entre el pozo central e izquierdo) justifica las variaciones

temporales que han quedado registradas en estas gráficas (de no ser así, la densidad de carga sería constante).

Puede, también, observarse que el excitón oscila con periodos que van desde $0.272ps$ para un campo de $25kV/cm$ hasta los $0.260ps$ para el caso de $33kV/cm$. En este margen de valores del campo eléctrico, la frecuencia del electrón varía ligeramente entre 37 y $38.5 Thz$. Esta variación prácticamente no es observable en los cálculos presentes debido al dominio de la frecuencia del hueco en el proceso de tuneleo. No obstante, las cargas positivas y negativas tienen diferentes frecuencias de oscilación pues están afectadas por la interacción de excitón. De este modo, se tiene una distancia electrón-hueco y una amplitud oscilantes en consonancia con el periodo de tuneleo en la banda de valencia. Así, se espera que la emisión electromagnética de *teraHertz* del par electrón-hueco estará modulada en amplitud y frecuencia por la variación del carácter del hueco.

En la figura 2.9 se representa la densidad de carga excitónica para un valor de campo eléctrico de $25kV/cm$, que se corresponde con la resonancia del excitón para el estado de hueco ligero. Cabe destacar que este valor difiere del correspondiente al de resonancia de hueco ligero para los pozos central e izquierdo cuando no se considera la interacción coulombiana asociada al excitón ($24kV/cm$).

De las gráficas puede deducirse que la emisión excitónica consistirá en la emisión del electrón modulada por la oscilación del hueco. Partiendo del carácter *ligero*, puede verse la situación en la que no

domina ninguno de los dos caracteres de hueco. Ésto sucede para valores de campo eléctrico comprendidos entre 29.5 y 30.5 kV/cm . De nuevo, estos valores son más altos, en torno a un 10%, que los que se obtendrían si se despreciara la interacción coulombiana asociada al excitón. Este comportamiento se corresponde con las medidas experimentales de *Mohaidat* y colaboradores.

Estos resultados no son comparables a los obtenidos en un doble pozo cuántico asimétrico pues, en este caso, hay localización ya sea de electrones o de huecos^[27,44]. La estructura analizada posee una emisión dipolar más alta que la correspondiente al doble pozo cuántico asimétrico^[45] pues hay oscilación simultánea de electrones y huecos.

El método aquí empleado puede extenderse fácilmente a estructuras más complejas, variando simplemente la caja sobre la que se realiza la integración espacial.

Conclusiones

En este trabajo se ha integrado numéricamente en el espacio y en el tiempo la ecuación de *Schrödinger* correspondiente a un par electrón-hueco, en la aproximación de masa efectiva, para una estructura formada por un triple pozo cuántico asimétrico, incluyéndose los efectos de mezcla en la banda de valencia a través del empleo del hamiltoniano de *Luttinger* modificado.

La dinámica de excitones está básicamente determinada por tres periodos de oscilación diferentes, que están relacionados con el tuneleo de electrones en la banda de conducción y los huecos ligeros y pesados hibridizados en la banda de valencia. La mezcla provoca la transición de un proceso de tuneleo de hueco ligero, que controla las características iniciales de la emisión dipolar, a un proceso de tuneleo de hueco pesado. Estos procesos afectan la emisión en la banda de frecuencias de *teraHertz* de la estructura.

En este trabajo, se ha investigado la situación teórica de una doble resonancia, despreciando la evolución de otros niveles excitados no tuneleantes. Estos cálculos muestran la posibilidad de tener distintas clases de emisiones electromagnéticas en una misma estructura. El efecto de la mezcla de valencia parece controlar la emisión dipolar, lo que constituye un interesante fenómeno por la posibilidad de modulación en frecuencia y amplitud de la emisión dipolar de un dispositivo de estas características.

Capítulo III
Efectos de la densidad de portadores en el
tuneleo de excitones en un doble pozo cuántico
asimétrico

Capítulo III

Efectos de la densidad de portadores en el tuneo de excitones en un doble pozo cuántico asimétrico

Introducción

En el capítulo anterior, se ha analizado la dinámica asociada a excitones generados por fotoexcitación en el seno de un triple pozo cuántico asimétrico, con un momento $\hbar\vec{k}_{\text{Iexc}} \neq \vec{0}$, lo que ha permitido introducir efectos de hibridización de estados de hueco en la banda de valencia. Este capítulo se centrará en el estudio de fenómenos relacionados con excitones de momento $\hbar\vec{k}_{\text{Iexc}} \approx \vec{0}$. Estos elementos tienen la interesante capacidad de radiar en la dirección perpendicular al pozo cuántico lo que puede ser aplicado en microcavidades planas.

Hasta el presente, los excitones han sido generados mediante bombeo óptico de muestras: el hueco generado en la banda de valencia forma el excitón junto al electrón que ha saltado a la banda de conducción. En un reciente estudio^[46] teórico y experimental se ha demostrado la posibilidad de creación directa de excitones con $\hbar\vec{k}_{\text{Iexc}} \approx \vec{0}$ en un pozo cuántico mediante bombeo eléctrico. En este caso, el excitón no se genera por fotoexcitación, sino que es necesario inyectar huecos en la banda de valencia. Con este antecedente se considerará que la heteroestructura en estudio está formada por un doble pozo cuántico

asimétrico. El electrodo de la izquierda será un material semiconductor tipo n y el electrodo de la derecha, de tipo p . De este modo, los electrones tunelearán al pozo izquierdo procedentes del electrodo tipo n , cuando haya resonancia. Por otra parte, se supondrá que los huecos se difunden térmicamente hacia el pozo derecho con lo que se tendrá un proceso en el que hay implicadas dos partículas con interacción coulombiana electrón-hueco.

Bajo condiciones de resonancia el electrón asociado al excitón creado oscilará entre los pozos izquierdo y derecho. Para ello, es necesaria la aplicación de un campo eléctrico externo. La variación del momento dipolar con el tiempo supondrá la emisión de radiación electromagnética de THz hasta que, finalmente, se produzca la recombinación.

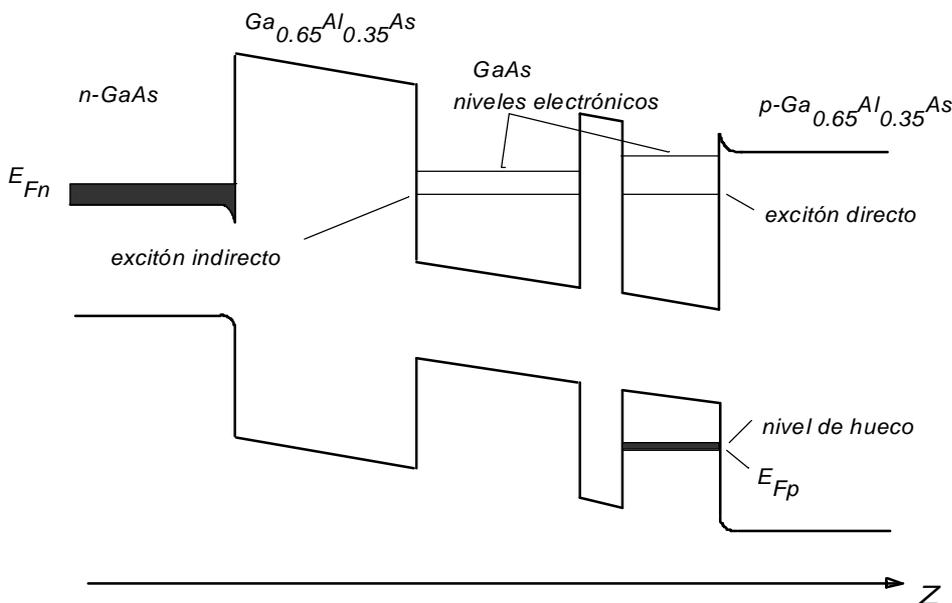


figura 3.1.- Esquema del doble pozo que se utilizará en este estudio.

El proceso se desarrolla en dos pasos: primero el electrón tunelea al pozo de la izquierda formando un excitón *interpozo*, o *indirecto*, con el hueco, que se sitúa en el pozo de la derecha. En el segundo paso, si la condición de resonancia del excitón tuneleante entre ambos pozos coincide, para el mismo campo eléctrico, con la condición de resonancia entre el estado de electrón libre del electrodo tipo n y el estado del electrón asociado al excitón en el pozo izquierdo, se producirá el tuneleo entre ambos pozos formándose, consecuentemente, un excitón *intrapozo*, o *directo*, que oscilará antes de su recombinación. Esta hipótesis de partida ha sido justificada previamente con cálculos realizados para densidades superficiales electrónicas de 10^{10}cm^{-2} , en los que no se han incluido procesos dispersivos asociados a los portadores^[47].

La inyección de portadores en los pozos supone alterar las condiciones de equilibrio, lo cual producirá una renormalización del *gap*: en esta situación las barreras de potencial efectivas de las interfaces sufrirán alteraciones, tal y como se tendrá ocasión de observar en las figuras que se presentarán en los próximos apartados (figuras 3.7 a 3.10). En este estudio, se demostrará que, cuando se aumenta la densidad superficial de portadores, la interacción de “muchos cuerpos” conducirá a la renormalización del nivel del estado asociado al excitón y, por lo tanto, se producirán ligeras variaciones en las condiciones de resonancia dependientes del valor de la densidad. A consecuencia de ello, el periodo correspondiente a las oscilaciones de carga variará también de un modo no monótono llevando a un comportamiento caótico por encima de determinados valores de las concentraciones de portadores.

Este problema es interesante desde un punto de vista tecnológico pues la distribución de portadores podría usarse para controlar las características de distintos dispositivos. En este trabajo se han despreciado otros procesos de *interacción de muchos cuerpos* tales como la ocupación en el espacio de las fases de las ondas planas en la dirección transversal. Estos procesos pueden ser importantes para densidades superficiales superiores a los 10^{11}cm^{-2} , valores que no se alcanzarán en este estudio, y por lo que se despreciarán.

En la literatura científica se pueden encontrar diversidad de estudios sobre la interacción de muchos cuerpos en dispositivos semiconductores^[48-54]. En particular, *Jona-Lasinio* y sus colaboradores usaron, para describir el estado del electrón, un modelo basado en una función de onda de una partícula que obedece a una ecuación de *Hartree* no lineal. En este contexto se empleaba un potencial de muchos cuerpos proporcional a la densidad de carga dentro de la doble barrera. En el presente estudio se propondrá un proceso excitónico variable en el tiempo en un doble pozo cuántico y dependiente de la densidad de portadores, incluyendo en las ecuaciones no sólo un potencial de *Hartree*, sino también uno asociado al canje y correlación. Otra diferencia significativa respecto al modelo propuesto por *Jona-Lasinio* se refiere a la forma del potencial de acumulación de carga: la interacción electrón-electrón tiene lugar para todos los valores de z .

A causa de que la estructura está encerrada entre barreras, los procesos serán considerados no disipativos.

Modelo

En esta sección se analizan los procesos excitónicos no disipativos y dependientes del tiempo, evaluando la evolución dinámica de los pares electrón-hueco excitónicos como una función de la densidad de portadores^[55]. El método de cálculo se basará en la discretización en el espacio y en el tiempo de las funciones de onda de los portadores. Inicialmente, se inyecta un grupo de electrones en el pozo izquierdo. La carga dinámicamente atrapada por la resonancia producirá un campo de reacción que modificará la evolución temporal del sistema. Si los grados de libertad longitudinal (en la dirección de crecimiento) y transversal están desacoplados, el problema se convierte en monodimensional permitiendo la factorización de la función de onda

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N; t) = \Phi(z_1, z_2, \dots, z_N; t) \Omega(\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_N; t) \quad (3.1)$$

donde $\vec{r}_i = (\rho_i, z_i)$ son las coordenadas del excitón *iésimo*. Se supone que el grupo inicial de electrones inyectados no está correlacionado para $t = 0$. Ésto corresponde a elegir Φ como el producto de cada una de las funciones de onda de los estados correspondientes a cada partícula, $\Psi(z, t)$.

Se ha simulado el electrón inyectado en el pozo izquierdo, que inicialmente se sitúa en el material tipo n , por un paquete de ondas gaussiano. El paquete de ondas del hueco permanece de partida en el pozo derecho. Después de cruzar la primera barrera, el electrón queda

atrapado por la interacción de *Coulomb* y forma un excitón *indirecto* con el hueco. Bajo condiciones de resonancia el paquete asociado al electrón excitónico es una superposición de dos autoestados en la banda de conducción, y por lo tanto, no es estacionario. De este modo, el electrón excitónico oscilará entre los pozos derecho e izquierdo, mientras que el paquete de ondas del hueco permanecerá en el pozo derecho. A esta situación hay que añadir la creada por una nube de electrones inyectados que están atrapados en los pozos y que afectan a la dinámica de las partículas componentes del excitón.

Con el fin de estudiar el proceso de tuneo se necesita resolver la ecuación de *Schrödinger* dependiente del tiempo, asociada al hamiltoniano del excitón dentro de la heteroestructura. Se despreciarán los efectos de espín. Esta ecuación puede expresarse a partir de la función de onda excitónica como

$$\Lambda \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h, t) \quad (3.2)$$

donde

$$\Lambda(\vec{r}_e, \vec{r}_h, t) = \Delta(\vec{r}_e, \vec{r}_h) + \sum_{i=e,h} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} + V_i(z_i) \right] + U_i(z_i, t) \quad (3.3)$$

y en el que el operador *bipartícula* \mathbf{D} puede expresarse como

$$\Delta(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = -\frac{\hbar^2}{2\mu_{xy}} \nabla_{xy}^2 - \frac{e^2}{\epsilon \sqrt{\rho^2 + (z_e - z_h)^2}} \quad (3.4)$$

Los subíndices e, h se refieren a electrones y huecos respectivamente. $V_e(z_e)$ y $V_h(z_h)$ son los potenciales de los pozos cuánticos, m_e^* y m_h^* son las masas efectivas, y m_{xy} es la masa reducida electrón-hueco en el plano x - y . Más adelante se despreciará el movimiento transversal de este operador que es relevante en los cálculos de la energía de ligadura del excitón. La energía potencial U_i puede expresarse como

$$U_i(z, t) = V_{H,i}(z, t) + V_{xc,i}(z, t) \quad (3.5)$$

El primer término recoge los efectos asociados a la distribución espacial de carga, y el segundo término, los correspondientes a canje y correlación.

Si se asume que cada electrón se mueve en un potencial autoconsistente, se necesita resolver las ecuaciones de *Schrödinger*, que se acaban de describir, acopladas a las ecuaciones de *Poisson*

$$\nabla^2 V_{H,i}(z, t) = -\frac{4\pi e}{\epsilon} (N_i |\Psi(z, t)|^2) \quad (3.6)$$

donde $V_H(z, t)$ es el potencial que ya se ha citado, y que recoge la contribución de la distribución de carga asociada a los portadores libres,

y_i es la función de onda normalizada de un electrón excitónico (o de un hueco) que ya se describirá más adelante, y N_i es la densidad superficial de electrones o huecos en el nivel correspondiente, que puede obtenerse a partir de la expresión

$$N_i (E_z) = 2 \int dE_{xy} D(E_{xy}) f(E_z, E_{xy}) \quad (3.7)$$

donde $D(E_{xy})$ representa la densidad local de estados que, en un sistema bidimensional, vale

$$D(E_{xy}) = \frac{m^*}{2\pi\hbar^2} \quad (3.8)$$

siendo, además, $f(E)$ la conocida función de distribución de *Fermi-Dirac*. De este modo,

$$N_i (E_z) = \frac{m^* k_B T}{\pi\hbar^2} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_z}{k_B T} \right) \right] \quad (3.9)$$

En la aproximación de *Hartree*^[51]

$$V_{H,e}(z, t) = \frac{4\pi e^2}{\epsilon} \int_{a_1}^z dz' \int_{a_1}^{z'} [n_h(z'', t) - n_e(z'', t)] dz'' \quad (3.10)$$

donde $V_{H,h}(z,t) = -V_{H,e}(z,t)$ y $n_i(z,t) = N_i |\Psi_i(z,t)|^2$ que se corresponde con la concentración de electrones, o de huecos, en el punto (z,t) .

El potencial asociado a canje y correlación puede expresarse usando el modelo de *Hedin-Lundqvist*^[48], que es válido sobre un amplio rango de valores del parámetro de densidad de un gas electrón-hueco,

$$V_{xc,i}(z,t) = - \left[1 + 0.0368 r_{s,i} \ln \left(1 + \frac{2I}{r_{s,i}} \right) \right] \frac{2}{\pi \alpha r_{s,i}} Ry \quad (3.11)$$

donde

$$\alpha = \left(\frac{4}{9\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.12)$$

es una constante. $r_{s,i}$ es el denominado parámetro de densidad

$$r_{s,i}(z,t) = \left[\frac{4}{3} \pi a^3 n_i(z,t) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad (3.13)$$

Este parámetro está asociado al radio de *Debye* de una partícula dentro de la nube electrónica, siendo a el radio de *Bohr* del excitón y Ry la constante de *Rydberg*. Esta formulación supone que la densidad de electrones, o huecos según sea el caso, cambia lentamente en la escala de la longitud de onda de *Fermi*. Este potencial procede de la energía de

canje y correlación^[49], obtenida del funcional densidad de carga, de tal modo que

$$V_{xc,i}(z,t) = \frac{\delta E_{xc}[n_e, n_h]}{\delta n_i(z)} \quad (3.14)$$

donde

$$E_{xc}[n_e, n_h] = \frac{1}{2} \int [n_e(z)\epsilon_{xc}(n_e(z)) + n_h(z)\epsilon_{xc}(n_h(z))] dz \quad (3.15)$$

En esta expresión, ϵ_{xc} representa la energía de canje y correlación del par electrón-hueco para un sistema de electrones y huecos homogéneo y neutro. Hay varias aproximaciones para expresar esta energía^[50], pero la basada en el modelo de *Hedin-Lundqvist* lleva a una fórmula más fácil de manejar en los cálculos numéricos. Aunque se viola la condición de neutralidad local en este sistema, la expresión citada lleva a una buena aproximación para la energía de canje y correlación para $r_s > 6.0$. En sistemas densos electrón-hueco, la correlación entre el electrón y el hueco es pequeña y las contribuciones de las autoenergías de electrones y huecos son prácticamente iguales^[56]. Bajo estas condiciones puede considerarse que el electrón y el hueco contribuyen individualmente a la energía de canje y correlación, siendo posible dividir esta energía por igual entre electrones y huecos.

En general, la condición de neutralidad de la carga debe satisfacer la relación

$$\int n_e(z) dz = \int n_h(z) dz = N_i \quad (3.16)$$

siendo N_i la densidad superficial de portadores, y n_i la densidad volumétrica de portadores.

Despreciando la diferencia de las constantes dieléctricas para pozos y barreras, la ecuación de *Schrödinger* correspondiente puede simplificarse mediante la aproximación

$$\Phi(z_e, z_h) = \psi(z_e) \psi(z_h) \quad (3.17)$$

y, de este modo, obtener dos ecuaciones

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{\partial^2}{\partial z_e^2} + V_e(z_e) - eFz_e + U_e(z_e) + W_h(z_e) \right] \psi_e(z_e) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_e(z_e) \quad (3.18)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_h^*} \frac{\partial^2}{\partial z_h^2} + V_h(z_h) - eFz_h + U_h(z_h) + W_e(z_h) \right] \psi_h(z_h) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_h(z_h)$$

que, sin embargo, tienen que resolverse simultáneamente pues los términos correspondientes a los potenciales $U_i(z_i)$ y $W_i(z_i)$ acoplan las funciones de onda de electrón y hueco.

En las expresiones que acaban de citarse,

$$W_i(z) = \int dz' \psi_i^2(z') W(z - z') \quad (3.19)$$

y

$$W(z) = \int_0^\infty d\rho \rho \left[\frac{\hbar}{2\mu_{xy}} [\partial_\rho \phi(\rho)]^2 - \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{\rho^2 + z^2}} \phi^2(\rho) \right] \quad (3.20)$$

Al igual que en el capítulo anterior, para simplificar los cálculos se ha usado el *ansatz*

$$\phi(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{I}{\lambda} e^{-\frac{\rho}{\lambda}} \quad (3.21)$$

para el movimiento en el plano excitónico, siendo I un parámetro variacional que se ajusta para minimizar la energía de ligadura para cada valor de la densidad y para cada paso de tiempo. Debido a que el valor de este parámetro es cercano al de la longitud de apantallamiento de *Debye*, a_D , se ha preferido hacer la sustitución con el fin de evitar el cálculo de minimización. La longitud de apantallamiento de *Debye* se define como

$$a_D = \left[\frac{\epsilon k_B T N_c}{e^2 N_e N_h} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.22)$$

donde $N_{e,h}$ son las densidades de electrones y huecos respectivamente, y N_c es la densidad efectiva de estados de la banda de conducción. De este modo se pueden incluir los efectos de apantallamiento de *Coulomb*. Tal apantallamiento es importante para densidades superficiales mayores de 10^9 cm^{-2} [57].

Para facilitar el cálculo numérico y su transcripción a un programa informático en un *PC*, se pueden transformar estas ecuaciones mediante la discretización temporal y espacial. La caracterización de tales variables vendrá dada por un superíndice n para el tiempo y los subíndices j y k para la coordenada espacial en las bandas de conducción y valencia respectivamente. Así, la notación sufrirá las siguientes transformaciones: $\Psi_e \rightarrow \kappa_j^n$ para la función de onda del electrón y $\Psi_h \rightarrow \varphi_k^n$ para la del hueco, $z_e \rightarrow j\delta z$ para la posición en la dirección z del electrón y $z_h \rightarrow k\delta z$ para el caso del hueco. En ambos casos, δz representa la unidad elemental de discretización espacial. Del mismo modo, para el tiempo la transformación será $t \rightarrow n\delta t$. Para tratar con evolución temporal, se usará un esquema de propagación unitario para el operador evolución, tanto en la banda de valencia como en la banda de conducción^[28,58]. De esta manera, se obtendrá un sistema lineal tridiagonal que se resolverá mediante métodos numéricos .

En este estudio se partirá de un par electrón-hueco acoplado creado en $t = 0$. A partir de esta condición, se resolverá numéricamente el sistema de ecuaciones descrito, empleándose para ello $\delta z = 0.5 \text{ \AA}$ y $\delta t = 1 \text{ fs}$, estando todo el sistema en una caja suficientemente grande (2000 \AA) para poder despreciar efectos de bordes.

A determinado campo eléctrico, los niveles de energía del electrón excitónico de los pozos derecho e izquierdo estarán alineados en la banda de conducción, mientras que, en la banda de valencia, el nivel del hueco

estará principalmente localizado en el pozo derecho. Así pues, la densidad de carga del electrón oscilará en su banda con un determinado periodo de tuneo, y el hueco permanecerá localizado. En este tratamiento se han despreciado los efectos de mezcla en la banda de valencia^[59]. Tal aproximación está bien justificada por la estructura de potencial seleccionada^[56].

La integración en el tiempo va a permitir obtener las posiciones promediadas del electrón y del hueco $\langle z \rangle_{ab}^{e,h}$ y la densidad de carga $Q_{ab}^{e,h}$ en una determinada región de la heteroestructura $[a,b]$ y para un valor del tiempo concreto^[28]

$$\begin{aligned} \langle z \rangle_{ab}^{e,h}(t) &= \int_a^b dz_{e,h} \left| \Psi^{e,h}(z_{e,h}, t) \right|_{z_{e,h}}^2 \\ & \hspace{15em} (3.23) \\ Q_{ab}^{e,h}(t) &= \int_a^b dz_{e,h} \left| \Psi^{e,h}(z_{e,h}, t) \right|^2 \end{aligned}$$

Como la posición y la función de onda dependen de t , los potenciales de *Hartree* y de canje y correlación, que determinan mayoritariamente las no linealidades en la evolución del excitón, dependerán también de t y, por tanto, afectarán de forma recíproca a la posición y la función de onda. Es, pues, necesaria la autoconsistencia en cada paso del tiempo para el cálculo de $\langle z \rangle_{ab}^{e,h}$ y de $Q_{ab}^{e,h}$. Para cada valor de t la energía de ligadura del excitón vendrá dada por

$$E_b(t) = \int_{z_h} dz_h \psi^2(z_h) W_e(z_h, t) \quad (3.24)$$

Resultados y discusiones

En este trabajo se ha considerado un doble pozo cuántico asimétrico. El electrodo de la izquierda es una capa semiconductora de *GaAs* con dopado tipo *n*. 100\AA de $Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ separan este electrodo del pozo cuántico de la izquierda que es de *GaAs* y posee un espesor de 80\AA . La secuencia de capas siguientes es: 25\AA de una barrera de $Ga_{0.65}Al_{0.35}As$, 58\AA de *GaAs*, que constituye el pozo cuántico de la derecha. Finalmente viene el electrodo derecho que está formado por una capa de $Ga_{0.65}Al_{0.35}As$ con dopaje tipo *p*. Los anchos han sido elegidos de modo que se produzca en la banda de conducción, para el mismo valor del campo eléctrico, la resonancia entre los niveles, en los pozos, del electrón excitónico y la correspondiente al electrón libre procedente del electrodo izquierdo. En la referencia [59] se ha utilizado una concentración de átomos donadores de $4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ en el electrodo izquierdo y una concentración de átomos aceptores de $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en el electrodo derecho (como ya se ha comentado los huecos pasarán al electrodo derecho por difusión térmica). En este estudio se han variado estas concentraciones con el fin de analizar los efectos de la densidad de carga. Asimismo, se han supuesto unas masas efectivas $m_e^* = 0.067m_0$ para el electrón, en la banda de conducción, y $m_h^* = 0.7m_0$ para el hueco pesado, en la banda de valencia.

Una importante característica, que ya se ha mencionado, es la relación entre el número de oscilaciones y la concentración electrónica. Para densidades superficiales electrónicas inferiores a 10^9 cm^{-2} el comportamiento oscilatorio persiste prácticamente inalterado durante un largo período de tiempo, debido a que la contribución de muchos cuerpos es muy baja. En este caso, la separación entre los dos niveles resonantes no varía de manera apreciable. Más allá de este último valor de la concentración, el corrimiento de la resonancia da lugar a que parte de la carga electrónica que ha pasado a través del canal tuneleante al pozo derecho quede parcialmente retenida en el mismo. La magnitud de la carga restante depende de la concentración de portadores. Sólo unos pocos periodos subsisten antes de que la oscilación se convierta en aperiódica.

El efecto, pues, de la concentración de electrones es que parte de la densidad de carga excitónica oscile, mientras que el resto queda atrapada en ambos pozos. Para una densidad superficial electrónica superior a 10^{11} cm^{-2} el régimen periódico tiende a desaparecer y se transforma en caótico.

La figura 3.2 representa la renormalización de la separación de los niveles resonantes para diferentes concentraciones de carga y para el instante $t = 80fs$. Las condiciones de resonancia se dan a diferentes campos eléctricos para cada densidad de portadores.

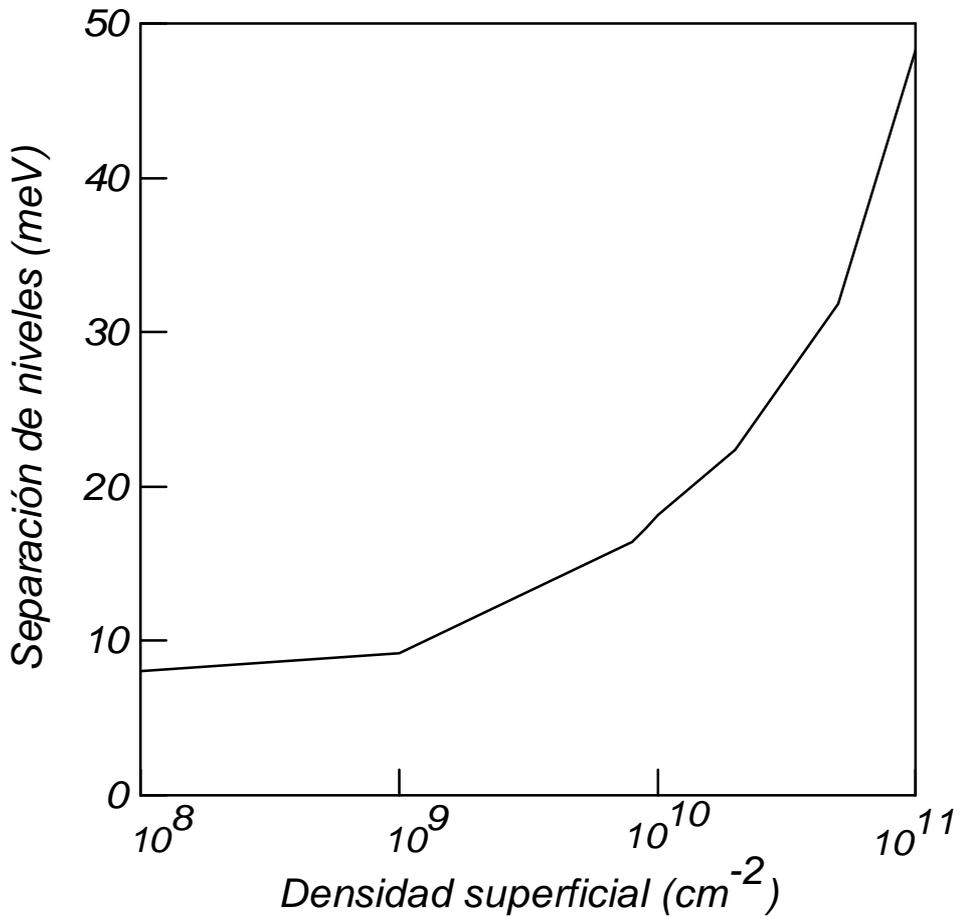


figura 3.2.- Variación de la separación de niveles en el estado resonante correspondiente al electrón excitónico.

En las siguientes figuras se han dibujado perfiles de potenciales de la estructura en estudio a partir de distintos valores de la densidad superficial electrónica y para un tiempo fijo de $80fs$.

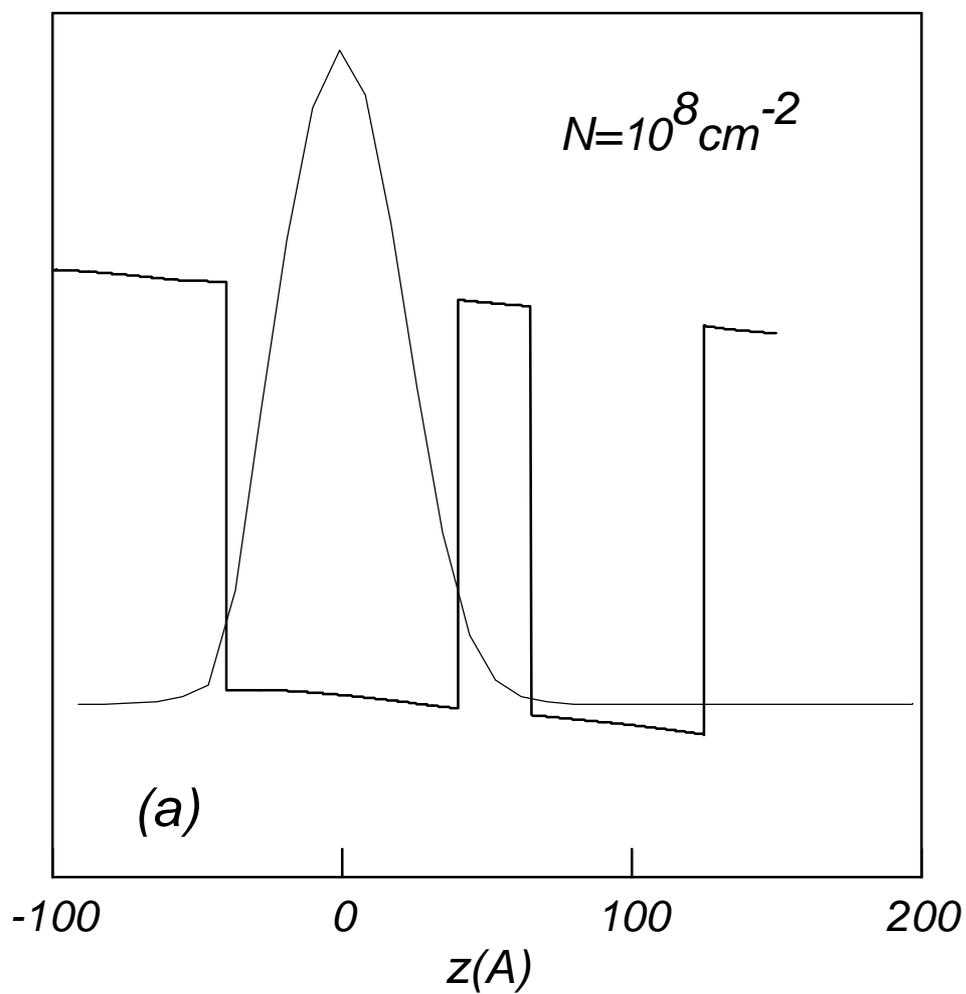


figura 3.3.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^8 \text{ cm}^{-2}$ y $t = 80 \text{ fs}$.

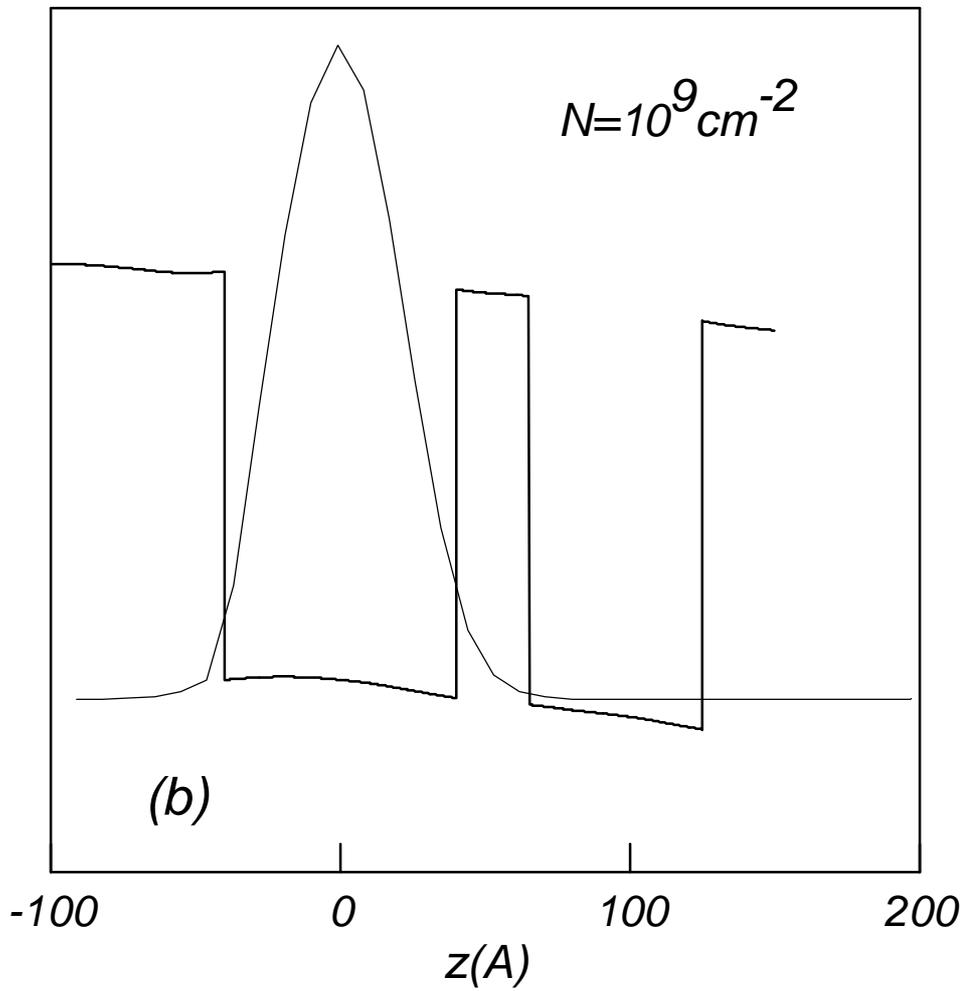


figura 3.4.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^9 \text{ cm}^{-2}$ y $t = 80 \text{ fs}$.

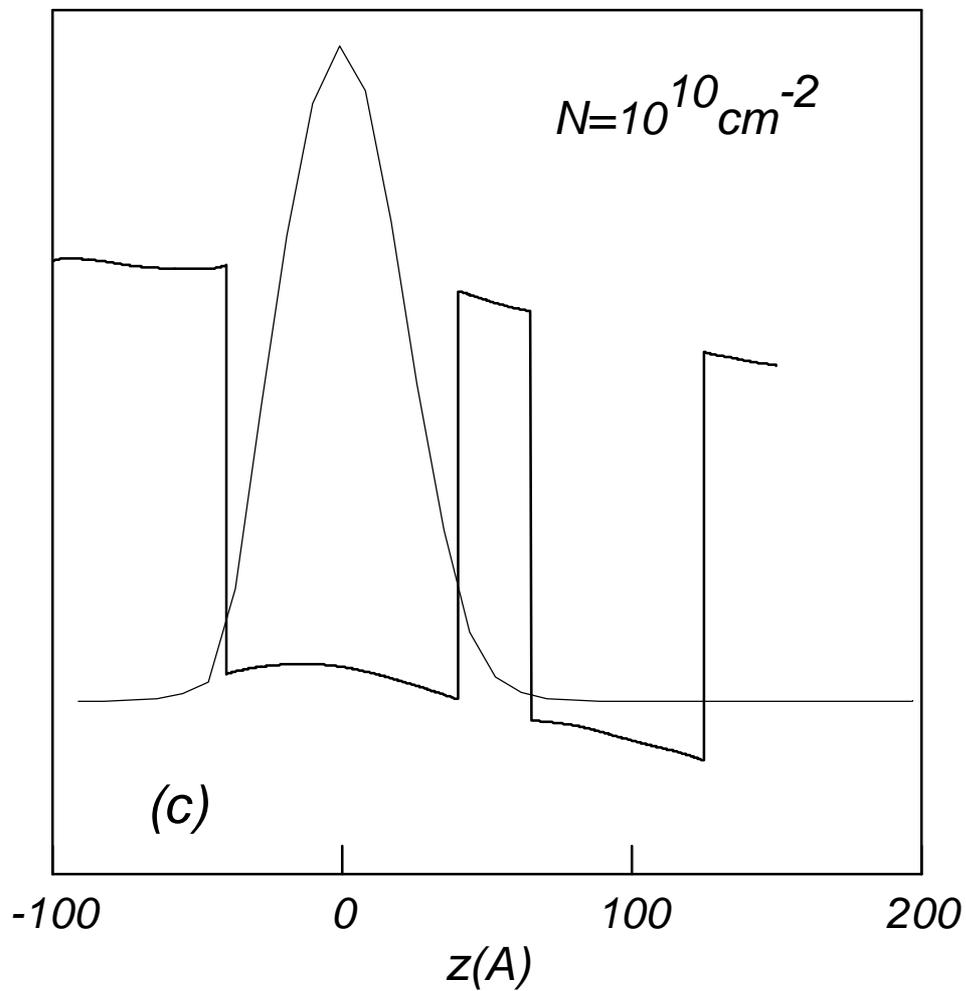


figura 3.5.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $t = 80 \text{ fs}$.

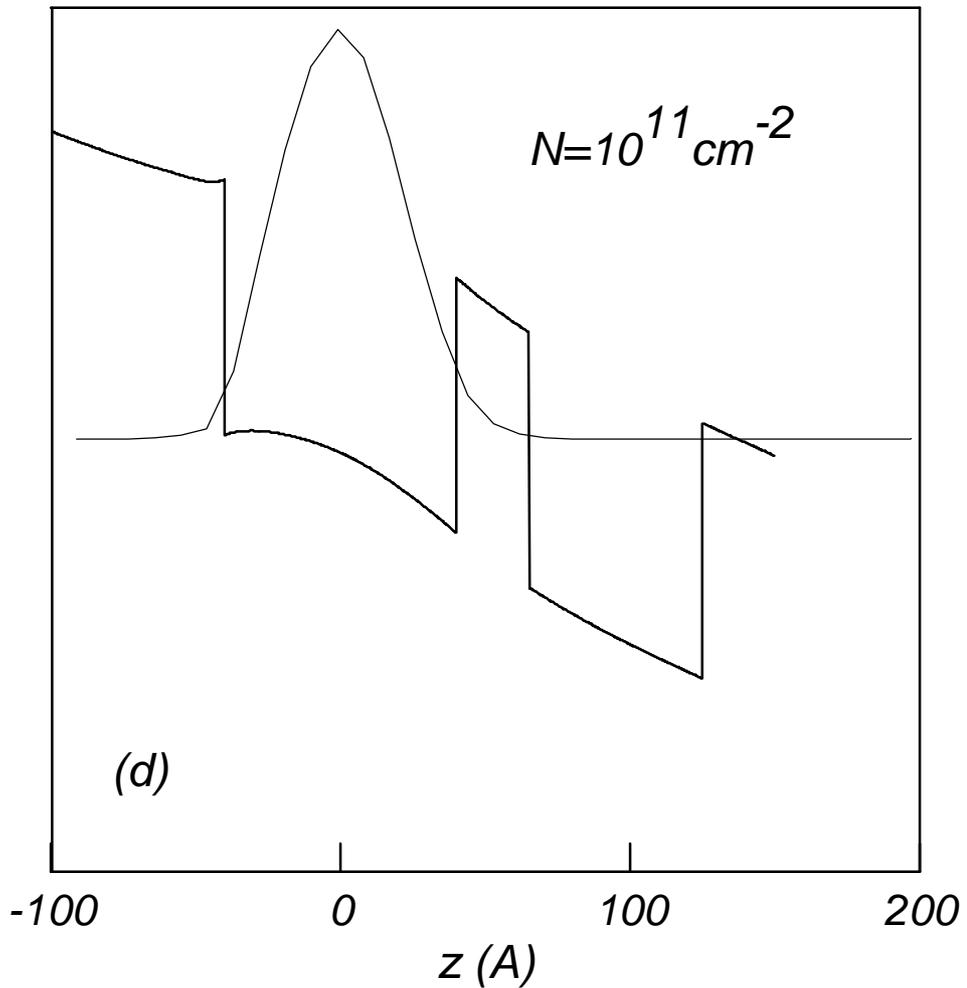


figura 3.6.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $t = 80 \text{ fs}$.

Ahora se ha fijado la densidad de portadores en 10^{11} cm^{-2} y se ha representado los perfiles de potencial para distintos valores del tiempo obteniéndose las siguientes gráficas:

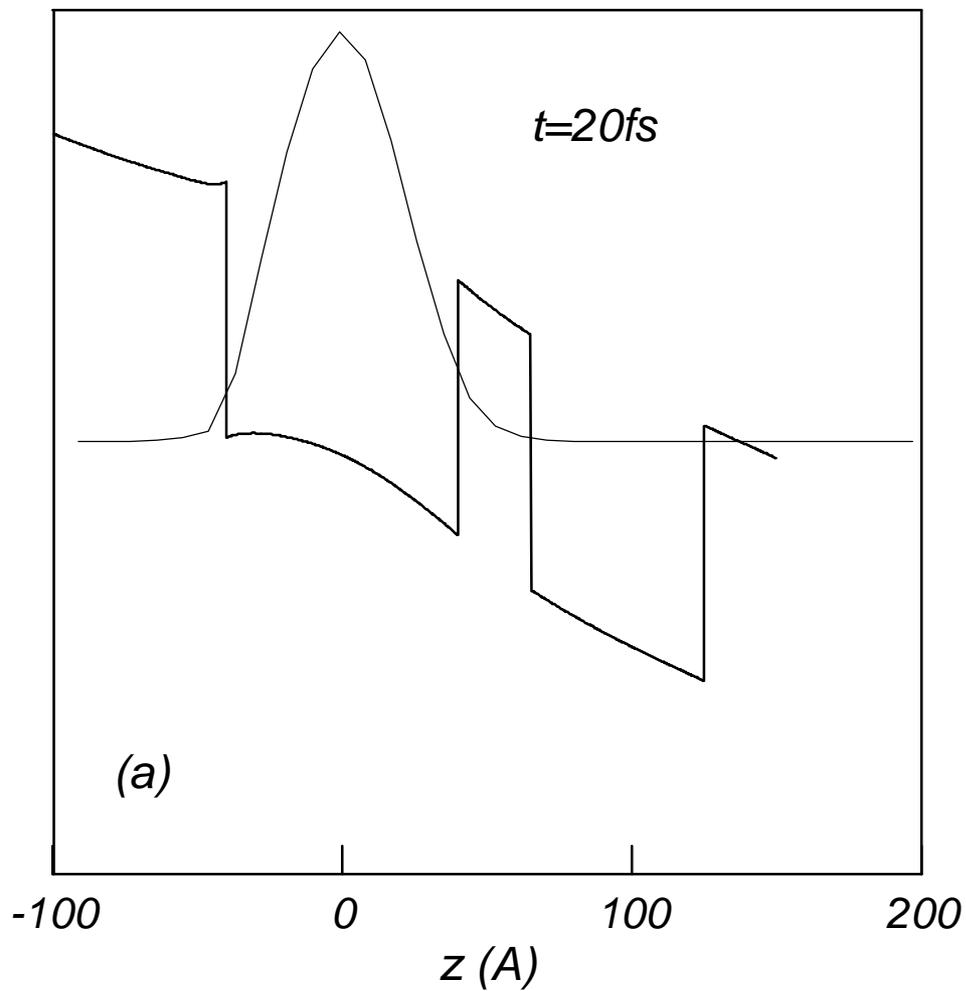


figura 3.7.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $t = 20 \text{ fs}$.

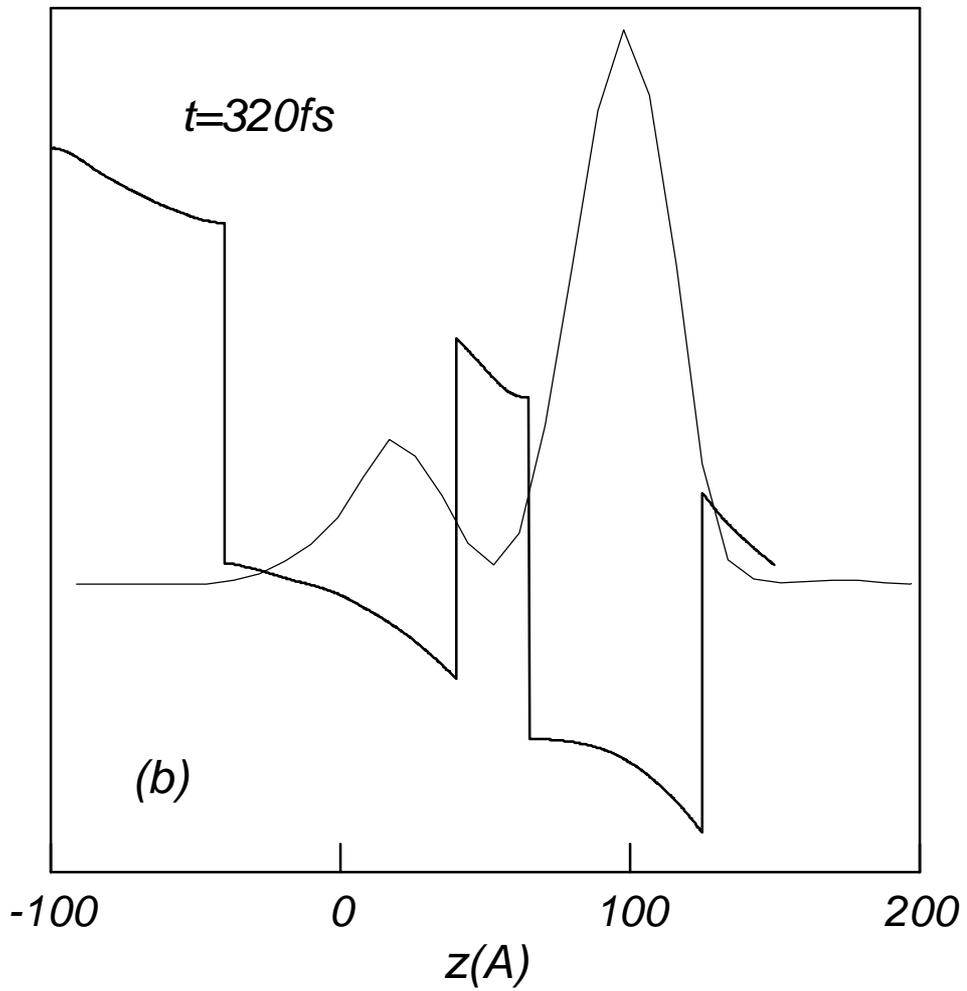


figura 3.8.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $t = 320 \text{ fs}$

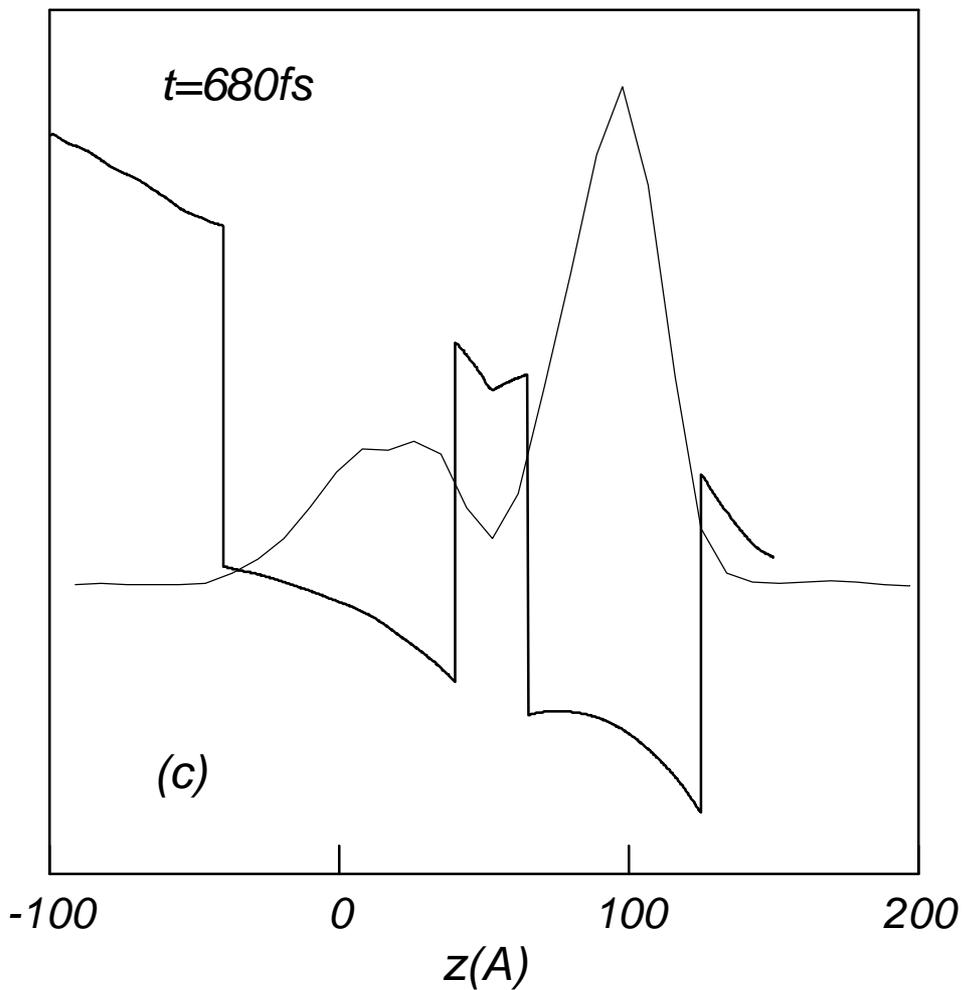


figura 3.9.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $t = 680 \text{ fs}$

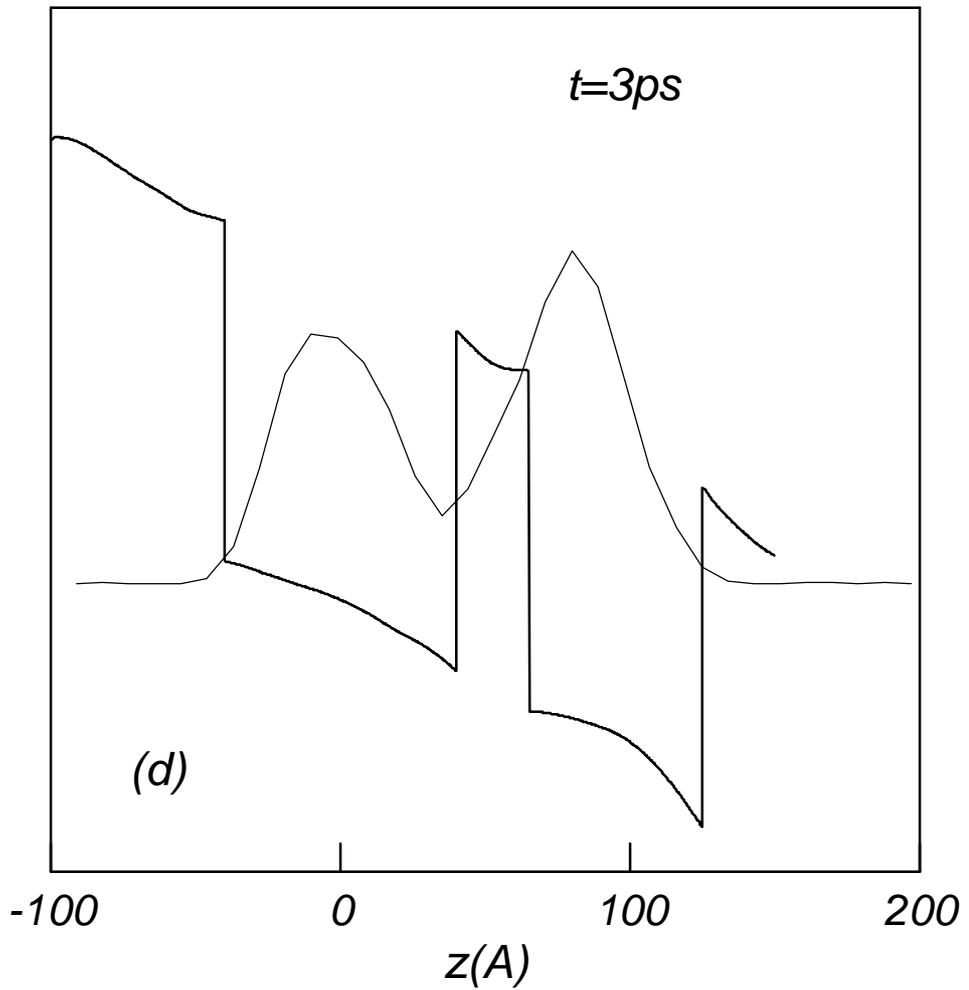


figura 3.10.- Función de onda del electrón excitónico junto al perfil de potencial de la estructura para $N = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $t = 3ps$

En estas figuras, la curvatura del fondo de los pozos refleja la transferencia de carga entre pozos. Se ha superpuesto la función de onda excitónica para que sirva de guía.

En las siguientes figuras se ha representado la densidad de carga electrónica en el pozo izquierdo, $Q_{ab}^e(t)$ siendo a y b los límites del mismo.

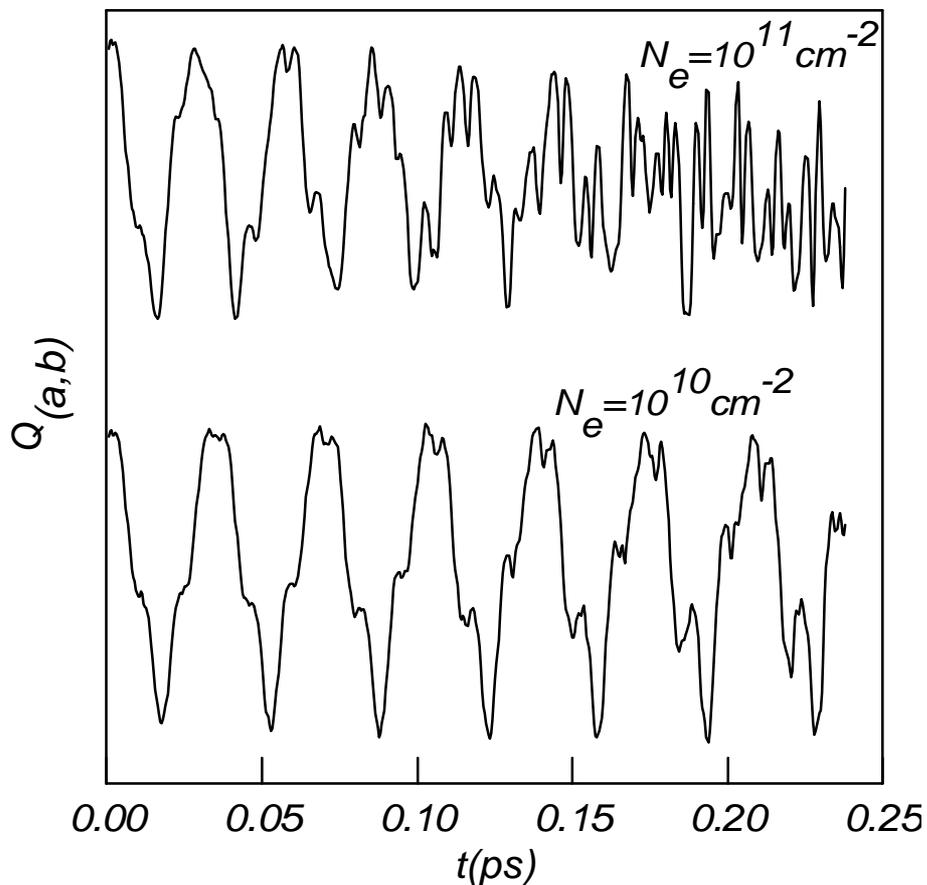


figura 3.11.-Evolución de la carga electrónica del pozo izquierdo.

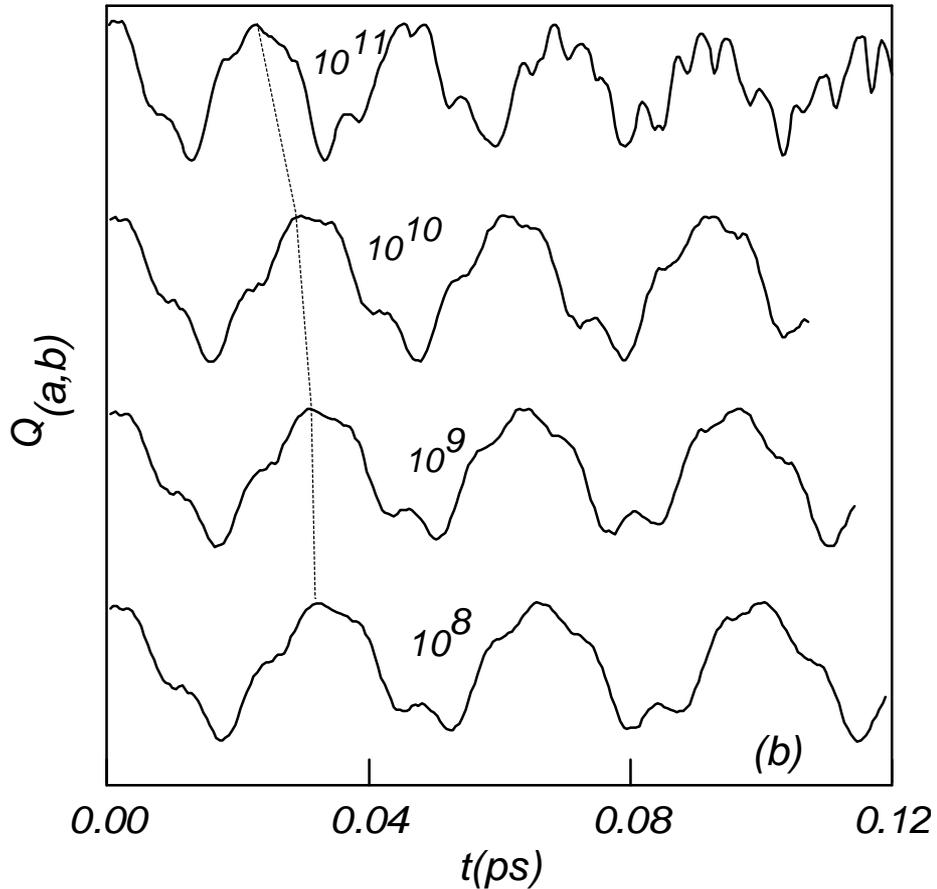


figura 3.12.- Evolución de la carga electrónica del pozo izquierdo.

En ellas se muestran, para dos densidades electrónicas distintas, las oscilaciones del paquete de ondas del electrón excitónico cuando el electrón libre está inicialmente situado en el centro del pozo cuántico de la izquierda. Por razones de claridad, se ha desplazado la segunda curva respecto a la primera. Para una densidad superficial de 10^{10} cm^{-2} el electrón excitónico puede realizar decenas de oscilaciones sin distorsión apreciable; o sea, la periodicidad persiste por un largo período de tiempo. Para 10^{11} cm^{-2} sólo se observa un par de oscilaciones sin distorsión,

perdiéndose la periodicidad pasadas cuatro oscilaciones. El período de oscilación puede determinarse fácilmente con el simple análisis de la posición de los picos en las curvas mostradas. Las oscilaciones excitónicas tienen pequeñas asimetrías^[60] que no son observables en estas figuras y que se deben a la interacción electrón-hueco. Se aprecia claramente que el período de oscilación disminuye conforme aumenta la densidad. Además, se puede deducir de las gráficas que el efecto de muchos cuerpos es irrelevante para bajas concentraciones de carga. Esta situación puede explicarse usando los siguientes argumentos: el potencial de carga espacial es una consecuencia de la diferencia existente entre la distribución espacial de electrones y huecos. En el sistema propuesto, los electrones no están localizados y los huecos si lo están dentro del pozo derecho. El potencial de carga espacial es repulsivo para los huecos localizados y atractivo para electrones. Por otra parte, la energía de canje y correlación es negativa, aumentando su valor con la densidad de portadores. En otras palabras, el potencial de canje y correlación es atractivo tanto para electrones como para huecos.

Para obtener una distribución precisa de portadores hay que incluir potenciales de canje y correlación autoconsistentes. A consecuencia de ello, para bajas concentraciones, la interacción electrón-hueco domina sobre la repulsión entre electrones y entre huecos. Este hecho ha sido puesto de manifiesto en la referencia [60] donde se ha incluido la interacción coulombiana de electrón-hueco. Un incremento del número de portadores contribuye a aumentar la parte repulsiva de la contribución de tipo *Hartree*, hasta el punto de igualar la atracción coulombiana y de canje y correlación. A partir de este punto el período de

oscilación se vuelve decreciente, como se puede observar en la siguiente figura.

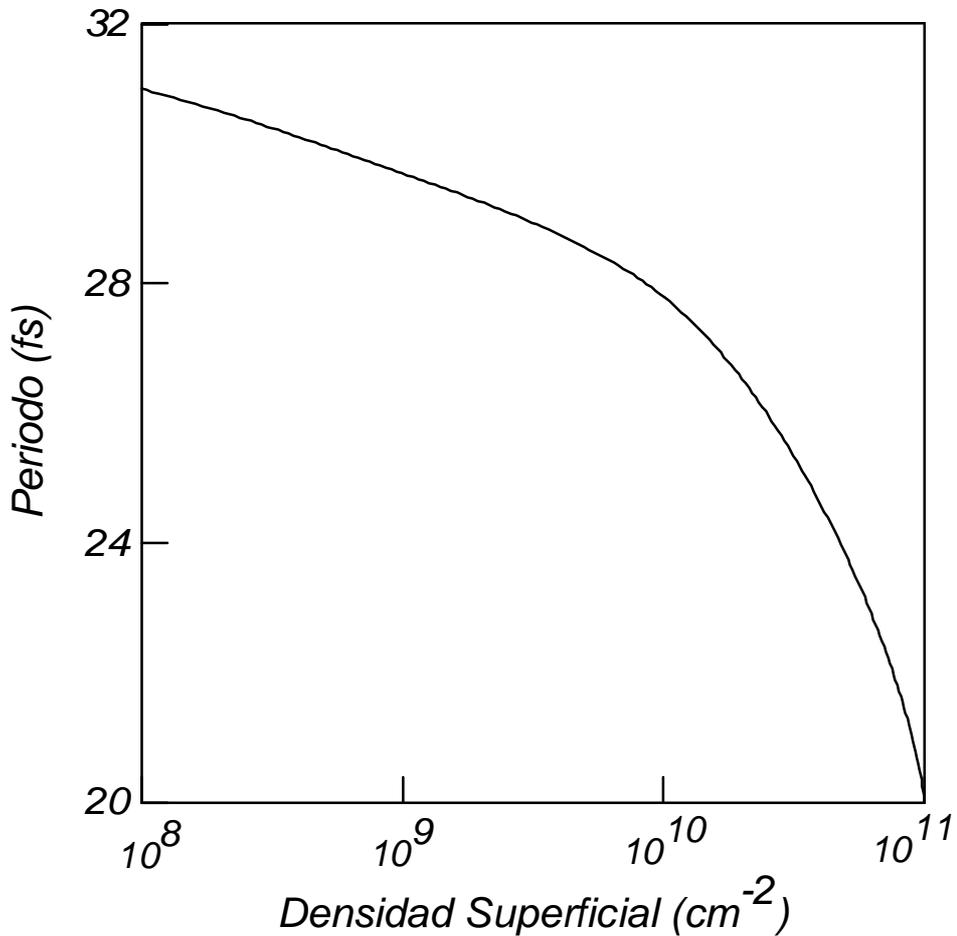


figura 3.13.- Variación del periodo de oscilación con la densidad superficial.

Estos resultados están bastante de acuerdo con los de Raichev^[29] para portadores fotoexcitados. La amplitud de oscilación también disminuye con la concentración de portadores. Para un valor de 10^{11} cm^{-2} la amplitud se reduce en un 50%, pasado un picosegundo.

Como ya se ha comentado, para bajas densidades electrónicas, la periodicidad permanece hasta decenas de ciclos. Cuando la densidad de carga aumenta aún más, el número de oscilaciones periódicas disminuye hasta que llega a desaparecer. Se puede concluir que los valores más adecuados para la estructura en estudio son los comprendidos entre 10^9 cm^{-2} y 10^{10} cm^{-2} .

Otro efecto complementario de la densidad de portadores es que la parte repulsiva de la interacción de muchos cuerpos impedirá la formación de excitones debido al apantallamiento de portadores. Para un valor de la densidad superficial de portadores cercano a $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ se produce una rápida disminución de la energía de ligadura excitónica tal y como puede apreciarse en la figura 3.14.

En dobles pozos cuánticos asimétricos sometidos a un campo eléctrico externo, la ligadura entre el electrón y el hueco de un excitón varía cuando el excitón cambia de *indirecto* a *directo*^[47]. A causa de que el nivel del excitón es muy cercano al nivel del electrón libre en el pozo cuántico de la izquierda, la merma de la energía de ligadura lleva a un incremento de la densidad de electrones libres coexistiendo con excitones espacialmente indirectos. Esta mayor densidad de portadores reduce aún más la energía de ligadura del excitón. Para densidades superiores a $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ se obtiene un valor de la energía de plasma electrón-hueco más grande que el de la energía de ligadura del excitón. Por ello, para valores altos de la densidad de portadores, se prevé una transición de *gas de portadores* a *fluido de portadores*. Finalmente, la energía de ligadura

del excitón indirecto toma un valor cero para densidades superiores a $2.5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

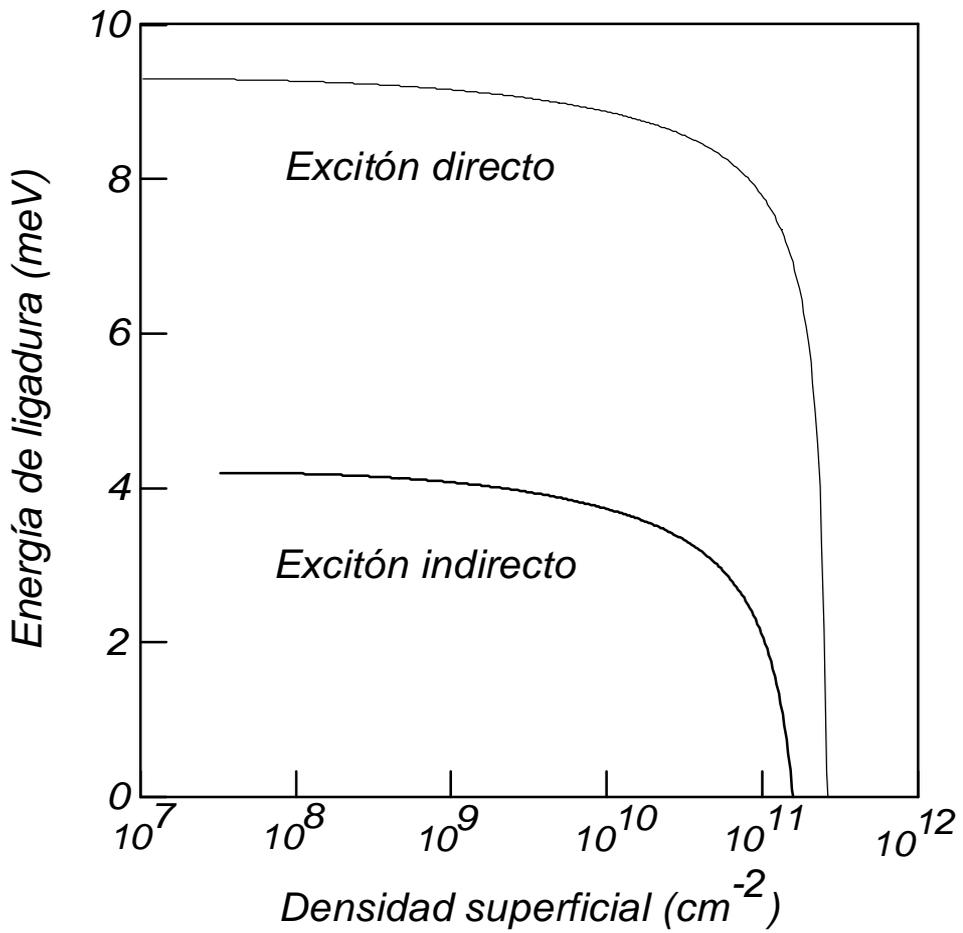


figura 3.14.- Efecto de la interacción de muchos cuerpos sobre la formación de excitones.

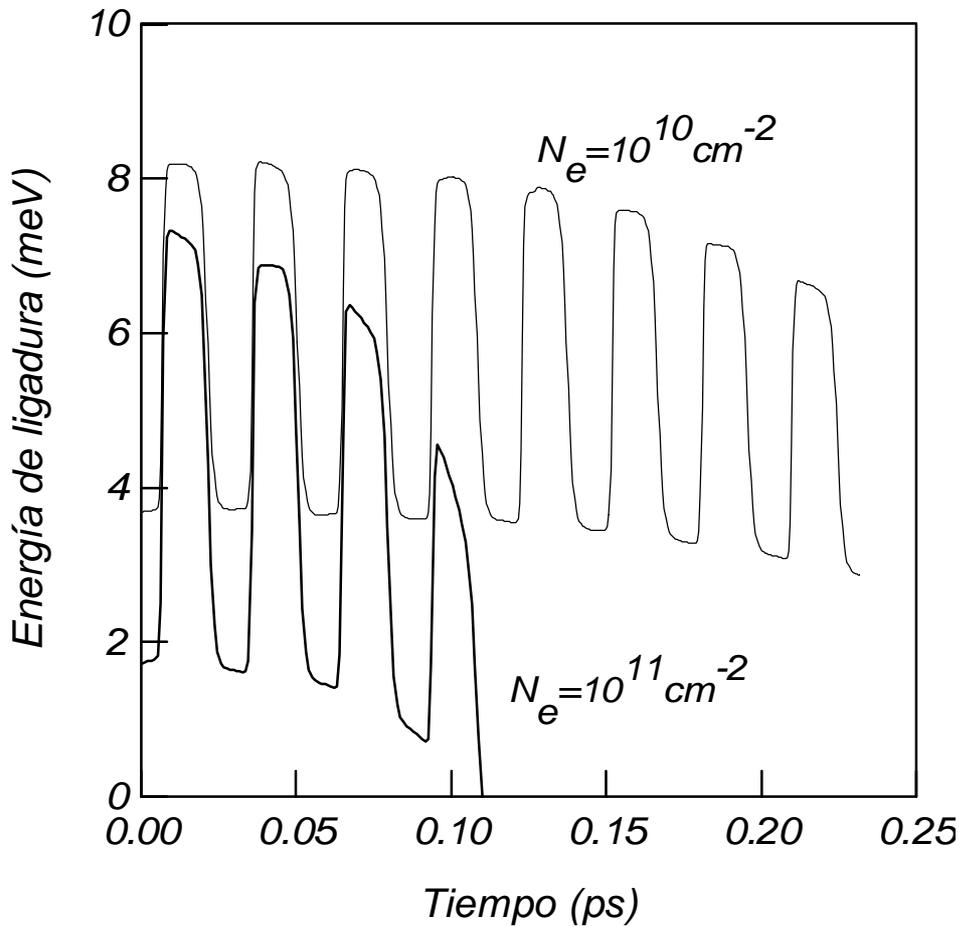


figura 3.15.- Evolución de la energía de ligadura del excitón indirecto.

De este modo, puede encontrarse un doble pozo cuántico asimétrico sin excitones bajo altos valores de la concentración de portadores quedando un estado asociado al plasma de electrones y huecos. La transición descrita es muy similar a la *transición de Mott* para portadores fotoexcitados que ocurre cuando la densidad excitónica es tal que

$$N_{ex} \approx \frac{I}{\pi a_b^2} \quad (3.25)$$

En ambos casos existe una transición de fase de un estado donde coexisten los excitones y los portadores libres, a otro de plasma de electrones y huecos. Esta transición de fase puede ser también concebida en términos de una dispersión entre excitones y portadores libres. Es importante mencionar que la densidad excitónica N_{ex} depende de la densidad de huecos en el pozo cuántico de la derecha y de la densidad electrónica en el contacto n -GaAs. Para muy altos valores de la densidad de huecos en el pozo cuántico de la derecha, el efecto de apantallamiento del gas de huecos podría evitar la creación de excitones por la interacción que se ha mencionado. Para prevenir los efectos de apantallamiento, *Cao y al.* estimaron^[46] que la densidad superficial de huecos en el pozo cuántico debería ser menor de $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Se puede contrastar este valor y el obtenido en este estudio, en términos de la interacción de líquido de electrones y huecos como el propuesto por *Vashista y Kalid*^[52]. Estos autores ajustaron el valor de la energía de canje y correlación en semiconductores $\epsilon_{xc}(r_s)$ para un rango amplio de valores de r_s , usando para ello la expresión

$$\epsilon_{xc}(r_s) = \frac{a + br_s}{c + dr_s + r_s^2} Ry \quad (3.26)$$

siendo a , b , c y d valores dados en la referencia [52]. En este trabajo se han reconstruido los resultados para densidades comprendidas entre

$1 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ y $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Se observa un retardo en el régimen de las oscilaciones de carga aperiódicas para la segunda aproximación de muchos cuerpos respecto al caso de líquido de electrones y huecos. En esta última aproximación, sin embargo, la transición de la fase excitónica a la fase de plasma de electrones y huecos ocurre a densidades mayores ($10^9 \text{ cm}^{-2} < N < 10^{12} \text{ cm}^{-2}$) lo que está de acuerdo con las estimaciones realizadas en la referencia [46]. Otra posibilidad de estudio que se podría plantear es la basada en la dinámica de portadores en un régimen de alta densidad y que utilizaría los conceptos de la hidrodinámica cuántica.

Por último, se pueden mencionar otros efectos que contribuyen a las oscilaciones de carga detectadas experimentalmente. Primero, la interacción de los electrones excitónicos con los fonones existentes para una determinada temperatura. La dispersión ocasionada por la interacción con los fonones lineales ópticos reduce la vida media de los excitones generados^[60] y el número de eventos de tuneleo. Segundo, la amplitud de oscilación de la carga excitónica en un sistema abierto y disipativo (o sea, el producto de la concentración de excitones creados directamente por las oscilaciones de carga del electrón excitónico) puede verse fuertemente atenuada por la dispersión elástica de los excitones. Este efecto ha sido calculado para electrones fotoexcitados en pozos cuánticos asimétricos acoplados^[45]. Así, el número de oscilaciones perceptibles se reduce a unas pocas decenas, en buen acuerdo con las medidas experimentales existentes^[30,44].

Conclusiones

En este estudio se ha analizado la evolución temporal de la concentración de excitones creados directamente en un sistema formado por un doble pozo cuántico asimétrico. Se ha integrado en el espacio y en el tiempo la ecuación de *Schrödinger* correspondiente.

Se ha obtenido la dinámica de excitones que está básicamente determinada por la concentración de portadores aún para materiales de *gap* estrecho.

La comparación de los resultados obtenidos con los de la referencia [60] muestra que, para densidades mayores de 10^8 cm^{-2} , el potencial de tipo *Hartree* cancela el efecto del potencial de *Coulomb* electrón-hueco y que el período de oscilación se vuelve decreciente. Con el fin de obtener un número razonable de oscilaciones periódicas se ha estimado una densidad de portadores comprendida entre 10^9 cm^{-2} y $2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$.

Las oscilaciones del electrón excitónico junto con el hueco confinado, llevarán a una radiación electromagnética coherente emergente del sistema de pozos cuánticos acoplados asimétricos, después del bombeo eléctrico. Teniendo en cuenta que la vida media para un par electrón-hueco en el *GaAs* es mayor de 100 ps , es posible la observación experimental de tal proceso.

El método empleado aquí es también aplicable a otras situaciones físicas tales como oscilaciones de portadores fotoexcitados o sistemas disipativos. Del mismo modo, magnitudes como la densidad de corriente, que traducida a radiación de *THz*, puede calcularse directamente con este método.

Conclusiones finales

En la presente memoria se ha pretendido describir de una manera sencilla una serie de procesos asociados a fenómenos de tuneleo en heteroestructuras diseñadas con compuestos semiconductores, en especial, de *arseniuro de galio*, *arseniuro de galio-aluminio* ($AsGa-Al_xGa_{1-x}As$). Este material posee una estructura cristalina prácticamente continua y un *gap* directo lo que facilita la realización de los trabajos.

Se ha conseguido dar cobertura a los objetivos planteados en el proyecto de tesis que ha dado origen a esta memoria:

- Se ha realizado un estudio comparativo de las características *corriente-voltaje* ($I-V$) asociadas a procesos de tuneleo de electrones en la banda de conducción de un pozo cuántico rectangular y de un pozo parabólico, formados por heteroestructuras de $GaAs-Al_xGa_{1-x}As$, a las que se han sometido a distintos campos eléctricos y magnéticos. Basándose en argumentaciones teóricas previas, se ha evaluado la importancia de los procesos dispersivos asociados a interfaces rugosas y a la interacción electrón-fonón como justificación de la reducción de los valores esperados de la relación “*pico-valle*” en el diagrama de corriente de tales dispositivos.

- Se ha acometido el estudio de la emisión de radiación excitónica dipolar de THz asociada a un triple pozo cuántico rectangular asimétrico fotoexcitado y sometido a campos eléctricos externos. Se ha realizado el análisis de los efectos de hibridización de los estados de hueco ligero y de hueco pesado en la banda de valencia. Se ha hecho una comparación con los resultados obtenidos por otros autores respecto a la evolución de los periodos de oscilación excitónicos esperados.

- Finalmente, se ha trabajado sobre los efectos de apantallamiento en la banda de conducción asociados a los potenciales repulsivos de carga espacial y a los potenciales atractivos de canje y correlación que recogen la contribución de la distribución espacial de portadores libres. Estas contribuciones se han aplicado a un doble pozo cuántico rectangular asimétrico excitado por un campo eléctrico externo y se ha analizado su actuación sobre la emisión de radiación dipolar excitónica asociada. Se ha comparado con las observaciones y los cálculos realizados por otros autores.

De estos objetivos las contribuciones más significativas de esta memoria pueden resumirse en:

- 1^{er} objetivo.- Se ha aplicado la dinámica de electrones a estructuras más complicadas de las que habitualmente se encuentran en la literatura científica y que prácticamente de limitan a simples o dobles pozos cuánticos rectangulares. En

concreto, se ha empleado un pozo parabólico por poseer una distribución de niveles energéticos muy peculiar. Se han comparado los resultados en el caso de un simple pozo rectangular para justificar la bondad del método seguido.

- 2º objetivo.- Se ha hecho el estudio simultáneo de procesos tuneo espacial y de mezcla en la banda de valencia cuando lo habitual es encontrar trabajos individuales de cada uno de estos fenómenos. Ésto ha permitido evaluar la modulación de la frecuencia de oscilación excitónica que conlleva la superposición de ambos procesos.

- 3º objetivo.- Por primera vez se ha realizado un estudio de evolución temporal, en un doble pozo cuántico rectangular, de fenómenos de apantallamiento y de canje y correlación, consiguiendo encontrar una justificación a la aniquilación de las oscilaciones excitónicas inducidas por electroexcitación, que han sido observadas experimentalmente. Asimismo, se ha analizado los efectos que la densidad de carga de portadores produce en tales oscilaciones.

Todos los trabajos incluidos en esta memoria han dado lugar a las siguientes comunicaciones en congresos y publicaciones:

➤ A. Hernández-Cabrera y A. Ramos

Comparación entre los métodos CSFG y TMA aplicados al cálculo de propiedades electrónicas en heteroestructuras no periódicas semiconductoras

XXV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física
(1995)

➤ A. Hernández-Cabrera, A. Ramos, P. Aceituno, H. Cruz, O. El Raichev and F. T. Vasko

Collisionless dynamics of photoexcited carriers in tunnel-coupled quantum wells

15TH General Conference of The Condensed Matter Division
(1996) (*Baveno, Italia*)

➤ A. Hernández-Cabrera, A. Ramos, H. Cruz and P. Aceituno

TeraHertz emission from direct created excitons in quantum wells

Advanced Workshop on Frontiers in Electronics (1997)
IEEE Publishing.

➤ A. Hernández-Cabrera and A. Ramos

Semi-analytical Calculation of the Current-Voltage Characteristics in any Layered Semiconductor Heterostructure under Electric and Magnetic Fields

Superlattices and Microstructures **23**, 521 (1998)

➤ A. Hernández-Cabrera and A. Ramos

Valence-band mixing effects on exciton dipole teraHertz emission from asymmetric triple quantum wells

J. Appl. Phys. **80**, 1547 (1996)

➤ A. Hernández-Cabrera, A. Ramos, H. Cruz and P. Aceituno

Carrier Density Effects on the Exciton Tunneling in Asymmetric Double Quantum Wells

(Pendiente de publicación) (1997)

Bibliografia

Referencias.-

- [1].- Claude Weisbuch, Borge Vinter, *Quantum semiconductor structures: fundamentals and applications*, Academic Press.
- [2].- L. Chang, L. Esaki, y R. Tsu, *Appl. Phys. Lett.* **24**, 593 (1974)
- [3].- R. Dingle in *Festkörperprobleme*, H. J. Queisser, Ed. Pergamon, Oxford (1975) vol. XV
- [4].- C. Cohen-Tanoudji, *Quantum Mechanical*, Ed. John Willey & Sons. Cap. 1
- [5].- R. Nag, Springer Series in *Solid-State Sciences* 11. Cap. 6
- [6].- Lindor E. Henrickson, Kazuhiko Hirakama, Jeffrey Frey, y Toshiaki Ikoma *J. Appl. Phys.* **71**, 3883 (1992)
- [7].- M. Altarelli, *Band Structure, Impurities and Excitons in Superlattices*. Proceeding of the Winter School. Les Houches. Ed. G. Hallen, G. Bastard, M. Boccarda, M. Lannoo y M. Voos. Springer Verlag, 1986.
- [8].- L. Esaki, L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **33**, 495 (1974)
- [9].- F. Capasso y R. A. Kiehl, *J. Appl. Phys.* **58**, 1366 (1985)

- [10] .- R. C. Miller, A. C. Gossard, D. A. Kleinman, y O. Munteanu, *Phys. Rev. B* **29**, 3740 (1984)
- [11] .- J. Menendez, A. Pinczuck, A. Gossard, M. G. Lamont y F. Cerdeira, *Solid State Commun.* **61**, 601 (1987)
- [12] .- A. C. Gossard, R. C. Miller y W. Wiegmann, *Surf. Sci.* **174**, 131 (1986)
- [13] .- James H. Luscombe, Raj Aggarwal, Mark A. Reed, William R. Frensley y Marshall Luban, *Phys. Rev. B* **44**, 5873 (1991)
- [14] .- Charles Kittel, *Introducción a la Física del Estado Sólido*, Ed. Reverté, Cap. 7 y 8.
- [15] .- H. Cruz, A. Hernández-Cabrera y P. Aceituno, *J. Phys.* **2**, 8953 (1990)
- [16] .- L. Brey, G. Platero y C. Tejedor, *Phys. Rev. B* **38**, 9649 (1988).
- [17] .- O. Olendski, *J. Phys. Cond. Matter* **5**, 5437 (1993).
- [18] .- M. Abramowitz y I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1964); I. E. Kireeva y K. A. Karpov, *Tables of Weber Functions*, vol. I (Pergamon, New York, 1961).

- [19] .- H. Cruz, F. Piazza y L. Pavesi, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 254 (1993)
- [20] .- H. Cruz, A. Hernández-Cabrera, y A. Muñoz, *Solid State Communications* **79**, 749 (1991)
- [21] .- Francis Chevoir y Borge Vinter, *Phys. Rev. B* **47**, 7260 (1993)
- [22] .- Peter Johanson, *Phys. Rev. B* **48**, 8938 (1993)
- [23] .- John D. Bruno y J. S. Hurley, *Superlattices and Microstructures* **11**, 23 (1992)
- [24] .- James Leo y A. H. Macdonald, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 817 (1990)
- [25] .- P. England, J. R. Hayes, M. Helm, J. P. Harbison, L.T. Florez, y S. J. Allen Jr, *Appl. Phys. Lett.* **54**, 1469 (1989)
- [26] .- K. M. Hung y G. Y. Wu, *Phys. Rev. B* **45**, 3461 (1992)
- [27] .- M. C. Nuss, P. C. M. Planken, L. Brener, H. G. Roskos, M. S. Luo. y S. L. Chuang, *Appl. Phys. B* **58**, 249 (1994)
- [28] .- A. Hernández-Cabrera, P. Aceituno y H. Cruz, *Phys Rev. B* **50**, 8878 (1994)
- [29] .- O. E. Raichev, *Phys. Rev. B* **51**, 17713 (1995)

- [30] .- E. Binder, T. Kuhn y G. Mahler, *Phys. Rev. B* **50**, 13319 (1994)
- [31] .- C. Chansungsan, L. Tsang y S. L. Chuang, *J. Opt. Soc. Am. B* **12**, 2508 (1994)
- [32] .- H. G. Roskos, M. C. Nuss, J. Shah, K. Leo, D. A. B. Miller y K. Köhler, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2216 (1992)
- [33] .- A. M. Bouchard y M. Luban, *Phys. Rev. B* **47**, 6815 (1993)
- [34] .- I. Brener, P. C. Planken, M. C. Nuss, L. Pfeifer, D. E. Leaird y A. W. Weiner, *Appl. Phys. Lett.* **63**, 2213 (1993)
- [35] .- P. C. Planken, I. Brener, M. C. Nuss, M. S. C. Luo y S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **48**, 4903 (1993)
- [36] .- M. S. C. Luo, S. L. Chuang, P. C. M. Planken, I. Brener y M. C. Nuss, *Phys. Rev. B* **48**, 11043 (1993)
- [37] .- H. Cruz, A. Hernández-Cabrera y P. Aceituno, *J. Phys.: Condens. Matter.* **3** (1991)
- [38] .- C. Juang, P. A. Chen y C. Y. Chang, *Phys. Rev. B* **47**, 4563 (1993)
- [39] .- A. Hernández-Cabrera y P. Aceituno, *Solid State Commun.* **65**, 1451 (1988)

- [40] .- R. Zimmermann y D. Bimberg, *Phys. Rev. B* **47**, 15789; *J. Phys. (París)* **IV**, 261 (1993)
- [41] .- G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981)
- [42] .- A. Goldberg, H. M. Schey y J. L. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**, 177 (1967)
- [43] .- J. M. Mohaidat, K. Shum y R. R. Alfano, *Phys. Rev. B* **45**, 3822 (1992)
- [44] .- P. C. M. Planken, M. C. Nuss, I. Brener, K. W. Goosen, M. S. C. Lou, S. L. Chuang y L. Pfeifer, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3800 (1992)
- [45] .- O. E. Raichev, F. T. Vasko, A. Hernández-Cabrera, P. Aceituno, *Phys. Rev. B* **56**, 4802 (1997)
- [46] .- H. Cao, G. Klimovitch, G. Björk y Y. Yamamoto, *Phys. Rev. B* **52**, 12184 (1995) y *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1146 (1995)
- [47] .- P. Aceituno, H. Cruz y A. Hernández-Cabrera, *Phys. Rev. B* **54**, 17677 (1996)
- [48] .- L. Hedin y B. I. Lundqvist, *J. Phys. C: Solid St. Phys.* **4**, 2064 (1971)
- [49] .- G. E. W. Bauer y T. Ando, *Phys. Rev. B* **34**, 1300 (1986)

- [50] .- E. Boronski y R. M. Niemen, *Phys. Rev. B* **34**, 3820 (1986)
- [51] .- T. Ando, A. B. Fowler y F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 461 (1982)
- [52] .- P. Vashita y R. K. Kalia, *Phys. Rev B* **25**, 6492 (1982)
- [53] .- D. A. Kleinman, *Phys. Rev. B* **33**, 2540 (1986)
- [54] .- C. Presilla, G. Jona-Lasinio y F. Capasso, *Phys. Rev. B* **43**, 5200 (1991);
G. Jona-Lasinio, C. Presilla y F. Capasso, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 226
- [55] .- A. M. Fox, D. A. B. Miller, J. E. Cunningham, W. Y. Jan, C. Y. P. Chao y S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **46**, 15365 (1992)
- [56] .- T. M. Rice, *Solid State Physics*, Vol. 32 (Academic, New York, 1977)
- [57] .- B. Olejniková, *Superlattices and Microstructures* **14**, 215 (1993);
E. X. Ping y H. X. Jiang, *Phys. Rev. B* **47**, 2101 (1993)
- [58] .- A. Hernández-Cabrera, P. Aceituno y H. Cruz, *Physics Letters A* **192**, 269 (1994)
- [59] .- A. Ramos y A. Hernández-Cabrera, *J. Appl. Phys.* **80**, 1547 (1996)

- [60] .- A. Hernández-Cabrera, P. Aceituno y H. Cruz, *Phys. Rev. B* **52**, 10729 (1995)