



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL



**CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIA APLICADA Y
TECNOLOGÍA AVANZADA UNIDAD LEGARIA**

Propiedades ópticas en pozos cuánticos basados en semiconductores de GaN

TESIS

PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN TECNOLOGÍA AVANZADA

PRESENTA:

M. EN C. HERNAN JAVIER HERRERA SUAREZ

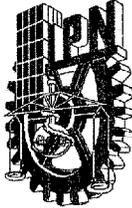
DIRECTOR:

DR. GERARDO GONZALEZ DE LA CRUZ

DIRECTOR:

DR. JOSÉ ANTONIO CALDERÓN ARENAS

México D. F. de 2007



INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL

SECRETARIA DE INVESTIGACION Y POSGRADO

ACTA DE REVISION DE TESIS

En la Ciudad de México D.F. siendo las 11:00 horas del día 28 del mes de noviembre del 2007 se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de Tesis designada por el Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de CICATA-LEGARIA para examinar la tesis de grado titulada: Propiedades ópticas en pozos cuánticos basados en semiconductores de GaN

Presentada por el alumno:

Herrera
Apellido paterno

Suárez
materno

Hernán Javier
nombre(s)

Con registro:

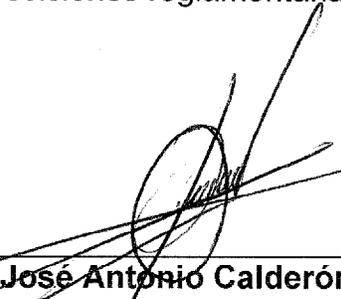
| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| B | 0 | 4 | 1 | 0 | 3 | 2 |
|---|---|---|---|---|---|---|

aspirante al grado de: Doctorado en Tecnología Avanzada

Después de intercambiar opiniones los miembros de la Comisión manifestaron **SU APROBACION DE LA TESIS**, en virtud de que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes.

LA COMISION REVISORA

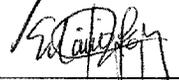
Directores de tesis



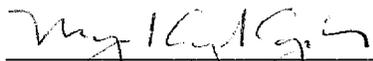
Dr. José Antonio Calderón Arenas



Dr. Gerardo González de la Cruz



Dr. Máximo López López



Dr. Miguel Ángel Aguilar Frutis

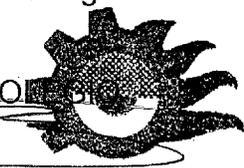


Dr. José Antonio Irán Díaz Góngora

EL PRESIDENTE DEL COMITÉ



Dr. José Antonio Irán Díaz Góngora


CENTRO DE INVESTIGACION EN CIENCIA
APLICADA Y TECNOLOGIA AVANZADA
DEL IPN

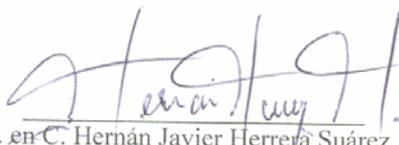


INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESION DE DERECHOS

En la Ciudad de México, D. F., el día 20 del mes Noviembre del año 2007, el (la) que suscribe M. en C. Hernán Javier Herrera Suárez alumno (a) del Programa de Doctorado en Tecnología Avanzada con número de registro B041032, adscrito a Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, manifiesta que es autor (a) intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de Dr. Jose Antonio Calderon Arenas y Dr. Gerardo González de la Cruz y cede los derechos del trabajo intitulado Propiedades ópticas en pozos cuánticos basados en semiconductores de GaN, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección herjaher16@hotmail.com. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.


M. en C. Hernán Javier Herrera Suárez
Nombre y firma

AGRADECIMIENTOS

Agradezco, respetuosamente, a los Doctores José Antonio Calderón Arenas y Gerardo González de la Cruz, por su paciencia y por su excelente dirección, así como su ayuda en la realización de este trabajo de tesis.

Al grupo de trabajo que conforman el Programa de Tecnología Avanzada: Ing. Armando Alvarado, C.P. Horacio Ortiz Cárdenas, Ana Leticia Cardona Gómez, Ing. Pablo Méndez, Srita. Laura Vega y Andrés Bautista; por su ayuda y asesoría, así como también por su generosa amistad.

Un sincero agradecimiento a los profesores del CICATA-IPN: Dr. José Antonio Díaz Góngora, Dr. Cesar Mora Ley, Dr. Alfredo López, Dr. Miguel Ángel Aguilar Frutis, Dr. José Luís Herrera Pérez, M. en C. Mónica Rosalía Jaime, Dr. Teodoro Rivera Montalvo, Dr. José Luís Fernández Muñoz, Dr. Ernesto Marín Moarés y Dr. Eduardo San Martín por contribuir a mi formación.

Al Dr. Máximo López López, por sus comentarios y sugerencias.

A los M. en C. Manolo Ramírez López y Claudio Contreras Aburto, por su ayuda para el desarrollo de la presente tesis.

A Andrea del Rocío Vargas Treviño, Laura Catalina González Carvajal, Katherine Ortega González, Alex Florido Cuellar y Alejandro Cardona Ricalde por su ayuda, apoyo y comprensión.

A todos mis compañeros del postgrado, particularmente a: Laura Palacios, Lucero Gómez, Patricia Rodríguez, Nora Arlem, Elizabeth Navarro, Lesli Ortega Arroyo, María Eugenia

Ramírez Ortiz, Alejandro Lozano, Yasser Sánchez, Ricardo Abdelarrague, Gerardo Vera y al Profesor Germán Koller, por su ayuda y apoyo.

Al Ingeniero Jorge Izaguirre Montiel, por su comprensión.

A todo el personal administrativo y técnico que conforman la comunidad del *CICATA-IPN* Legaria, de igual manera a todo el personal de intendencia y seguridad que aquí colaboran, por sus amables servicios prestados a un servidor y a este centro de investigaciones.

Agradezco, tanto al *CONACYT* como al programa *PIFI-IPN*, por el apoyo económico que por medio de sus becas fue otorgado durante el desarrollo del presente trabajo de tesis.

Agradezco a *CORUNIVERSITARIA* hoy en día *UNIVERSIDAD DE IBAGUÉ* por haberme brindado su apoyo.

A todas las personas que viven en este excelente país.

A todos los profesores que con sus enseñanzas han influido en mi vida.

Finalmente, agradezco a mis padres, por su afecto, cariño y dedicación hacia mí.

Dedico afectuosamente la presente tesis a:

***Mis padres,** Edilberto Herrera y Nelly Suárez, que han sido mi apoyo constante, mi ejemplo de vida.*

***Mi sobrino,** Sergio Leonardo Herrera, quién me ha brindado tantos buenos momentos y tantas alegrías.*

***Mi amiga,** Andrea del Rocío Vargas, quién me ha escuchado en todo tiempo.*

***Mi familia,** quienes son lo más preciado que tengo.*

CONTENIDO GENERAL

| | Página | |
|-------------------|----------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Capítulo 1 | Introducción | 1 |
| 1.1 | Historia | 2 |
| 1.2 | Aplicaciones de los semiconductores III-V | 3 |
| 1.3 | Motivación de este trabajo | 5 |
| 1.4 | Desarrollo del trabajo | 6 |
| Capítulo 2 | Fundamentos teóricos | 9 |
| 2.1 | Introducción | 9 |
| 2.2 | QW's semiconductores | 12 |
| 2.3 | Propiedades de los nitruros del grupo III | 13 |
| 2.3.1 | Estructura cristalina y estructura de bandas | 13 |
| 2.3.2 | Estructura Zinc Blenda | 14 |
| 2.3.3 | Estructura Wurtzita | 15 |
| 2.4 | Polarización espontánea | 19 |
| 2.5 | QW's deformados | 21 |
| 2.5.1 | Deformación mecánica | 21 |
| 2.5.2 | Deformación por polarización piezoeléctrica | 28 |
| 2.6 | Efectos de segregación en los niveles de energía en <i>QW's</i> de <i>InGaN/GaN</i> | 32 |
| 2.7 | Propiedades ópticas | 34 |
| 2.7.1 | Fotoluminiscencia en semiconductores | 35 |
| 2.7.2 | Transiciones radiativas a través de la brecha prohibida de energía en un semiconductor | 35 |
| Capítulo 3 | Efectos de la segregación en las propiedades ópticas de QW's | 39 |
| 3.1 | Introducción | 39 |
| 3.2 | Modelo teórico | 41 |
| 3.3 | Resultados experimentales | 46 |
| 3.3 | Resultados teóricos | 47 |
| 3.4 | Análisis y discusión | 48 |
| 3.5 | Conclusiones | 49 |
| Capítulo 4 | Efectos de campos eléctricos intensos en las propiedades ópticas de QW's | 51 |
| 4.1 | Introducción | 51 |

| | | |
|-------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| 4.2 | Modelo teórico | 53 |
| 4.3 | El QW de <i>AlGaIn/GaN</i> | 57 |
| 4.3.1 | Resultados experimentales | 58 |
| 4.4 | El QW de <i>AlIn/GaN</i> | 60 |
| 4.4.1 | Resultados experimentales | 60 |
| 4.5 | Análisis y discusión | 62 |
| 4.6 | Conclusiones | 63 |
| Capítulo 5 | Densidad de portadores y su influencia en las propiedades ópticas de los QW's | 65 |
| 5.1 | Introducción | 65 |
| 5.2 | Modelo teórico | 67 |
| 5.3 | Resultados experimentales | 70 |
| 5.4 | Análisis y discusión | 72 |
| 5.5 | Conclusiones | 74 |
| Capítulo 6 | Conclusiones y perspectivas | 77 |
| | Bibliografía | 80 |
| | Productividad científica | 85 |

INDICE DE TABLAS

| Tabla | Descripción | Página |
|-------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| 2.1 | Semiconductores más comunes. En la primera columna se presenta el tipo de semiconductor, en la segunda el grupo al que pertenece en la tabla periódica y finalmente, en la tercera los electrones que posee el semiconductor en la última capa. | 10 |
| 2.2 | Ancho de banda de energía prohibida de semiconductores [17]. En la primera columna se muestra el tipo de cristal, en la segunda el tipo de ancho de banda de energía prohibida: <i>i</i> indirecta y <i>d</i> directa y en la última columna el ancho de banda de energía prohibida a 0 K. | 11 |
| 2.3 | Longitud de onda y color de los nitruros del grupo III. | 14 |
| 2.4 | Constantes de red de los nitruros III a temperatura ambiente en fase wurtzita [18]. En la primera columna se presenta el compuesto, en la segunda columna el parámetro de red <i>a</i> en unidades de Å en y en la tercera columna el parámetro de red <i>c</i> en unidades de Å. | 17 |
| 2.5 | Ancho de banda de energía prohibida de los nitruros III en fase wurtzita a a 5 K y a temperatura ambiente [19, 20, 21]. En la primera columna se muestra el compuesto, en la segunda columna el ancho de banda de energía prohibida a 5 K en unidades de eV y en la última columna el ancho de banda de energía prohibida a 300 K en unidades de eV. | 18 |
| 2.6 | Polarización espontánea para materiales III-V en fase wurtzita [9]. En la primera columna se presenta el compuesto y en la segunda columna la polarización espontánea en unidades de C/m^2 . | 19 |
| 3.1 | Variación de los parámetros como una función de la concentración de <i>In</i> . | 46 |
| 3.2 | Parámetros del <i>GaN</i> . | 46 |
| 5.1 | Parámetros empleados para la elaboración de la gráfica 6.3. | 73 |
| 5.2 | Parámetros empleados para la elaboración de la gráfica 6.4. | 74 |

INDICE DE FIGURAS

| Figura | Descripción | Página |
|--------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------|
| 2.1 | Estructura de bandas del QW de $Al_{1-x}Ga_xAs/GaAs$. | 12 |
| 2.2 | Diagrama esquemático del ancho de banda de energía prohibida de nitruros del grupo III en función de la constante de red. | 14 |
| 2.3 | Estructura cristalina zinc blenda. Los círculos sólidos representan los átomos de Galio y los círculos abiertos representan los átomos de N. | 15 |
| 2.4 | Estructura cristalina Wurtzita. Los círculos rojos representan los átomos de N y los azules los átomos de Al o Ga o In, a y c los parámetros de red. | 16 |
| 2.5 | Celda unidad de la estructura cristalina wurtzita | 17 |
| 2.6 | Diagrama esquemático de la estructura de bandas de GaN (en fase wurtzita) a lo largo de la dirección k_z y en el plano k_x - k_y [17]. | 18 |
| 2.7 | Polarización espontánea en el GaN | 20 |
| 2.8 | Definición del tensor de tensiones [18] | 24 |
| 2.9 | Diagrama de tres redes cristalinas que tienen diferente parámetro de red, con la característica que $a_0 < a_l$ (material A) y $a_0 > a_l$ (material B) y la respectiva estructura de bandas en el punto Γ cuando no hay deformación. | 26 |
| 2.10 | Diagrama de dos redes cristalinas con tienen diferente parámetro de red, con la característica que $a_0 < a_l$ (material A) y la respectiva estructura de bandas en el punto Γ cuando se presenta deformación por alargamiento. | 27 |
| 2.11 | Diagrama de dos redes cristalinas con tienen diferente parámetro de red, con la característica que $a_0 > a_l$ (material B) y la respectiva estructura de bandas en el punto Γ cuando se presenta deformación compresiva. | 28 |
| 2.12 | Diagrama esquemático de la separación de carga en GaN crecido a lo largo de la dirección [0001], que causa la aparición de una polarización descompensada. Al lado izquierdo se muestra la red cristalina no tensionada, y al lado derecho se muestra las posiciones atómicas cuando la red cristalina esta sujeta a tensión. | 29 |

| | | |
|------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.13 | (a) diagrama esquemático del campo eléctrico inducido en QW basado en materiales piezoeléctricos. (b) Estructura de bandas del GaN/AlN con las funciones de onda de el estado base y el primer estado excitado [18]. | 31 |
| 2.14 | Ilustración de la influencia del campo piezoeléctrico sobre las propiedades ópticas y electrónicas de las propiedades de QW 's GaN/AlN , (a) La diferencia de energía y (b) el elemento de matriz bipolar [19] | 32 |
| 2.15 | Perfil de segregación de Indio para el pozo cuántico $In_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN$ con y sin segregación de Indio tomando en cuenta el modelo de Muraki [22]. La línea sólida representa el caso cuando el coeficiente de segregación es 0.8 y la línea trazos representa el caso cuando coeficiente de segregación es cero. | 33 |
| 2.16 | Procesos de recombinación electrón hueco a través de la brecha energética. | 37 |
| 3.1 | Altos de la barrera para diferentes concentraciones. | 44 |
| 3.2 | Espectro de Fotoluminiscencia (líneas a trazos). | 47 |
| 3.3 | Picos de energía de fotoluminiscencia vs ancho del QW . Los puntos sólidos representan los resultados experimentales obtenidos mediante la técnica de fotoluminiscencia [36] para las energías de transición $e-h$. La línea a trazos representa los resultados teóricos obtenidos empleando el modelo de Kane-Luttuttinger con un campo eléctrico $F=0$ kV/cm . La línea sólida representa los resultados teóricos obtenidos empleando el mismo modelo con un campo eléctrico $F=900$ kV/cm . | 48 |
| 3.4 | Energía de los picos de fotoluminiscencia para $In_{0.105}Ga_{0.895}N/GaN$ en función del ancho del QW para la temperatura de 15 K. Los puntos sólidos representan los resultados experimentales obtenidos mediante la técnica de fotoluminiscencia [36] para las energías de transición e-h. La línea sólida representa los resultados teóricos obtenidos empleando nuestro modelo con un campo eléctrico $F=900$ kV/cm . | 49 |
| 4.1 | Diagrama esquemático de las energías y funciones de onda de electrones y huecos en QW 's tensionados con (a) F moderado y (b) campos piezoeléctricos fuertes. | 54 |
| 4.2 | Intensidad de energía de PL y reflectividad para $Al_{0.17}Ga_{0.83}N/GaN$ en función de la energía del fotón (eV) [7]. | 58 |
| 4.3 | Espectro de PL ($T=10$ K) de una muestra de múltiples pozos cuánticos de $Al_{0.24}Ga_{0.76}N/GaN$ [40]. | 59 |
| 4.4 | Comparación de las energías de transición experimentales (puntos sólidos) con ajustes teóricos (líneas sólidas) en función del ancho del QW para diferentes campos eléctricos [40]. | 60 |

| | | |
|-----|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 4.5 | Espectro de <i>PL</i> (T=8 K) de tres muestras de múltiples pozos cuánticos de <i>AlN/GaN</i> [8]. | 61 |
| 4.6 | Comparación de las energías de transición experimentales (puntos sólidos) con ajustes teóricos (líneas sólidas) en función del ancho del <i>QW</i> para diferentes campos eléctricos [8]. | 61 |
| 4.7 | Energía de los picos de fotoluminiscencia para <i>Al_{0.17}Ga_{0.83}N/GaN</i> en función del ancho del pozo cuántico (pozo triangular), los círculos sólidos representan los datos experimentales tomados de la Ref. [7] y la línea sólida representa los resultados obtenidos con nuestro modelo. | 62 |
| 4.8 | Energía de los picos de fotoluminiscencia para <i>AlN/GaN</i> en función del ancho del pozo cuántico (pozo triangular), los círculos sólidos representan los datos experimentales tomados de la Ref. [7] y la línea sólida representa los resultados obtenidos con nuestro modelo. | 63 |
| 5.1 | Dependencia de la posición de los picos de <i>PL</i> del poder de excitación para la muestra de múltiples <i>QW</i> de 3.5 nm de ancho a la temperatura de 6 K. Los triángulos sólidos representan: datos de <i>PL</i> en 0.05, 0.1, 1, 10 mW respectivamente. Los triángulos abiertos representan la posición de los picos de cátodoluminiscencia (CL) en un rango de corriente de 0.1-100 nA en $E_B=10$ keV (tomado de la Ref [57]). | 71 |
| 5.2 | Picos de energía de <i>PL</i> del <i>QW Ga_{0.87}In_{0.13}N/Ga_{0.97}In_{0.03}N</i> como función del ancho. Los cuadrados sólidos y abiertos representan los picos de energía de <i>PL</i> a temperatura ambiente con alta potencia de excitación (200 kv/cm ²) y baja potencia de excitación (2 kv/cm ²), respectivamente. Las líneas sólidas y a trazos representan los resultados calculados con campo eléctrico de 1.08 MV/cm y sin campo, respectivamente (tomado de la Ref. [56]). | 71 |
| 5.3 | Picos de energía de <i>PL</i> de pozos cuánticos de <i>In_{0.13}Ga_{0.87}N/Ga_{0.97}In_{0.03}N</i> en función de ancho del pozo. Las líneas punteada y sólida representan los picos de energía de <i>PL</i> empleando el método variacional a temperatura ambiente a una concentración de portadores de $6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (alta potencia de excitación) y $0.18 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (baja potencia de excitación), respectivamente. Los círculos sólidos y estrellas sólidas representan los resultados experimentales hallados teniendo en cuenta un campo eléctrico de 1.08 MV/cm y de cero MV/cm, respectivamente (tomado de la Ref. [56]). | 73 |
| 5.4 | Posición de los picos de energía de transición como función de la densidad de portadores. La línea sólida representa los cálculos teóricos variacionales obtenido en el presente trabajo y los círculos sólidos representan los resultados experimentales tomados de la Ref. [57]. | 74 |

INDICE DE ABREVIACIONES

| | |
|--------------|-------------------------------------------------------------|
| 2DEG | Gas de electrones bidimensional |
| CD | Disco compacto |
| CH | Campo cristalino |
| CL | Catodoluminiscencia |
| DVD | Disco de Video Digital |
| FR | Fotorefectancia |
| HH | Huecos pesados |
| IR | Infrarojo |
| LH | Huecos ligeros |
| LASER | Amplificación de Luz por Emisión Estimulada de Radiación |
| LD | Diodos láser |
| LED | Diodos emisores de luz |
| MBE | Epitaxia de haces moleculares |
| MOCVD | Deposición de vapores de sustancias químicas organometálico |
| PL | Fotoluminiscencia |
| QW | Pozo cuántico |
| OCDE | Organización de Cooperación y Desarrollo Económico |
| UV | Ultravioleta |

RESUMEN

En la presente tesis se solucionan tres problemas: en el primero se calculan los niveles de energía del electrón y hueco resolviendo analíticamente la ecuación de Schrödinger en ausencia de campo eléctrico. En esta parte se toman en cuenta los cambios en la forma del pozo cuántico, (*QW*), de *GaN* debido a la segregación de In durante los procesos de crecimiento de heteroestructuras semiconductoras. Además, la fuerte influencia del campo eléctrico debido al efecto piezoeléctrico sobre la emisión de PL es calculada empleando una función de onda variacional para calcular las transiciones de energía electrón-hueco en la región activa en la heteroestructura. En particular, se aplicó este modelo al caso de la segregación del indio en InGaN/GaN para campos eléctricos moderados. En el segundo problema se calcula la energía de transición del electrón-hueco en el *QW* usando funciones de onda variacionales para el electrón (hueco) de acuerdo a las siguientes condiciones experimentales: (a) la energía de transición en el *QW* es más grande que el ancho de banda de energía prohibida del *GaN* (campos de piezoeléctricos moderados) y, (b) en el límite de campo eléctrico interno intensos cuando el *QW* emite energías más bajas que el ancho de banda de energía prohibida del *GaN*. Bajo estas aproximaciones el campo eléctrico incorporado es usado como parámetro de ajuste, cuando se compara con los picos de *PL* experimentales de *QW*'s basados en *GaN*. Finalmente, en el tercer problema se estudia la influencia de la densidad de portadores, además del campo eléctrico sobre la emisión de *PL*, considerando una función de onda variacional para el electrón y otra para el hueco para obtener las transiciones de energía en la región activa del *QW*. La contribución entre la interacción del electrón y la distribución de carga de los electrones y huecos en el *QW* es considerada en la ecuación de Schrödinger, y esta energía potencial satisface simultáneamente la ecuación de Poisson con la densidad de carga en la subbanda del estado base como término fuente. Por lo tanto, la ecuación de Schrodinger y la ecuación de Poisson se resuelven simultáneamente. Los cálculos de la energía de transición electrón-

hueco en función de la densidad de portadores y el ancho del QW están en acuerdo con los experimentos de PL reportados en la literatura.

ABSTRACT

In this thesis we solved three problems: in first problem, we solve analytically the Schrödinger equation in the absence of electric field, taking into account the shape changes in the *InGaN QWs* due to the segregation of *In* atoms during the growth process of the semiconductor heterostructures. Furthermore, the influence of the built-in electric field due to the piezoelectric effect on the *PL* emission is calculated by considering a variational electron wave function to calculate the ground-energy transitions inside the active region in the heterostructure. In particular, we apply this model to the case of indium segregation in *InGaN/GaN* for moderate internal electric fields. In the problem second, we solve analytically the Schrödinger equation for moderate electric fields when the electron-hole transition energy in the *QW* is larger than the energy gap of the *GaN*. Furthermore, the large redshifts of the *PL* energy position and the spatial separation of the electrons and holes several greater times than the Bohr radius caused by the strong piezoelectric fields are explained using a triangular potential, instead of a square one, in the Schrödinger equation. The transition energy calculations between the electron-hole pair as a function of the well width with the electric field as a fitting parameter are in agreement with the measured photoluminescence energy peaks. Finally, the problem third, we studied the influence of the built-in electric field on the *PL* emission is calculated by considering a variational electron and hole wave function to obtain the ground-energy transitions inside the active region in *QW*. Furthermore, the contribution between the interaction of the electron with the charge distribution of electrons and holes in the *QW* is taken into account in the Schrödinger equation, and this energy potential also satisfies the Poisson's equation with the charge density in the ground-state subband as the source term. The transition energy calculations between the confined electron and hole states as a function of the carrier density and the well thickness are in agreement with the *PL* experiments reported in the literature.

Capítulo

1

Introducción

La presente investigación se refiere al desarrollo de modelos teóricos que expliquen los efectos de los intensos campos internos en pozos cuánticos (*QW's* por sus siglas en inglés) en el espectro de fotoluminiscencia (*PL*) y los efectos de la densidad de carga sobre el cambio de energía de emisión en *QW's* de *GaN*. En cada modelo desarrollado en la presente tesis, se propone una función de onda variacional con la cual se calculan los niveles de energía de un electrón en el pozo de potencial. Posteriormente, se calcula la energía de transición entre el primer nivel de huecos y el primer nivel de electrones (1h-1e) en *QW's* de *InGaN/GaN*, *AlGaN/GaN* e *AlN/GaN*. El resultado se compara con los experimentos.

Un *QW* es la denominación que recibe un pozo de potencial que confina, en dos dimensiones, partículas que originalmente tenían libertad de moverse en tres, forzándolas a ocupar una zona bidimensional. Los efectos del confinamiento cuántico se producen cuando el ancho del *QW* es comparable a la longitud de onda de De Broglie de las partículas portadoras de energía (generalmente electrones), generando así niveles de

energía llamadas "*subbandas de energía*", por lo que estos portadores de carga solo podrán tomar valores discretos de energía.

1.1 Historia

Los *QW's* surgen desde la predicción de la teoría cuántica con el concepto de tunelamiento, cuya observación experimental es uno de los triunfos tempranos de la mecánica cuántica. La primera aplicación de esta predicción fue realizada 1928, por Oppenheimer [1] para describir el autoionización de estados excitados del átomo de hidrógeno en un fuerte campo eléctrico. Fowler y Nordheim [2] explicaron con fundamento en el tunelamiento del electrón los rasgos del fenómeno de emisión de metales a bajas temperaturas en presencia de campos eléctricos externos (observado por Lilienfeld [3] en 1922).

El primer paso, hacia la producción en masa de dispositivos semiconductores se dio hasta el año 1947 cuando Shockley, Brattain y Bardeen demostraron su invención: el transistor, motivo por el cual que ellos ganaran el Premio Nóbel de física en 1956.

En 1970 comienza una nueva etapa en la investigación en estructuras de baja dimensión, con las aportaciones de Esaki, Giaver y Tsu a las propiedades de transporte en semiconductores y superconductores, estudios que contribuyeron a descubrimientos espectaculares en la ciencia fundamental (el efecto Hall Cuántico por Klitzing en 1982) y sus aplicaciones.

En la década de los 80's, el descubrimiento del microscopio de tunelamiento de barrido (STM), propicio la invención de nuevas técnicas que ayudaron al estudio de la física de heteroestructuras bidimensionales y sus aplicaciones en las técnicas de crecimiento de materiales.

1.2 Aplicaciones de los semiconductores III-V

Las técnicas de crecimiento de semiconductores en la actualidad permiten la creación de estructuras artificiales tales como (*QW's*) y superredes semiconductoras. Con técnicas como la Epitaxia por Haces Moleculares (*MBE* por sus siglas en inglés), es posible conseguir que la superficie de separación entre ambos semiconductores sea altamente plana. Una super-red semiconductoras consiste de dos diferentes semiconductores alternados periódicamente, el ancho de cada material puede ser algunas decenas hasta centenas de ángstroms. En la creación de superredes se consideran dos materiales semiconductores diferentes, en estructura y constante de red, esto da lugar a un nuevo material con interesantes fenómenos físicos. El primer sistema estudiado fue la interfaz *AlGaAs/GaAs* donde las constantes de red del *AlAs* y el *GaAs* son prácticamente las mismas y el ancho de banda de energía prohibida *GaAs* es mas pequeña que la de *AlGaAs*, esta diferencia en las bandas de energía origina un potencial periódico en la dirección de crecimiento del material. El potencial periódico, es una sucesión de pozos cuánticos separados por barreras de potencial. En cada pozo de potencial, los electrones se mueven libremente en el plano, mientras que su movimiento es cuantizado en la dirección de crecimiento, formando un gas de electrones en dos dimensiones.

La aplicación de campos eléctricos externos cambia las propiedades ópticas y de transporte en estas estructuras. Sin embargo, en la mayoría de los casos el campo se aplica en forma externa. Recientemente, ha sido de gran interés el uso de capas epitaxiales tensionadas para producir un campo eléctrico interno en la estructura generado por efectos piezoeléctricos. Este es el caso de capas de *InGaAs* crecidas epitaxialmente por *MBE* sobre sustratos de *GaAs*, donde la constante de red del semiconductor *InGaAs* es mayor que la del sustrato *GaAs*. Variando la concentración de *In* en el *InGaAs* es posible variar la magnitud de la tensión en la capa epitaxial. Se ha descubierto la existencia de campos eléctricos en *QW's* de *InGaAs/GaAs* [4, 5, 6] en los cuales se pueden producir campos eléctricos tan altos como el voltaje de rompimiento del *GaAs*. Por ejemplo, para una concentración del

20% de *In* los esfuerzos inducidos en la capa de *InGaAs* pueden llegar a producir campos eléctricos intensos internos del orden de 100KV/cm. Este tipo de capas tensionadas se han utilizado en la región activa de *QW's* del tipo *GaAs/InGaAs/GaAs* para producir un corrimiento hacia el rojo en los espectros de emisión. Este efecto tiene importantes consecuencias tecnológicas, pues modulando externamente el campo interno es posible obtener un corrimiento hacia el azul en el espectro de absorción de la estructura lo que se puede usar en el diseño de moduladores ópticos y es una de las razones para estudiar el *GaAs* y en particular el *GaN*, ya que efectos similares también se han encontrado en los nitruros de *QW's* tales como *InGaN/GaN*, donde además de efecto piezoeléctrico aparece una componente extra del campo eléctrico debido a la pérdida de simetría cúbica del *GaN*, la fase más estable es la de la wurtzita. Se han reportado campos eléctricos internos en estas estructuras del orden 10^3 KV/cm para *QW's* de *InGaN/GaN*, de 710 kV/cm en *Al_{0.17}Ga_{0.83}N/GaN* [7] y del orden de 9.2 MV/cm [8] en *AlN/GaN*. Todos los nitruros del grupo III en la fase wurtzita tienen una fuerte polarización macroscópica espontánea y coeficientes piezoeléctricos grandes, los cuales han sido reportados en cálculos *ab initio* [9, 10], basados en la teoría del funcional de densidad en la aproximación de la densidad local que consiste en suponer que en cada punto, la energía de intercambio y correlación depende sólo de la densidad en ese punto.

Por otro lado, en un semiconductor se presenta desequilibrio energético cuando los electrones han sido excitados a niveles de mayor energía, estos electrones pueden volver a una configuración de baja energía a través de distintos procesos conocidos como mecanismos de recombinación. Dentro de estos mecanismos se pueden distinguir dos procesos: en el primero de recombinación radiativa, en donde la absorción de fotones produce la generación de pares electrón-hueco (*e-h*) que al recombinarse, producen la emisión de un fotón y el segundo recombinación Auger. En este proceso la energía entregada por un electrón que se recombina con un hueco es absorbida por otro electrón, el cual finalmente disipa su energía por medio de la de tres cuerpos en la que no hay emisión de fotones. Estos procesos de recombinación están asociados a los de emisión de luz de

dispositivos optoelectrónicos basados en semiconductores, razón por la cual actualmente están siendo estudiados.

Hoy en día las aplicaciones de los *QW*'s son variadas entre las cuales se puede mencionar: *diodos emisores de luz (LED)* y *diodos láser (LD)*. En la mayoría de estas estructuras de *QW* la zona activa consiste de una estructura conteniendo una capa delgada de orden nanométrica entre dos barreras (semiconductores de diferente ancho de banda de energía prohibida mayor que la zona activa). Esta nanoestructura es llamada *QW*.

En la actualidad, los productos que incorporan nanotecnología o son manufacturados mediante la misma excederán del 0,1% actual al 15% en 2015 del total, según un informe de la OCDE (Organización de Cooperación y Desarrollo Económico) que señala que la extensión de esta tecnología se realizará en tres fases. La primera, en la que la humanidad se encuentra actualmente, sitúa estos productos en el ámbito industrial. Para 2009 llegará a los mercados electrónicos y en 2010 se extenderá a todos los bienes de consumo.

1.3 Motivación de este trabajo

Los primeros semiconductores han tenido un fuerte impacto en la vida moderna, estos son: el silicio y al arsenuro de galio. En la actualidad, estos semiconductores han quedado rezagados debido a su angosta brecha de energía prohibida, (1.1 eV para Si y 1.4 eV para *AsGa*) que los hace inapropiados para aplicaciones de alta temperatura y potencia, pues los electrones en la banda de valencia pueden fácilmente ser excitados a la banda de conducción, por lo cual, las aplicaciones de estos materiales quedan limitadas a longitudes de onda larga.

En los últimos años, los efectos de confinamiento cuántico en materiales semiconductores han interesado a la comunidad científica y tecnológica. Desde el punto de vista básico los nuevos fenómenos físicos que surgen con estos efectos, han dado lugar al

área de la física de sistemas de baja dimensionalidad. Desde el punto de vista aplicado, la necesidad de buscar dispositivos ópticos y electrónicos más confiables, con características superiores y con nuevas propiedades, motiva el desarrollo e investigación de dispositivos que involucren sistemas de partículas confinados cuánticamente. Algunos de estos dispositivos son ya una realidad, por ejemplo, el diodo láser de QW usado en los sistemas de discos compactos y en líneas de transmisión por fibra óptica, también se tiene dispositivos de alta velocidad y alta frecuencia como los transistores de alta movilidad con un gas de electrones en dos dimensiones empleados en teléfonos celulares.

El nitruro de galio (GaN) y sus aleaciones ($AlGaN$, $InGaN$) son hoy en día los materiales más prometedores, en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos debido a la amplia brecha de energía prohibida y por tal motivo es necesario el entendimiento de sus propiedades ópticas.

1.4 Desarrollo del trabajo

Este trabajo se ha dividido en seis capítulos. En el capítulo 2 se presenta los aspectos fundamentales de los semiconductores II-IV necesarios para comprender el desarrollo de la presente tesis. En el capítulo 3, se hace una recopilación sobre los efectos de la segregación en pozos cuánticos de $InGaN/GaN$ y se propone un modelo basado en la comparación del espectro de PL con el cálculo de las energías de transición. El modelo predice el perfil de la barrera y el pozo empleando un potencial tipo Pösch-Teller para ser incluidos en la ecuación de Schrödinger dentro del marco de la aproximación de la masa efectiva. En el capítulo 4, se presenta una recopilación sobre los efectos de las densidades en las propiedades ópticas de $AlGaN/GaN$ y AlN/GaN y se propone un modelo basado en la comparación del espectro de PL con el cálculo de las energías de transición. En el capítulo 5, se estudia la densidad de portadores y su influencia en las propiedades ópticas de los QW 's basados en GaN . Finalmente, en el capítulo 6 se presenta las conclusiones del presente trabajo.

Capítulo

2

Fundamentos teóricos

2.1 Introducción

Un QW semiconductor es una estructura en la cual el movimiento del electrón es confinado en la dirección de crecimiento, usualmente referida al eje z , permaneciendo la partícula en el plano xy . En los QW 's, la energía cinética de los portadores de carga es cuantizada a causa del confinamiento de su movimiento a lo largo del eje z . Sin embargo, el movimiento de los portadores en el plano xy no está restringido, la energía cinética puede tomar valores continuos. Cuando un electrón es excitado, deja la banda de valencia para ir a la banda de conducción. Esto crea un estado vacío en la banda de valencia, comúnmente llamado hueco que puede ser descrito como una cuasipartícula con una masa efectiva y un momento cinético.

Los QW 's se usan en la fabricación de diodos láser. También se los utilizan para fabricar transistores de alta movilidad de electrones. Los fotodetectores infrarrojos de QW 's se los utiliza para operar imágenes infrarrojas. Cuando en la barrera de potencial se introducen impurezas donadoras, los electrones se desplazan a los niveles de menor energía del QW formando un gas de electrones en dos dimensiones ($2DEG$). Este plasma cuasi-bidimensional tiene propiedades interesantes a bajas temperaturas. Una de estas

propiedades es el efecto Hall cuántico, que consiste en la cuantización de la conductividad Hall simbolizada por la letra σ , en múltiplos enteros de un cuanto fundamental de conductividad e^2/h , donde e es la carga del electrón y h es la constante de Planck, es decir, la conductividad Hall esta dada por la relación $\sigma = \nu e^2/h$ donde ν toma valores enteros ($\nu = 1,2,3, \text{etc.}$) y que se observa en campos magnéticos elevados. De manera análoga, las impurezas aceptoras en la barrera de un QW pueden llevar a la formación de un gas de huecos y electrones.

Un semiconductor es una sustancia que se comporta como conductor a relativamente altas temperaturas (los electrones obedecen la estadística de Maxwell-Boltzman) o como aislante a bajas temperaturas (Estadística de Fermi-Dirac). Algunos elementos químicos semiconductores [11] se indican en la tabla 2.1

TABLA 2.1 Semiconductores más comunes. En la primera columna se presenta el tipo de semiconductor, en la segunda el grupo al que pertenece en la tabla periódica y finalmente, en la tercera los electrones que posee el semiconductor en la última capa.

| <i>Elemento</i> | <i>Grupo</i> | <i>Electrones en la última capa</i> |
|----------------------|--------------|-------------------------------------|
| <i>Cd</i> | II A | $2e^-$ |
| <i>Al, Ga, B, In</i> | III A | $3e^-$ |
| <i>Si, Ge</i> | IV A | $4e^-$ |
| <i>P, As, Sb</i> | IV A | $5e^-$ |
| <i>Se, Te, (S)</i> | VI A | $6e^-$ |

El grupo de sustancias cuya resistividad a temperatura ambiente comprendida entre 10^{-2} y $10^9 \Omega\text{-cm}$ pertenecen a los semiconductores. En el cero absoluto un cristal perfecto y puro de la mayoría de los semiconductores será un aislante, si se define arbitrariamente el aislante como el que tiene una resistividad superior a $10^{14} \Omega\text{-cm}$ [12].

El ancho de banda de energía prohibida (o *gap*) es la diferencia de energía entre la parte superior de la banda de valencia y la parte inferior de la banda de conducción y se representa por E_g . Está presente en aislantes y semiconductores. En la tabla 2.2 se relacionan los anchos de banda de energía prohibida de algunos semiconductores representativos.

TABLA 2.2 Ancho de banda de energía prohibida de semiconductores [12]. En la primera columna se muestra el tipo de cristal, en la segunda el tipo de ancho de banda de energía prohibida: *i* indirecta y *d* directa y en la última columna el ancho de banda de energía prohibida a 0 K.

| Cristal | Banda | E_g (0 K) [eV] |
|-----------------|--------------|------------------------------------|
| Diamante | i | 5.4 |
| GaP | i | 2.32 |
| AlSb | i | 1.65 |
| GaAs | d | 1.52 |
| InP | d | 1.42 |
| Si | i | 1.17 |
| GaSb | d | 0.81 |
| Ge | i | 0.77 |
| InAs | d | 0.43 |
| InSb | d | 0.23 |

En el presente capítulo se presentan los fundamentos teóricos necesarios para comprender el desarrollo de la presente tesis. En la sección 2.2 se comenta brevemente algunos aspectos de los *QW's* semiconductores, tales como: sus aplicaciones y la conformación de su estructura de bandas, luego en la sección 2.3 se estudia algunas de las propiedades de los nitruros haciendo énfasis en las propiedades cristalinas, esencialmente las fases en las cuales los nitruros son mas estables, en la sección 2.4, se describe de forma resumida el origen de la polarización espontánea en nitruros III, posteriormente, en la sección 2.5 se comenta algunos aspectos importantes de los *QW's* deformados tales como:

el cambio de energía debido a la deformación y el campo piezoeléctrico interno que se forma en nitruros y su influencia en los *QW*'s. En la sección 2.6 se estudia la segregación y su efecto en *QW*'s de *InGaN/GaN*, y finalmente en la sección 2.7, se hace un resumen de la técnica de fotoluminiscencia para materiales semiconductores.

2.2 *QW*'s semiconductores

Un *QW* se puede obtener cuando se coloca una película de un semiconductor (por ejemplo, *GaN*) denominado pozo cuántico, entre dos semiconductores de ancho banda de energía prohibida mayor (por ejemplo, $Al_{1-x}Ga_xN$) denominado barreras, como se puede apreciar en la figura 2.1

Los materiales semiconductores han sido considerados por la comunidad científica en las últimas décadas, en particular los compuestos III-V, por sus numerosas aplicaciones en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. La aparición de estas aleaciones semiconductoras incrementa enormemente el abanico de propiedades de estos materiales puesto que, eligiendo la composición adecuada, se puede controlar características tales como: el ancho de banda de energía prohibida o el parámetro de red.

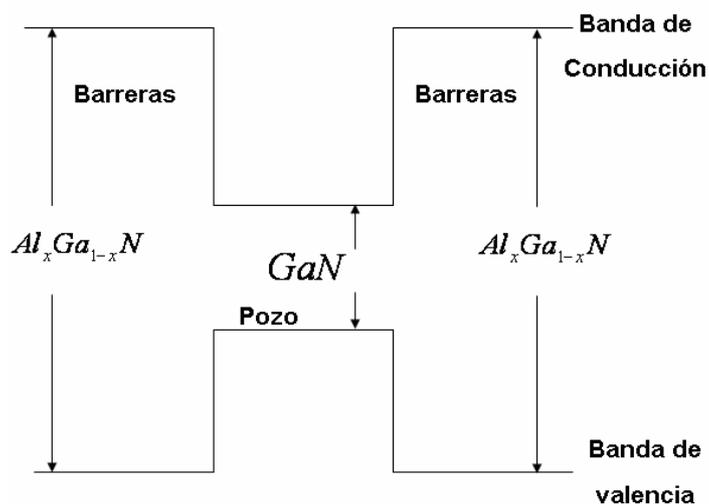


FIGURA 2.1 Estructura de bandas del *QW* de $Al_{1-x}Ga_xN/GaN$.

Los nitruros del grupo III (GaN , AlN , InN y sus aleaciones ternarias) se han revelado como los materiales más prometedores para la fabricación de fotodetectores y emisores de luz en el rango del UV basados en semiconductores. Esto gracias a la banda de energía prohibida directa, que proporciona coeficientes de absorción elevados y una insensibilidad intrínseca a la radiación visible. Entre otras ventajas se incluyen la posibilidad de fabricar dispositivos de heterounión y de seleccionar la longitud de onda de corte modificando la fracción molar de los compuestos ternarios.

2.3 Propiedades de los nitruros del grupo III.

Los nitruros del grupo III, han atraído un gran interés debido a sus excelentes propiedades físicas que incluyen grandes valores del gap de energía, elevados módulos de volumen, y excelentes conductividades térmicas. Estas propiedades los hacen adecuados en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos como diodos emisores de luz ($LEDs$) y diodos láser, donde estos materiales pueden trabajar en un amplio rango del espectro electromagnético. En particular, el GaN es uno de los materiales más prometedores para fabricar diodos láser azules. Actualmente, se han hecho esfuerzos para crecer GaN de alta calidad sobre diferentes sustratos y bajo diversas condiciones. La habilidad de formar aleaciones y heteroestructuras con AlN y InN son otra de las razones adicionales para estudiar el GaN .

2.3.1 Estructura cristalina y estructura de bandas

Dos estructuras cristalinas se presentan en los nitruros del grupo III: la estructura zinc-blenda y la estructura wurtzita. Estas estructuras tienen un ancho de banda de energía prohibida en el rango que va de 1.89 eV para el InN , 3.44 eV para el GaN y 6.2 eV para el AlN (a la temperatura de 300 K). Esta es una de las razones por la que estos nitruros III-V pueden ser utilizados en dispositivos ópticos que activen los rangos de longitudes de onda desde el rojo (625-740 nm) hasta el ultravioleta (210 nm) (ver tabla 2.3). Tal como se muestra en la figura 2.2 las aleaciones de $AlGaN$ poseen anchos de banda de energía

prohibida en el *UV*, por otro lado las aleaciones de *InGaN* tienen aplicaciones en el visible cuando se incrementa el contenido de Indio.

TABLA 2.3 Longitud de onda y color de los nitruros del grupo III.

| <i>Compuesto</i> | <i>Color</i> | <i>Longitud de onda (nm)</i> |
|------------------|---------------|------------------------------|
| <i>AlN</i> | UV | 210 |
| <i>GaN</i> | Azul-UV | 250-395 |
| <i>InN</i> | Amarillo-Rojo | 400-800 |

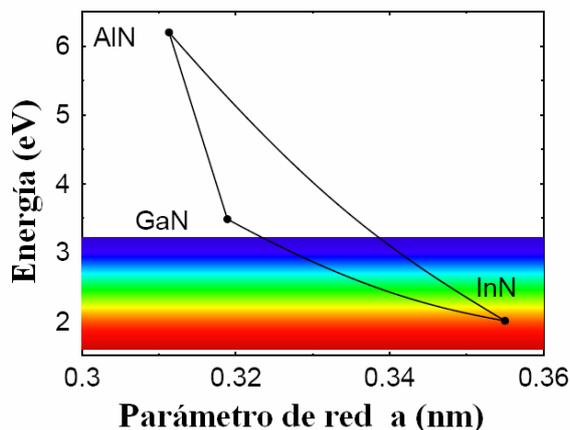


FIGURA 2.2 Diagrama esquemático del ancho de banda de energía prohibida de nitruros del grupo III en función de la constante de red.

2.3.2 Estructura Zinc Blenda

La fase zinc-blenda consiste de dos estructuras cúbicas centradas en las caras (*FCC*) (ver figura 2.3), desplazadas una con respecto a la otra de un cuarto de la diagonal principal [12]. Para compuestos binarios es equivalente a la estructura del diamante. Pertenece al sistema cúbico y al grupo espacial *F43m*.

Los vectores de red están definidos por

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2}(0,1,1), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2}(1,0,1), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2}(1,1,0), \quad (2.1)$$

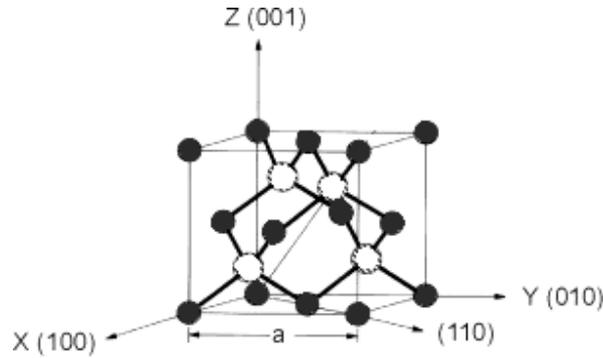


FIGURA 2.3 Estructura cristalina zinc blenda del *GaN*. Los círculos sólidos representan los átomos de Galio y los círculos abiertos representan los átomos de *N*.

y en esta base la posición de los átomos en la celda es

$$\vec{\tau}^1 = (0,0,0), \quad \vec{\tau}^2 = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right). \quad (2.2)$$

2.3.3 Estructura Wurtzita

La estructura wurtzita (ver figura 2.4) pertenece al sistema hexagonal, debido a que esta estructura se puede describir como dos distribuciones *HCP* (hexagonal compacto) interpenetradas en las posiciones de coordinación tetraédrica y el grupo espacial asociado es $P6_3mc$.

Su celda unidad (ver figura 2.5) esta formada por cuatro átomos, dos de cada especie, posee un parámetro interno u cuyo valor es 0.375 (u es el parámetro definido como la longitud de enlace anión catión en la dirección del eje $[0001]$), y presenta un parámetro estructural c/a , cuyo valor es 1.633.

Los vectores de red están definidos por

$$\vec{a}_1 = a(1,0,0), \quad \vec{a}_2 = a\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\right), \quad \vec{a}_3 = a\left(0,0,\frac{c}{a}\right), \quad (2.3)$$

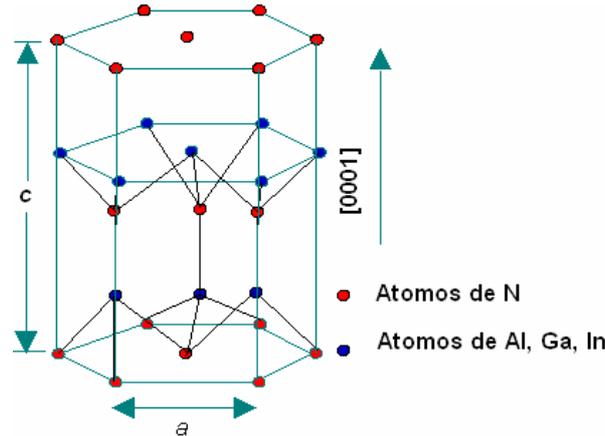


FIGURA 2.4 Estructura cristalina wurtzita. Los círculos rojos representan los átomos de N y los azules los átomos de Al o Ga o In , a y c los parámetros de red.

y en esta base la posición de los átomos en la celda es

$$\vec{\tau}_1 = (0,0,0), \quad \vec{\tau}_2 = (0,0,-4), \quad \vec{\tau}_1 = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2}\right), \quad \vec{\tau}_2 = \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2} - u\right). \quad (2.4)$$

Las constantes de red para esta estructura, se muestran en la tabla 2.4. Como se puede observar las constantes de red varían fuertemente de tamaño relativo, desde un 2.5 % para GaN/AlN hasta un 11% para InN/GaN .

La ley de Vegard expresa que la constante de red de una aleación ternaria semiconductor muestra una dependencia lineal con la concentración x , usando los valores de compuestos binarios conocidos, por ejemplo:

$$a_{Al_xGa_{1-x}N} = (1-x)a_{GaN} + xa_{AlN},$$

$$a_{In_xGa_{1-x}N} = (1-x)a_{GaN} + xa_{InN},$$

$$a_{Al_xIn_{1-x}N} = (1-x)a_{InN} + xa_{AlN}.$$

TABLA 2.4 Constantes de red de los nitruros III a temperatura ambiente en fase wurtzita [13]. En la primera columna se presenta el compuesto, en la segunda columna el parámetro de red a en unidades de Å en y en la tercera columna el parámetro de red c en unidades de Å.

| <i>Compuesto</i> | a [Å] | c [Å] |
|------------------|---------------------|---------------------|
| <i>AlN</i> | 3.11 ± 0.002 | 4.978 ± 0.002 |
| <i>GaN</i> | 3.1892 ± 0.0009 | 5.1850 ± 0.0005 |
| <i>InN</i> | 3.54 ± 0.008 | 5.8 ± 0.1 |

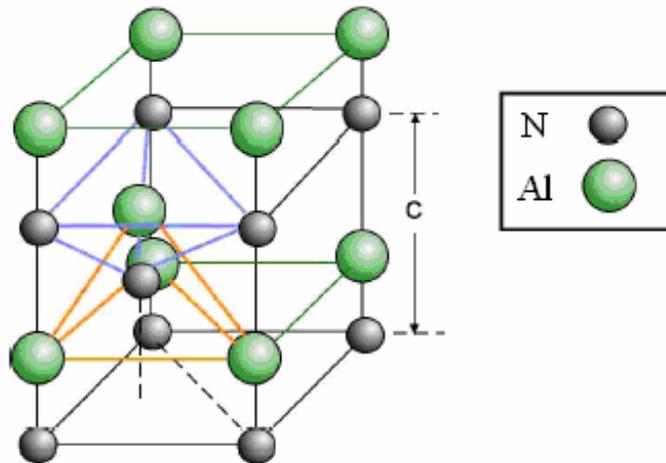


FIGURA 2.5 Celda unidad de la estructura cristalina wurtzita

En cambio, otras propiedades como el ancho de banda de energía prohibida presentan un comportamiento cuadrático con la concentración, por ejemplo:

$$E_g (Al_{1-x}Ga_xN)_{\text{sin deformar}} = xE_g (AlN) + (1-x)E_g (GaN) - 0.8x(1-x).$$

La estructura de bandas de los nitruros del grupo III tiene ancho de banda de energía prohibida directo (en el punto Γ). El ancho de banda de energía prohibida directo de nitruros con estructura wurtzita es mostrado en la tabla 2.5.

En la figura 2.6 se presenta la estructura de bandas para la estructura wurtzita no tensionada del *GaN* alrededor del punto Γ . La banda de valencia en semiconductores hexagonales es dividida en tres sub-bandas separadas, que corresponden a las tres bandas que han sido etiquetadas con *HH* (huecos pesados), *LH* (huecos ligeros) y *CH* (campo cristalino). La parte mas alta de la banda de valencia y el fondo de la banda de conducción están formados por estado *s* y *p*.

TABLA 2.5 Ancho de banda de energía prohibida de los nitruros III en fase wurtzita a 5 K y a temperatura ambiente [14, 15, 16]. En la primera columna se muestra el compuesto, en la segundo columna el ancho de banda de energía prohibida a 5 K en unidades de eV y en la última columna el ancho de banda de energía prohibida a 300 K en unidades de eV.

| <i>Compuesto</i> | E_g (5 K) [eV] | E_g (300 K) [eV] |
|------------------|------------------|--------------------|
| <i>AlN</i> | 6.28 | 6.2 |
| <i>GaN</i> | 3.5 | 3.44 |
| <i>InN</i> | 1.91 | 1.89 |

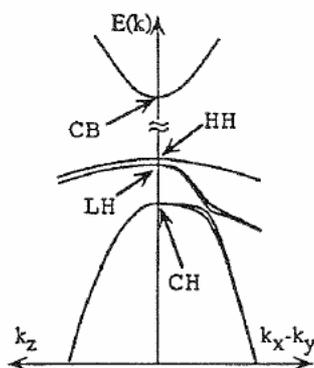


FIGURA 2.6 Diagrama esquemático de la estructura de bandas de *GaN* (en fase wurtzita) a lo largo de la dirección k_z y en el plano k_x-k_y [17].

2.4 Polarización espontánea

La existencia de cargas muy próximas a nivel molecular genera dipolos eléctricos. Cuando los dipolos constituyentes de la materia se alinean, debido a un campo eléctrico externo o espontáneamente (ferroeléctricos). Se dice que la sustancia está polarizada.

La polarización espontánea es la polarización a esfuerzo cero y en el caso de los nitruros es intensa [24]. Para la estructura wurtzita, la polarización depende de los parámetros estructurales, tal como se puede observar en la tabla 2.6, la diferencia en la polarización entre *AlN* y *GaN* es grande, en comparación con la polarización del *GaN* y la del *InN*, cuya resta en la polarización es pequeña. Estas polarizaciones inducen campos eléctricos del orden de MV/cm y afectan dramáticamente las propiedades ópticas en estas estructuras.

TABLA 2.6 Polarización espontánea para materiales III-V en fase wurtzita [9]. En la primera columna se presenta el compuesto y en la segunda columna la polarización espontánea en unidades de C/m^2 .

| <i>Compuesto</i> | $P_{sp}(C/m^2)$ |
|------------------|-----------------|
| <i>AlN</i> | -0.090 |
| <i>GaN</i> | -0.034 |
| <i>InN</i> | -0.042 |

La polarización espontánea surge debido a la fuerte electronegatividad¹ del nitrógeno (3) comparado con *Al* (1.5), *Ga*. (1.6) e *In* (1.7), el electrón apantallado es atraído hacia el *N* en Nitruros III. Esto da como consecuencia la deformación de la estructura tetraédrica regular (ver figura 2.7), produciéndose un rompimiento en la simetría de tal forma que la fracción c/a llega ser más pequeño que el de una tetraédrica ideal ($c/a=1.633$). De esta forma se experimenta una polarización espontánea a lo largo de la dirección [0001] sin

¹ La **electronegatividad** es una medida de fuerza de atracción que ejerce un átomo sobre los electrones de otro, en un enlace covalente.

aplicar campo eléctrico externo. El coeficiente de la polarización espontánea puede ser determinado por cálculos *abinitio* [14].

La mayoría de los compuestos III-V cristalizan en la estructura zinc-blenda, excepto los compuestos III-nitruros la fase cúbica es metaestable a temperatura ambiente y su forma más estable termodinámicamente es la estructura wurtzita. Los nitruros cúbicos son más difíciles de sintetizar por que no existen substratos cúbicos que emparejen con la constante de red.

V. Fiorentini *et al.* en 2002, reportaron que la polarización espontánea presenta un término no lineal en la concentración [15] en las aleaciones $Al_xGa_{1-x}N$, $In_xGa_{1-x}N$ y $Al_xIn_{1-x}N$, las cuales están determinadas por las siguientes ecuaciones:

$$P_{Al_xGa_{1-x}N}^{sp} = -0.09x - 0.034(1-x) + 0.019x(1-x), \quad (2.5)$$

$$P_{In_xGa_{1-x}N}^{sp} = -0.042x - 0.034(1-x) + 0.038x(1-x), \quad (2.6)$$

$$P_{Al_xIn_{1-x}N}^{sp} = -0.09x - 0.042(1-x) + 0.071x(1-x). \quad (2.7)$$

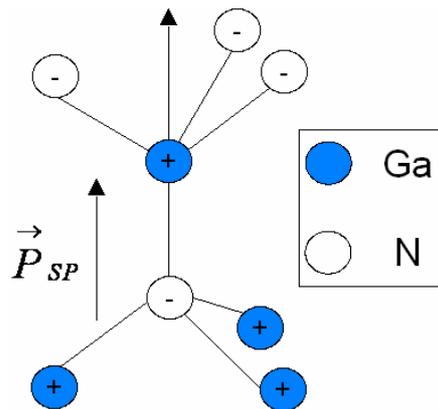


FIGURA 2.7 Polarización espontánea en el GaN

Y campo eléctrico generado por la polarización espontánea esta dado por la siguiente relación

$$\vec{F}^{sp} = -\frac{\vec{P}^{sp}}{\epsilon_0 \epsilon_r}$$

donde ϵ_0 es la permitividad en el vacío y ϵ_r es la constante dieléctrica del material.

La existencia de polarización espontánea diferente de cero es una consecuencia de la baja simetría de la estructura wurtzita, comparada con la estructura zinc blenda, para la cual la polarización espontánea se desvanece [16,17].

2.5 QW's deformados

En la presente sección se describe los efectos de la deformación en *QW's*. Uno de ellos, es el de romper con la degeneración en el borde de la banda de valencia, entre huecos pesados y ligeros y separar en energía ambas bandas, disminuyendo en forma apreciable su interacción.

2.5.1 Deformación mecánica

Una fuerza mecánica que actúa sobre una estructura cristalina, cambia las posiciones relativas de los sitios de la red. Conociendo los desplazamientos relativos de cada sitio de la red, la deformación del cristal puede ser descrita por las componentes del tensor de deformación dado por la siguiente ecuación:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial u_j} + \frac{\partial u_j}{\partial u_i} \right), \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.8)$$

donde u_1 , u_2 y u_3 son los desplazamientos relativos de los puntos del cristal a lo largo de los ejes x_1 , x_2 y x_3 , respectivamente. El tensor de deformación es simétrico y puede ser escrito como:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{12} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{13} & \varepsilon_{23} & \varepsilon_{33} \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

el tensor de tensiones es el que da cuenta de la distribución de tensiones y esfuerzos internos en el medio continuo viene dado por una matriz simétrica ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ ($i, j = 1,2,3$)), cuyas componentes son (ver figura 2.8):

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Los elementos de la diagonal del tensor de tensiones son de especial importancia en aplicaciones. Si solamente σ_{11} es diferente de cero entonces la tensión es uniaxial, mientras si ambas σ_{11} y σ_{22} son diferentes de cero la tensión es biaxial.

En el límite de la teoría de elasticidad lineal la deformación y la tensión están conectadas por la ley de Hooke la cual expresa:

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 S_{ijkl} \sigma_{kl}, \quad (2.9)$$

donde S_{ijkl} son los coeficientes de elástica que forman un tensor de cuarto orden. En la literatura la tensión es expresada en función de la deformación y la ley de Hooke toma la forma

$$\sigma_{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (2.10)$$

con C_{ijkl} son los constantes elásticas del material en consideración. Este tensor es de orden cuatro, es decir tiene $3^4 = 81$ componentes. Pero tanto ε_{ij} como σ_{ij} son simétricos por lo cual deben existir relaciones entre las componentes de C_{ijkl} :

$$C_{ijkl} = C_{jikl} \quad (2.11)$$

$$C_{ijkl} = C_{ijlk} \quad (2.12)$$

Y debido a la existencia de una función *energía de deformación*, debe cumplirse:

$$C_{ijkl} = C_{klij} \quad (2.13)$$

Haciendo uso de las ecuaciones anteriores se concluye que sólo 6 componentes del tensor de módulos elásticos son independientes.

Para usar una notación más compacta, se pasa a un único subíndice:

$$\sigma_i = \sum_{k=1}^6 C_{ik} \varepsilon_k, \quad (2.9)$$

o lo que es equivalente:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

donde C_{ik} son las constantes elásticas. La Ec. (2.10) también puede ser escrita como

$$\sigma_i = C_{ij} \varepsilon_j, \quad i, j = 1, 2, \dots, 6 \quad (2.11)$$

Las redes cristalinas regularmente exhiben simetrías, las cuales reducen el número de constantes necesarias para describir su comportamiento elástico. El número de elementos de matriz independientes para los semiconductores son: 3 para la estructura cúbica y 5 para la estructura hexagonal. La matriz C puede ser escrita para semiconductores con estructura cúbica de la siguiente forma

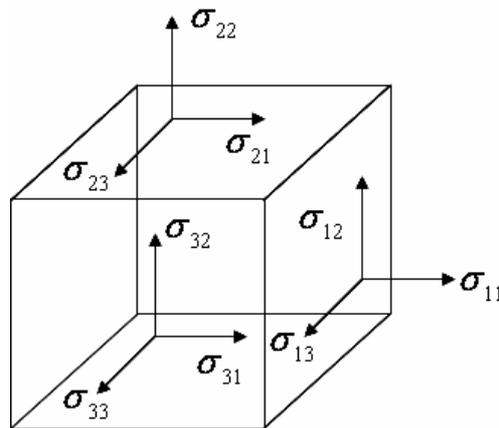


FIGURA 2.8 Definición del tensor de tensiones [18]

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{12} & C_{31} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

y para semiconductores con estructura hexagonal

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Si una capa epitaxial delgada es depositada sobre un sustrato más pequeña entonces la constante de red a_l en el plano de crecimiento (perpendicular a la dirección de crecimiento) será forzada a igualar la constante de red del sustrato a_0 , experimentando un esfuerzo biaxial a lo largo de la interfase de crecimiento. Por consiguiente, el tensor de tensiones tendrá dos componentes σ_{11} y σ_{22} sobre la diagonal y por lo tanto se puede ser escrito como:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

La existencia de una tensión biaxial da como resultado un plano deformado. En tal caso, la deformación puede ser calculada a través de la siguiente fórmula:

$$\varepsilon_{\parallel} = \frac{a_0 - a_l}{a_l} \quad (2.15)$$

La constante de red de la capa epitaxial puede ser mayor o menor que la constante de red del sustrato tal como se muestra en la figura 2.9, en donde las tres redes tienen diferente parámetro de red con: $a_0 < a_l$ (material A) y $a_0 > a_l$ (material B) al lado izquierdo, a mano derecha se muestra la estructura de bandas alrededor del punto Γ , en la cual se observa que la banda de huecos ligeros etiquetada con la letras LH se encuentra degenerada con la banda de huecos pesados (HH).

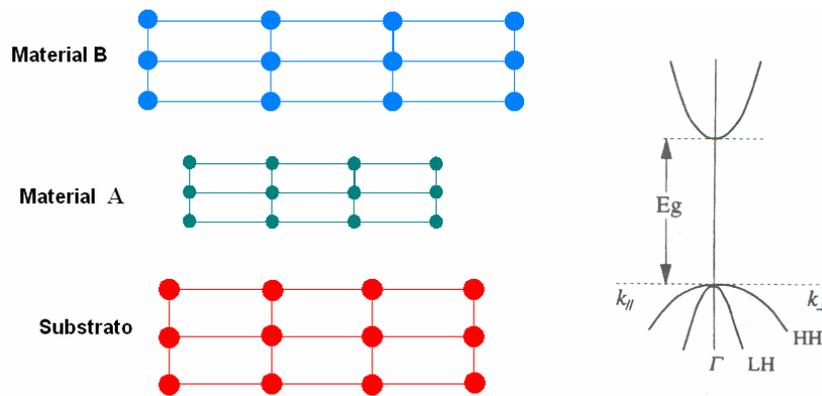


FIGURA 2.9 Diagrama de tres cristalinicas redes que tienen diferente parámetro de red, con la característica que $a_0 < a_l$ (material A) y $a_0 > a_l$ (material B) y la respectiva estructura de bandas en el punto Γ cuando no hay deformación.

En la figura 2.10 se muestra la situación cuando el material A es crecido sobre el sustrato, presentando una deformación por alargamiento ($\varepsilon_{\parallel} > 0$) al lado izquierdo y al lado derecho la estructura de bandas en el punto Γ , en la cual se observa que disminuye el ancho de banda de energía prohibida y la degeneración de las bandas de valencia se pierde. Por otra parte, en la figura 2.11 se muestra el caso opuesto ($\varepsilon_{\parallel} < 0$) al lado izquierdo y al lado derecho la estructura de bandas alrededor del punto Γ , en la cual se observa que al igual que en la figura 2.10 la pérdida de simetría en el punto Γ y el aumento del ancho de banda de energía prohibida.

Por otra parte la deformación en las capas epitaxiales cambia la geometría de la red, que da lugar a un cambio en la estructura electrónica, en particular, de los bordes de la banda de conducción y de valencia y por consiguiente un cambio en los niveles de energía. De la teoría de perturbaciones el cambio de energía debido a la deformación puede ser expresado como

$$\delta E_c = \sum_{i,j} D_{ij} \varepsilon_{ij} \quad (2.16)$$

donde D_{ij} representa las componentes del potencial de deformación y forma un tensor de segundo rango.

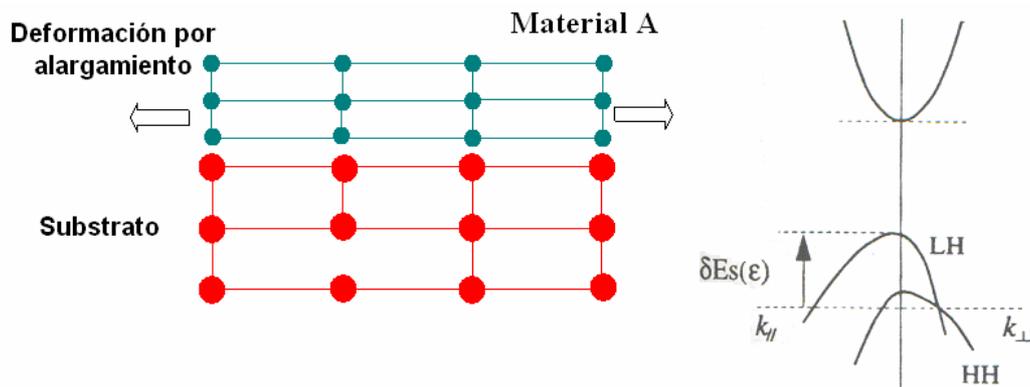


FIGURA 2.10 Diagrama de dos cristalinicas redes con tienen diferente parámetro de red, con la característica que $a_0 < a_l$ (material A) y la respectiva estructura de bandas en el punto Γ cuando se presenta deformación por alargamiento.

Para la banda de conducción, en el punto Γ en semiconductores con estructura cúbica, todos los elementos fuera de la diagonal se desvanecen $D_{ij} = 0$ (para $i \neq j$), dejando tres elementos de la diagonal principal diferentes de cero, estos son: $D_{11} = D_{22} = D_{33}$ para el caso isotrópico, con lo cual la Ec. (2.11), toma la forma

$$\delta E_c^{CUBICA} = D_{11}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22} + \varepsilon_{33}) \quad (2.17)$$

En cristales con estructura hexagonal, el cambio de energía debido a la deformación es dado por:

$$\delta E_c^{HEX} = D_{11}(\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) + D_{33}\varepsilon_{33} \quad (2.18)$$

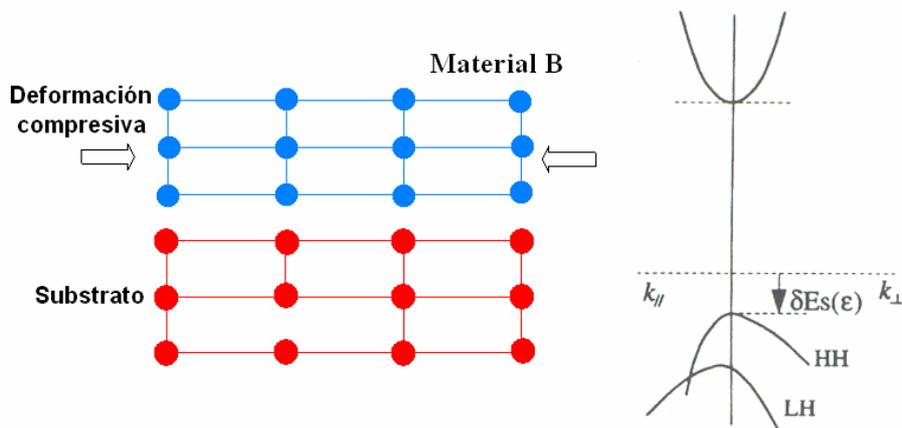


FIGURA 2.11 Diagrama de dos redes cristalinas con diferentes parámetros de red, con la característica que $a_0 > a_l$ (material B) y la respectiva estructura de bandas en el punto Γ cuando se presenta deformación compresiva.

2.5.2 Deformación por polarización piezoeléctrica

Cuando se aplican tensiones a cristales, estos adquieren una polarización eléctrica en su masa, apareciendo una diferencia de potencial y cargas eléctricas en su superficie. Además, la geometría de la estructura cristalina cambia debido a que la tensión actúa para separar las cargas y romper la neutralidad electrostática en el cristal (ver figura 2.12).

Si se aplica una tensión arbitraria actuando sobre el cristal, entonces la polarización inducida puede ser escrita como:

$$P_i = \sum_{k=1}^6 d_{ik} \sigma_k \quad (2.19)$$

Donde d_{ik} son los módulos piezoeléctricos. La polarización piezoeléctrica en la estructura wurtzita bajo una deformación biaxial es dado por

$$P_3 = 2\varepsilon_{11} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad (2.20)$$

donde

$$\begin{aligned} e_{31} &= (c_{11} + c_{12})d_{13} \\ e_{33} &= 2c_{13}d_{13} + c_{33}d_{33} \\ e_{15} &= c_{44}d_{15} \end{aligned}$$

La polarización total es la suma de la polarización espontánea y piezoeléctrica ($\vec{P} = \vec{P}_{sp} + \vec{P}_{pz}$) y el campo eléctrico es dado por

$$\vec{F} = -\frac{\vec{P}}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \quad (2.21)$$

donde ε_0 es la permitividad en el vacío y ε_r es la constante dieléctrica del material.

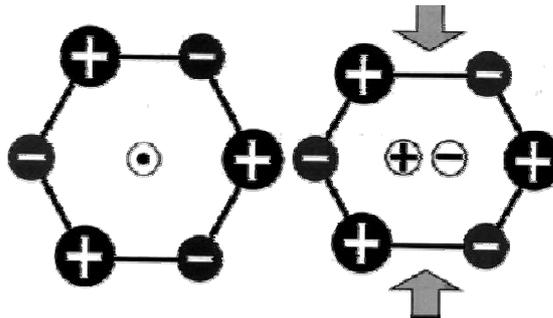


FIGURA 2.12 Diagrama esquemático de la separación de carga en *GaN* crecido a lo largo de la dirección [0001], que causa la apariencia de una polarización descargada. Al lado izquierdo se muestra la red cristalina no tensionada, y al lado derecho se muestra las posiciones atómicas cuando la red cristalina está sujeta a tensión.

Para entender la influencia de los campos piezoeléctricos en el perfil de la estructura electrónica, se considera un QW basado en un material piezoeléctrico con una constante dieléctrica uniforme, entonces la magnitud del campo eléctrico en el QW , asumiendo barreras idénticas esta dada por

$$F = \frac{(P_{b,w} - P_{w,b})l_{b,w}}{\varepsilon(l_w + l_b)} \quad (2.22)$$

donde $P_{w,b}$ son las magnitudes de la polarización en el pozo y la barrera respectivamente y ε es la constante de permitividad. Los campos eléctricos en el pozo y la barrera pueden ser de signo opuesto. Esto puede ser expresado analíticamente mediante la siguiente ecuación

$$F_w l_w + F_b l_b = 0 \quad (2.23)$$

lo que implica que la distribución del campo eléctrico a través de la estructura es proporcional de los anchos de las capas.

El campo piezoeléctrico altera el perfil de la estructura de bandas, lo cual puede ser representado por el siguiente potencial con respecto al sistema de coordenadas de la figura 2.13.

$$V(z) = \begin{cases} eF_b z + V_b, & \text{para } z < 0 \\ eF_w z, & \text{para } 0 < z < l_w \\ eF_b z + V_b + F_w l_w, & \text{para } z > l_w \end{cases} \quad (2.24)$$

donde l_w es el ancho del pozo y V_b es el alto de la barrera.

Otro importante efecto del campo piezoeléctrico es el apantallamiento por electrones libres. El potencial lineal causa que los electrones se reúnan alrededor de las interfaces

induciendo cargas. Si la densidad de portadores en el QW es comparable a la densidad de cargas inducidas por el efecto piezoeléctrico el campo electrostático debido a los electrones libres puede ser anulado por el campo piezoeléctrico. Sin embargo, como la carga inducida en las interfaces es usualmente mucho más grande que el límite de dopamiento en el QW este efecto de apantallamiento no es pronunciado.

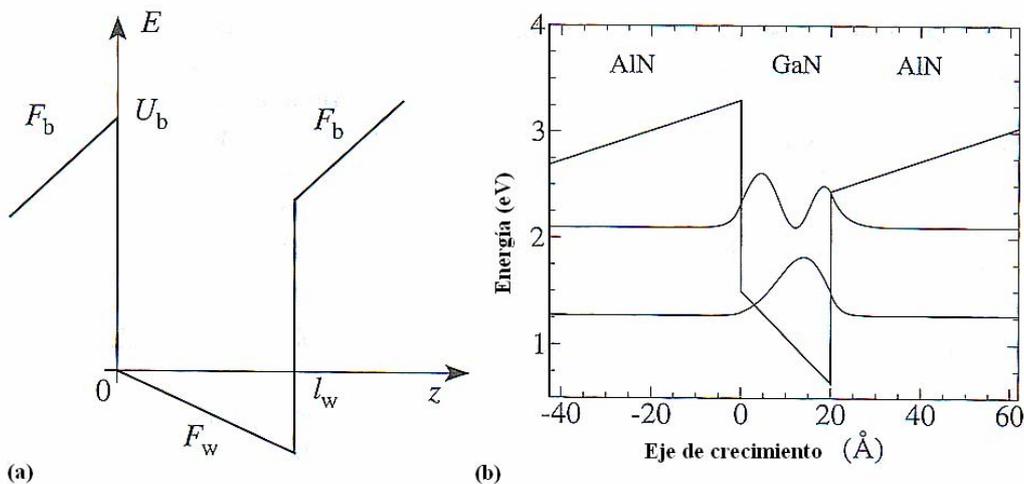


FIGURA 2.13 (a) diagrama esquemático del campo eléctrico inducido en QW basado en materiales piezoeléctricos. (b) Estructura de bandas del GaN/AlN con las funciones de onda de el estado base y el primer estado excitado [18].

El cambio del perfil de la banda debido al campo piezoeléctrico puede tener una fuerte influencia en las energías de transición, como se puede observar en la figura 2.14. En esta figura al lado izquierdo se muestra una comparación entre las energías de transición las subbandas más bajas en QW 's de $AlGaN/GaN$ con y sin campo eléctrico externo.

El campo piezoeléctrico puede modificar considerablemente las propiedades de localización de las funciones de onda, disminuyendo o incrementando el traslape entre el estado base y el primer estado excitado. Esto se puede reflejar en el elemento de matriz

bipolar definido como $z_{ij} = \langle \Psi_i | z | \Psi_j \rangle$ y consecuentemente en las propiedades ópticas de intrabanda de los QW 's.

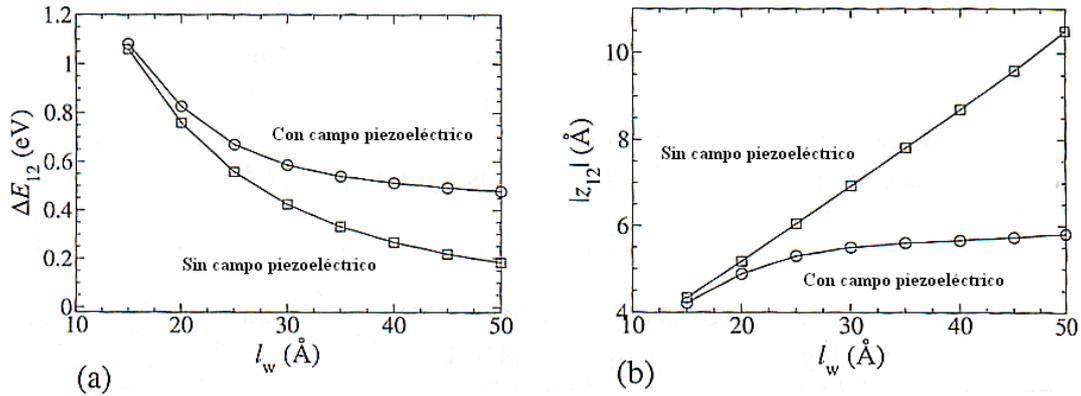


FIGURA 2.14 Ilustración de la influencia del campo piezoeléctrico sobre las propiedades ópticas y electrónicas de las propiedades de GaN/AlN como función del ancho del QW (l_w), (a) La diferencia de energía y (b) el elemento de matriz bipolar [19].

2.6 Efectos de segregación en los niveles de energía en QW 's de $InGaN/GaN$

Un efecto a considerar en el QW de $InGaN/GaN$ es la segregación de átomos de indio durante el crecimiento de los QW 's que conduce a interfaces no abruptas entre los semiconductores $InGaN$ y GaN . La segregación es el proceso mediante el cual las diferencias de energía elástica y de enlace entre los sitios de volumen y la superficie resultan en la migración de una clase de átomo. En el caso del $In_xGa_{1-x}N$ crecido sobre GaN por epitaxia de haces moleculares, los átomos de Indio no se incorporan de inmediato en las capas que van creciendo, sino que una cierta cantidad de átomos de Indio permanece en la superficie sin incorporarse en el cristal. Esto conduce a un perfil de concentración de Indio dentro del pozo. Al término del depósito y comienzo del crecimiento de la segunda barrera, el Indio segregado se incorporará gradualmente en esta segunda barrera produciendo un perfil de Indio dentro del pozo. La aleación de $InGaN$ es de interés, puesto que la incorporación de In en el GaN produce una gran variación del ancho de banda de energía

prohibida. Como el ancho de banda de energía prohibida del *c-GaN* (*c-GaN* fase cúbica del *GaN*) esta alrededor de 3,2 eV [20] y el ancho de banda de energía prohibida del *InN* está alrededor de 0,9 eV [21], en otras palabras, se puede tener anchos de banda de energía prohibida de esta aleación que van desde el *UV* hasta el infrarrojo (*IR*) pasando por el espectro visible.

Para diferentes concentraciones de Indio correspondientes a diferentes rangos de temperatura de crecimiento, el perfil del potencial debido a la segregación ha sido calculado usando las ecuaciones propuestas por Muraki *et al.* [22]. Muraki cuantifica este efecto en términos del coeficiente de segregación *R*, que representa la probabilidad de que un átomo de *Indio* ceda su lugar a un átomo de *Galio* producto del crecimiento de la estructura, lo cual da la concentración de Indio de la *n*-ésima monocapa para una concentración nominal de Indio x_0 , dada por la siguiente ecuación

$$x_n = \begin{cases} x_0(1 - R^N) & 1 \leq n \leq N, \text{ en el pozo} \\ x_0(1 - R^N)R^{N-1} & n \geq N, \text{ en la barrera} \end{cases} \quad (2.1)$$

donde *N* es el número total de monocapas de *InGaN/GaN* en el pozo cuántico. En la figura 2.15 se presenta el perfil de concentración de *Indio* para el pozo cuántico *In_{0,2}Ga_{0,8}N/GaN* con y sin segregación de *Indio* tomando en cuenta el modelo de Muraki. En esta figura la línea sólida representa el caso cuando el coeficiente de segregación es 0.8, en donde los átomos de *Indio* son redistribuidos a lo largo del eje de crecimiento y modifica la banda de valencia y la banda de conducción y la línea trazos representa el caso cuando coeficiente de segregación es cero.

Otros estudios presentan un análisis de la segregación de la superficie de los átomos de *In* durante el crecimiento de estructuras semiconductoras por *epitaxia de haces moleculares (MBE)* y su influencia en los *niveles de energía* en *pozos cuánticos (QW's)* sujetos a

campos piezoeléctricos de *InGaAs/GaAs* y *InGaN/GaN* para campos moderados [24, 25, 26].

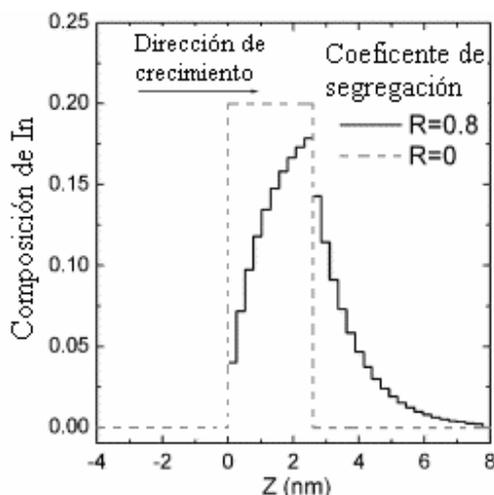


FIGURA 2.15 Perfil de segregación de Indio para el pozo cuántico $In_{0.2}Ga_{0.8}N/GaN$ con y sin segregación de Indio tomando en cuenta el modelo de Muraki [22]. La línea sólida representa el caso cuando el coeficiente de segregación es 0.8 y la línea trazo representa el caso cuando coeficiente de segregación es cero.

2.7 Propiedades ópticas

Uno de los objetivos de la física de la materia condensada es explicar y predecir las propiedades de los sólidos a partir de los átomos constituyentes. El empleo de mediciones ópticas ha sido una de las formas tradicionales para el entendimiento de las propiedades de los átomos y al mismo tiempo las mediciones ópticas son una herramienta poderosa que nos permiten determinar las posibles aplicaciones que de los materiales y en particular de los semiconductores.

En esta sección se va a restringir al caso de la fotoluminiscencia en semiconductores describiendo aspectos generales de esta técnica.

2.7.1 Fotoluminiscencia en semiconductores

Se refiere a la emisión de *radiación óptica* que experimenta un material, resultado de la excitación a un estado fuera de equilibrio por la radiación con la luz. La fotoluminiscencia es una técnica de caracterización no destructiva, empleada para el análisis de propiedades extrínsecas e intrínsecas de semiconductores y de heteroestructuras cuánticas. En semiconductores la emisión de luz es claramente un proceso de no equilibrio, debido a las transiciones ópticas de portadores entre un estado de energía inicial $i\rangle$ y otro final $f\rangle$ con emisión de fotones, el estado inicial es un estado excitado, de forma que alcanza el equilibrio al ceder energía. Existen dos formas de disminuir la energía del sistema electrónico puede ser no radiativa (emisión de fonones, captura por centros profundos, efecto Auger) o radiativa (emisión de fotones). Consecuentemente, la emisión de luz no es el proceso inverso a la absorción, puesto que en el segundo caso hay una eficiencia del 100% mientras que en la emisión espontánea las transiciones radiativas son sólo una pequeña fracción de todos los posibles mecanismos de relajación. Por tanto, es relevante averiguar las probabilidades por unidad de tiempo de que ocurra un tipo de transición u otra, tanto radiativa como no radiativa. Si la probabilidad de transiciones no radiativa de un nivel a otro es mucho mayor que la probabilidad radiativa, entonces esta última transición apenas se observará en los experimentos de *PL*. En fotoluminiscencia el principal interés se presenta en las transiciones radiativas.

2.7.2 Transiciones radiativas a través de la brecha prohibida de energía en un semiconductor

Cuando un fotón incidente con energía mayor que la brecha de energía prohibida genera un par electrón-hueco en el semiconductor, la atracción coulombiana puede conducir a la formación de un estado excitado en la cual el electrón y el hueco permanecen ligados, este estado excitado se le denomina excitón libre. En la figura 2.16 se presenta los procesos de

recombinación electrón-hueco que se presentan en un semiconductor a través de la brecha de energía prohibida del semiconductor. Estos son:

1. Proceso de C→V. Transición de la banda de conducción a la banda de valencia, la cual se puede observar a altas temperaturas, ya que semiconductores sometidos a una excitación de alta intensidad, las interacciones electrón- electrón y hueco-hueco pueden ser más fuertes que las interacciones de portadores con los fonones.
2. Proceso de E→V. Es el decaimiento excitónico, presentado únicamente en materiales puros y a temperaturas bajas, cuando kT no es mayor que la energía de amarre del excitón. Son posibles dos procesos de decaimiento. El primero es emisión de excitones libres: el cual al recombinarse emite una línea espectral muy estrecha (del orden de 1.5 eV en GaAs). El excitón se puede visualizar como un hueco libre y un electrón libre, que por tener cargas opuestas experimentan una atracción coulombiana. Por lo tanto el electrón puede orbitar alrededor del hueco comportándose como un átomo hidrogenoide. El segundo proceso es emisión de excitones ligados: se presenta cuando se tiene impurezas en el semiconductor. La característica de emisión de los excitones ligados es que presentan una energía un poco menor que la correspondiente a un excitón libre.
3. Proceso de D→V. En esta transición un electrón ligado a un donador neutro se recombina con un hueco en la banda de valencia. La energía de transición es $E_g - E_D$. Estas transiciones sobre donadores con energías de ionización grandes ocurren por debajo de la energía de la brecha energética tal como se muestra en el proceso DD→V de la figura 2.16.
4. Proceso de C→A. En este proceso el electrón en la banda de conducción de un semiconductor intrínseco cae a un átomo aceptor que debería tener una energía $E_g - E_A$. Las transiciones desde la banda de conducción hasta los centros aceptores

profundos ocurrirán debajo de la brecha energética, tal como es mostrado en el proceso $C \rightarrow DA$ de la figura 2.16.

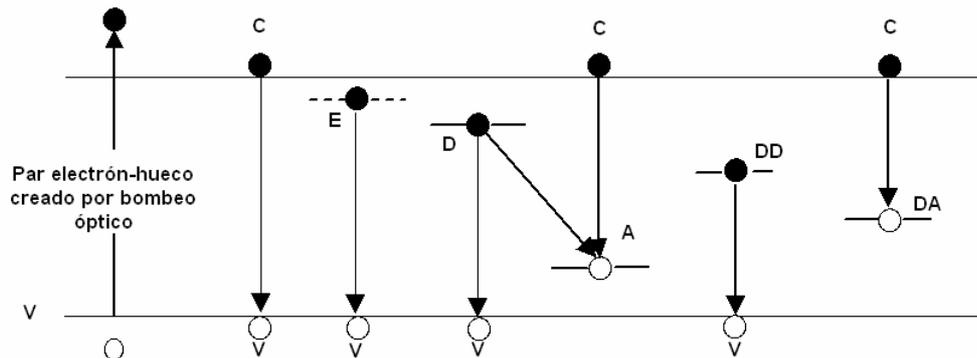


FIGURA 2.16 Procesos de recombinación electrón hueco a través de la brecha energética.

5. Proceso de $D \rightarrow A$. Si en el mismo semiconductor están presentes tanto los donadores como los aceptores, en suficiente cantidad, las transiciones pueden ocurrir cuando un electrón deja al donador neutral y va al aceptor neutral. Luego de la transición, tanto los aceptores como los donadores se ionizan, y a una distancia r , tienen una energía de amarre $E_b = -e^2/4\pi\epsilon_0 Kr$. La energía de transición debería ser $E_g - E_D - E_b - E_A$. Se espera ver una serie de picos abruptos para diferentes valores permitidos de r .

Efectos de la Segregación en las Propiedades Ópticas de los QW's

3.1 Introducción

La comunidad científica ha mantenido un interés creciente en los *QW's* basados en *GaN* durante los últimos años, debido a su impacto como material clave en la fabricación comercial de diodos emisores de luz (*LED*) y diodos láser (*LD*) en el rango del azul al ultravioleta (dispositivos optoelectrónicos de longitud de onda corta), lo que demostró convincentemente el enorme potencial de los nitruros del grupo III. Actualmente, los *QW's* basados en *InGaN/GaN* son usados como región activa en estos dispositivos. La calidad estructural es pobre en cuanto a la homogeneidad y a la presencia de interfaces abruptas que resulta de una fuerte diferencia química entre el *GaN* y *InN*, así como, de la falta de coincidencia entre el parámetro de red del material de la barrera y el parámetro de red del material del pozo, asociado con una alta densidad de dislocación. Se han realizado

una serie de esfuerzos dirigidos a investigar el origen de las variaciones en la composición, así como, su impacto en las propiedades ópticas [23].

Todos los nitruros del grupo III en fase wurtzita tienen una fuerte polarización macroscópica espontánea y coeficientes piezoeléctricos grandes, los cuales han sido reportados en cálculos *ab initio* [9, 10]. La variación abrupta de la polarización en la superficie e interfaces de la polarización de las cargas crean un campo eléctrico interno del orden de MV/cm . Este campo lineal inducido causa una separación espacial de los electrones y huecos confinados dentro de las capas activas de los dispositivos y por consiguiente consecuencias importantes sobre las propiedades ópticas de los diodos láser, diodos láser emisores de luz basados en nitruros. Los campos eléctricos debidos al efecto piezoeléctrico presentes en nitruros III-IV aparecen en presencia de tensión. El sistema *InGaAs/GaAs* es la heteroestructura pseudomórfica típica en la cual los campos eléctricos moderados pueden ser producidos.

En 2004 M. López *et al.*, crecieron *QW's In_xGa_{1-x}As/GaAs* por epitaxia de haces moleculares (*MBE*) sobre substratos *GaAs* orientados a largo de las direcciones $(11n)$, con $n=1,2,3,4$ donde las propiedades ópticas y estructurales de los dispositivos fueron estudiados por fotoluminiscencia, fotoreflexancia y medidas de microscopia de fuerza atómica [24].

Otro efecto a considerar en estas estructuras es la segregación en la superficie del Indio durante el crecimiento de los *QW's* que conduce interfaces no abruptas y superficies diferentes a las del volumen. Para diferentes concentraciones correspondientes a diferentes rangos de temperatura de crecimiento, el perfil del potencial ha sido calculado fenomenológicamente usando las ecuaciones propuestas por Muraki *et al.* [22]. El efecto de la segregación del Indio nos da el perfil de su concentración real dentro del pozo.

En 2006 H.J.R. Jinschek *et al.*, investigaron el comportamiento bajo esfuerzo de QW 's múltiples de $InGaN/GaN$ con una alta composición de *Indio*, usando microscopía electrónica de transmisión (*TEM*). Ellos encontraron que la posición del pico de emisión principal en QW 's múltiples con una concentración de *Indio* mayor que la concentración crítica es afectado significativamente por el aumento en el número de QW 's. Ellos identificaron un cambio al rojo debido a el aumento de el número de QW 's [27].

Inicialmente, en la sección 3.2 se describe el QW $InGaN/GaN$, especificando el cálculo de las energías entre el electrón confinado y los estados hueco fueron graficados como una función del ancho del pozo tomando en cuenta los efectos de segregación del *Indio* dentro de QW de $InGaN/GaN$. La Ec. de Schrödinger se resolvió analíticamente considerando un potencial simétrico, en donde el perfil del potencial del QW se parece a la forma de la barrera en el pozo debido a la segregación de los átomos de *Indio* en las heteroestructuras semiconductoras, luego en las secciones 3.3 y 3.4 se presenta una revisión de la literatura, resaltando los trabajos con los cuales se compararon los resultados obtenidos, posteriormente, en la sección 3.5 se discuten los resultados en la presente tesis con los trabajos reportados en la literatura y finalmente, en la sección 3.6 se expresan las conclusiones parciales del capítulo.

3.2 Modelo teórico

Este estudio se basa en la comparación del espectro de PL con el cálculo de la energía de transición entre el primer estado de huecos y el primer estado de electrones, el modelo teórico predice el perfil de la barrera y el pozo para ser incluidos en la ecuación de Schrödinger. Se ha empleado un potencial de confinamiento para la descripción de la segregación del indio, dado por la siguiente ecuación:

$$V_0(z) = -\frac{U(x)}{\cosh^2 \xi \left(\frac{z}{a} \right)}, \quad (3.1)$$

donde $U(x)$ representa el alto de la barrera del QW de ancho $2a$ y x es la concentración nominal del In, ξ es el parámetro de interdifusión. Llamando $\alpha_1 = \frac{\xi}{a}$ y realizando el cambio de variable $\chi = \tanh(\alpha_1 z)$; introduciendo la notación [28]

$$\alpha = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar \alpha_1}}, \quad (3.2)$$

$$\frac{2mV_0}{\alpha_1^2 \hbar^2} = s(s+1) \quad (3.3)$$

$$s = \frac{1}{2} \left[-1 + \sqrt{\left(1 + \frac{8mV_0}{\alpha_1^2 \hbar^2} \right)} \right], \quad (3.4)$$

en la ecuación de Schrödinger se obtiene [37]

$$\frac{d}{d\chi} \left[(1-\chi^2) \frac{d\psi}{d\chi} \right] + \left[s(s+1) - \frac{\alpha^2}{1-\chi^2} \right] \psi = 0. \quad (3.5)$$

Empleando el cambio de variable $\psi = (1-\chi^2)^{\alpha/2} w(\chi)$, se puede expresar la Ec. (3.5) como

$$u(1-u)w''(u) - (2u-1)(1+\alpha)w'(u) = (\alpha-s)(\alpha+s+1)w \quad (3.6)$$

La solución finita para $\chi = 1$ (es decir, para $z = \infty$), es

$$\psi_n(z) = (1 - \chi^2)^{\frac{\alpha}{2}} F\left[\alpha - s, \alpha + s + 1, \alpha + 1, \frac{1 - \chi}{2}\right], \quad (3.7)$$

donde $F(\sigma, \mu, \nu, y)$ la función hipergeométrica confluyente, y los eigenvalores de energía se obtienen de proponer

$$w = \sum A_n u^n \quad (3.8)$$

y remplazarla con sus respectivas derivadas en (3.43) se obtiene de la fórmula de recurrencia

$$\alpha = s - n \quad (3.9)$$

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \left(\frac{\xi}{a}\right)^2}{8m^*} \left[-(1 + 2n) + \sqrt{1 + \frac{8m^* V_0}{\hbar^2 \left(\frac{\xi}{a}\right)^2}} \right]^2 \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

y (3.10)

$$\varphi_n(z) = (1 - \chi^2)^{\frac{\alpha}{2}} F\left[\alpha - s, \alpha + s + 1, \alpha + 1, \frac{1 - \chi}{2}\right],$$

con m^* es la masa efectiva $\chi = \tanh \xi\left(\frac{z}{a}\right)$, $\alpha = \left[-\frac{2m^* E_n}{\hbar^2 (\xi/a)^2}\right]^{\frac{1}{2}}$, $\alpha - s = -n$, y $F(\sigma, \mu, \nu, y)$

la función hipergeométrica confluyente.

Existe evidencia experimental que la selección del perfil del potencial con segregación en estructuras de *InGaAs/GaAs* no es modelada con la suficiente aproximación por un potencial descrito por la Ec. (3.1). Esto es atribuido al hecho que la forma del potencial

calculado usando el modelo propuesto en la Ref. [22] da un potencial asimétrico. Sin embargo, en la presente tesis se ha hallado que la escogencia del potencial descrito por la Ec. (3.1) es útil para estudiar la segregación y por consiguiente entre la energía de transición entre el primer nivel de huecos y el primer nivel de electrones (1h-1e) en *QW*'s.

Se considera una partícula de carga e y masa efectiva m^* en un *QW* finito de ancho $2a$. El potencial del pozo cuántico como

$$V(z) = \begin{cases} V_0(z) + eFz, & |z| < a, \\ V_0(z), & z < -a \text{ y } z > a. \end{cases} \quad (3.11)$$

con F el campo eléctrico en el *QW*.

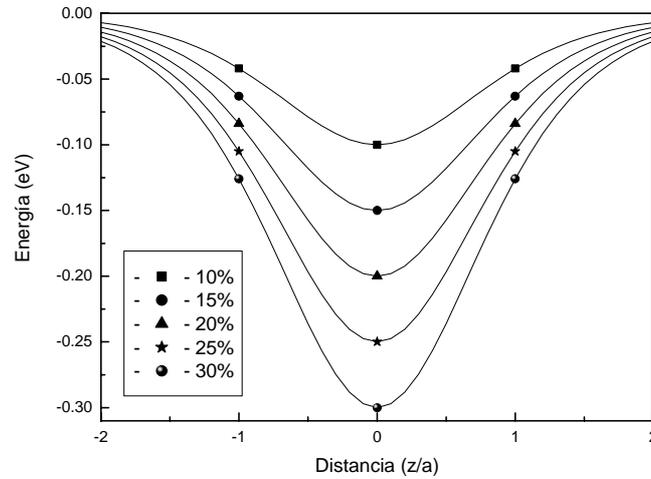


FIGURA 3.1 Perfil del pozo de potencial para diferentes concentraciones de Indio.

En presencia de un campo eléctrico, se calcula el estado base variacional de un *QW* delgado dentro de la aproximación de la masa efectiva, empleando una función de onda variacional de la forma [30]

$$\psi(z) = N_\beta \left(1 + \frac{\beta z}{2a}\right) \varphi_0(z) \quad (3.12)$$

donde $\varphi_0(z)$ es la función de onda del estado base no perturbado, β es el parámetro variacional y N_β es el factor de normalización definido como $N_\beta = [1 + (\beta/2a)^2 \langle z^2 \rangle]^{-1/2}$ con $\langle z^2 \rangle = \langle \mathbf{j}_0(z) | z^2 | \mathbf{j}_0(z) \rangle$. Usando las Ecs. (3.11) y (3.12) se calcula la energía del estado base empleando el método variacional, cuyo valor minimizado es

$$E(\beta) = E_0 + \frac{1}{N_\beta^2} \left[\frac{2e\beta \langle z^2 \rangle}{2a} + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m^* (2a)^2} \right] \quad (3.13)$$

E_0 es la energía del estado base con campo eléctrico cero y

$$\beta = \frac{2a\hbar^2}{4eFm^* \langle z^2 \rangle^2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{16e^2 F^2 m^* \langle z^2 \rangle^3}{\hbar^4}} \right], \quad (3.14)$$

dentro de esta aproximación, la energía de transición entre el primer nivel de huecos y el primer nivel de electrones (1h-1e) puede ser escrita como [31]

$$\delta E = E_g + E_e + E_{hh} + \delta \varepsilon_e + \delta \varepsilon_{hh}, \quad (3.15)$$

donde $\delta \varepsilon_e = E_e(\beta) - E_e$ y $\delta \varepsilon_h = E_h(\beta) - E_h$, E_g es el ancho de banda de energía prohibida del pozo, en la cual se han tenido en cuenta los efectos de la tensión y la temperatura y está dada por

$$E_g = E_g^{strain} + \Delta E - \frac{\lambda T^2}{\delta + T}, \quad (3.16)$$

E_g^{strain} representa el ancho de banda de energía prohibida del pozo dependiente de la concentración y el cambio de energía debido a la tensión. Los parámetros en el presente cálculo para el *InGaN* y *GaN* se presentan en las tablas 3.1 y 3.2 respectivamente.

TABLA 3.1. Variación de los parámetros como una función de la concentración de *In*.

| <i>Cantidad</i> | <i>Variación con x</i> |
|-----------------|----------------------------------------------------|
| $E_g^0 (eV)$ | $3.4(1-x) + 1.9x - 3.2x(1-x)^{32,33}$ (tensionado) |
| $m_e(m_0)$ | 0.2^{33} |
| $m_{hh}(m_0)$ | 1.1^{34} |

TABLA 3.2 Parámetros del *GaN*.

| | |
|------------------|-----------------------------|
| $\delta (eV/K)$ | $0.939 \times 10^{-3}^{34}$ |
| $\beta (K)$ | 772^{34} |
| $E_g^{GaN} (eV)$ | 3.4^{35} |

El desplazamiento de la banda de conducción es del 67 % del total del desplazamiento de la banda. E_e y E_{hh} las energías del estado base confinadas para electrones y huecos respectivamente y están dadas por la Ec. (3.10).

3.3 Resultados experimentales

Con la finalidad de comparar los resultados obtenidos, se considera el trabajo publicado por Berkowicz *et al.* [36]. Ellos crecieron muestras de *InGaN/GaN* mediante la técnica MOCVD. Una capa de *GaN* con un ancho de 19 nm fue primero depositada a una temperatura de 525 °C. Luego, ellos depositaron una capa de *GaN* de ancho 2.5 μm a una temperatura de 1050 °C. Posteriormente, 14 períodos de *QW's* de *InGaN* a una temperatura

de 790 °C, dopados con una densidad de $2 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-3}$ de ancho 4.6 nm. Los picos de energía de fotoluminiscencia vs la energía del fotón para estas estructuras se muestran en la figura 3.2.

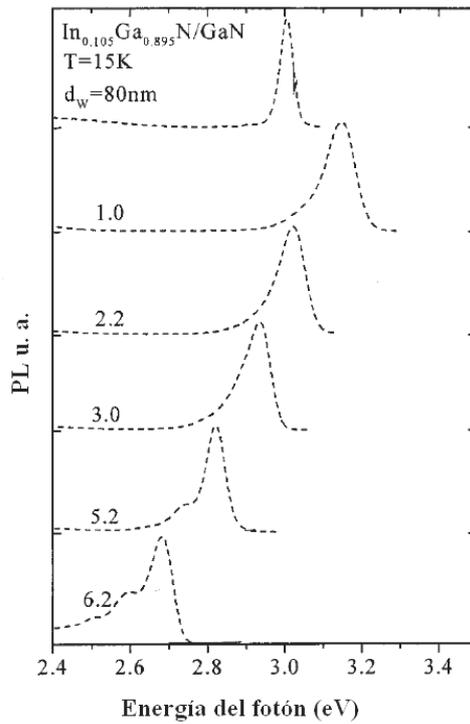


FIGURA 3.2 Espectro de Fotoluminiscencia (líneas a trazos) [36].

3.4 Resultados teóricos

En 1999 Berkowicz *et al.* [36] calcularon la estructura de bandas y las propiedades ópticas de *InGaN/GaN* usando el modelo de Kane-Luttinger tomando en cuenta la simetría de la estructura wurtzita [37], sus resultados se muestran en la figura 3.3, en donde la línea a trazos representa los resultados teóricos obtenidos empleando el modelo de Kane-Luttinger con un campo eléctrico $F=0 \text{ kV/cm}$. La línea sólida representa los resultados teóricos con un campo eléctrico $F=900 \text{ kV/cm}$. Es de resaltar que el ajuste logrado con este modelo difiere de los resultados experimentales.

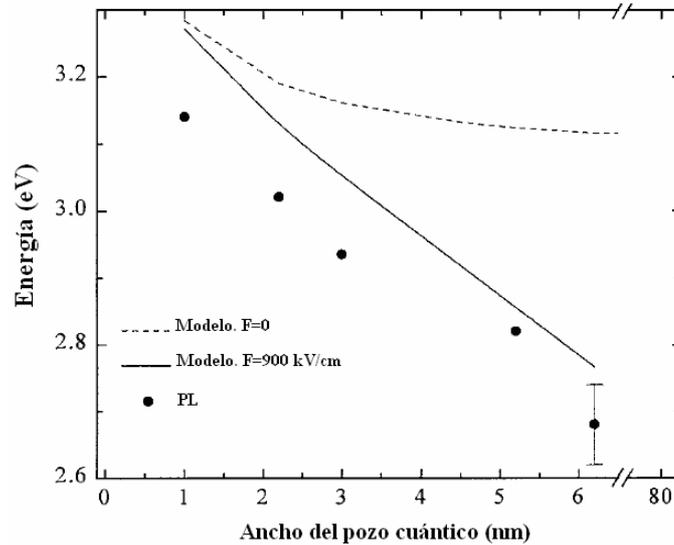


FIGURA 3.3. Picos de energía de fotoluminiscencia vs ancho del QW . Los puntos sólidos representan los resultados experimentales obtenidos mediante la técnica de fotoluminiscencia [36] para las energías de transición e-h. La línea a trazos representa los resultados teóricos obtenidos empleando el modelo de Kane-Luttinger con un campo eléctrico $F=0$ kV/cm. La línea sólida representa los resultados teóricos obtenidos empleando el mismo modelo con un campo eléctrico $F=900$ kV/cm.

3.5 Análisis y discusión

En la Fig. 3.4 se presenta el espectro de fotoluminiscencia de cuatro QW 's de 10, 22, 30 y 52 Å, que presenta las posiciones de los picos de energía experimentales en 15 °K. Se grafica la energía de los picos de fotoluminiscencia como función del ancho del pozo dado por la Ec. (3.15). Se observa que el modelo de interdifusión del In propuesto en la presente tesis, para las transiciones $e-h$ están en acuerdo con los picos de fotoluminiscencia observados. El campo eléctrico obtenido es del orden de 900 kV/cm usando una concentración nominal del 10.5 %. La magnitud del campo eléctrico es del orden del campo piezoeléctrico teórico en $In_{0.105}Ga_{0.895}N/GaN$.

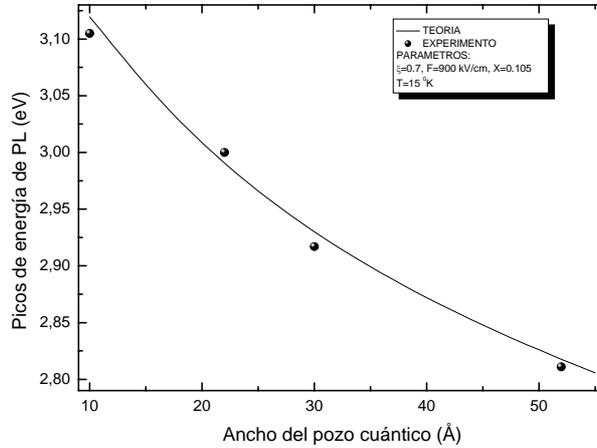


FIGURA 3.4. Energía de los picos de fotoluminiscencia para $In_{0.105}Ga_{0.895}N/GaN$ en función del ancho del QW para la temperatura de 15 K. Los puntos sólidos representan los resultados experimentales obtenidos mediante la técnica de fotoluminiscencia [36] para las energías de transición e-h. La línea sólida representa los resultados teóricos obtenidos empleando nuestro modelo con un campo eléctrico $F=900\text{ kV/cm}$.

3.6 Conclusiones

Se desarrolló un modelo fenomenológico para la recombinación par electrón-hueco en el QW tomando en cuenta los efectos de segregación y los campos eléctricos internos. Se graficó, dentro de esta aproximación, los picos de energía de fotoluminiscencia experimental de QW 's piezoeléctricos $In_{0.105}Ga_{0.895}N/GaN$ como una función del ancho del pozo, y con una excelente correspondencia favorable entre las energías de transición teórica y experimental.

Efectos de campos eléctricos intensos en las propiedades ópticas de QW 's

4.1 Introducción

Los QW 's basados en GaN han sido exitosamente aplicados en diodos emisores de luz en el azul y verde [37, 38, 39], a pesar de la pobre calidad estructural del material. Todos los nitruros del grupo III en la fase wurtzita poseen una fuerte polarización espontánea y coeficientes piezoeléctricos grandes, que han sido hallados de cálculos *ab initio* [9, 10]. La variación abrupta de la polarización en las superficies e interfaces surge de la fuerte polarización de las cargas, que da a lugar a fuertes campos eléctricos internos del orden de 1 MeV/cm en nitruros.

En paralelo al progreso en la fabricación de dispositivos ópticos, ha habido fuertes discusiones sobre las propiedades ópticas de los QW 's basados en GaN , $Al_xGa_{1-x}N$ e

$In_xGa_{1-x}N$ en presencia de un campo eléctrico intenso. Particularmente, los QW 's de $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ han sido estudiados, debido a que existe un cambio al rojo en el espectro de emisión óptica de QW 's tensionados [40] y no tensionados [7].

Recientemente, estructuras de QW de GaN/AlN fueron crecidas empleando la técnica de epitaxia de haces moleculares asistido por plasma, aprovechando el efecto de agente tensoactivo de Ga . Los QW 's muestran una emisión de los picos de PL en función del ancho del pozo con las energías de fotón en el rango entre 4.2 y 2.3 eV, es decir, la emisión llega a ser mas baja que el ancho de banda de energía prohibida del GaN y varia linealmente para pozos anchos ($> 1nm$) [8]. El campo eléctrico interno es del orden de 10 MV/cm en QW 's de GaN/AlN , deducido de los experimentos y en acuerdo con los resultados teóricos de primeros principios predichos por Bernardini [9].

En este capítulo, se presenta en la sección 4.2 una manera alternativa de tomar en consideración el cambio de energía debido al esfuerzo, la dependencia del ancho de banda de energía prohibida con temperatura y la presencia de campo eléctrico interno en el QW sobre la energía de emisión en el espectro de PL . La energía de transición del electrón-hueco en el QW es calculada usando funciones de onda variacionales para el electrón (hueco) de acuerdo con: (a) la energía de transición en el QW es más grande que el ancho de banda de energía prohibida del GaN (campos de piezoeléctricos moderados) y, (b) en el límite de campo eléctrico interno intensos cuando el QW emite energías más bajas que el ancho de banda de energía prohibida del GaN . Bajo estas aproximaciones el campo eléctrico incorporado es usado como parámetro de ajuste, cuando se compara con los picos de PL experimentales de QW 's basados en GaN . En las secciones 4.3 y 4.4 se describe algunas características importantes de los QW s de $AlGaN/GaN$ y AlN/GaN respectivamente, además, se presenta los resultados experimentales de los espectros de fotoluminiscencia. En la sección 4.5 se presentan los resultados obtenidos en la presente tesis y finalmente en la sección 4.6 se presentan nuestras conclusiones.

4.2 Modelo teórico

Este estudio se basa en la comparación de los espectros de PL con las energías de transición calculadas, el perfil del potencial es incluido en la ecuación de Schrödinger. Considérese un QW piezoeléctrico, entre barreras libres de esfuerzo. Se supone que el potencial es proporcional a eFz en el QW , donde z es la coordenada a lo largo del eje de crecimiento en el QW , F es el campo de piezoeléctrico y e la carga del electrón. Dentro de esta aproximación la energía de transición electrón-hueco es dada por

$$\delta E = E_g + E_e + E_h + \delta \varepsilon_e + \delta \varepsilon_h \quad (4.1)$$

donde E_g es el ancho de banda de energía prohibida del pozo, en la cual se han tenido en cuenta los efectos de la tensión y la temperatura y está dada por

$$E_g = E_g^0 + \Delta E - \frac{\lambda T^2}{\delta + T}, \quad (4.2)$$

el primer término en la Ec. (4.2) representa el ancho de banda de energía prohibida del GaN sin esfuerzo, el segundo término es el cambio de energía debido al esfuerzo y el último término determina el efecto de la temperatura sobre el ancho de banda de energía prohibida.

En los experimentos de PL de QW 's de $GaN/Al_xGa_{1-x}N$, se observa, que la energía de emisión disminuye con el aumento del ancho del QW . En cierto ancho crítico del QW (para campo eléctrico interno fijo), la energía de emisión se encuentra por debajo del ancho de banda de energía prohibida del GaN . Considerando los efectos del confinamiento, se espera un corrimiento al azul con respecto al ancho de banda de energía prohibida del GaN .

Para calcular la magnitud de este campo eléctrico, F , se ha llevado a cabo los cálculos dentro de la aproximación de masa efectiva para energía de transición electrón-hueco del estado de base del QW en función del ancho del pozo para valores de F . La Figura 4.1a muestra las estructura de bandas de energía del QW sujeto al campo piezoelectrico moderado; mientras que, la figura 4.1b muestra las estructura de bandas de energía del QW sujeto al campo piezoelectrico intenso, en donde, los huecos y los electrones están débilmente confinados y la separación entre los mismos depende fuertemente de la intensidad del campo eléctrico interno.

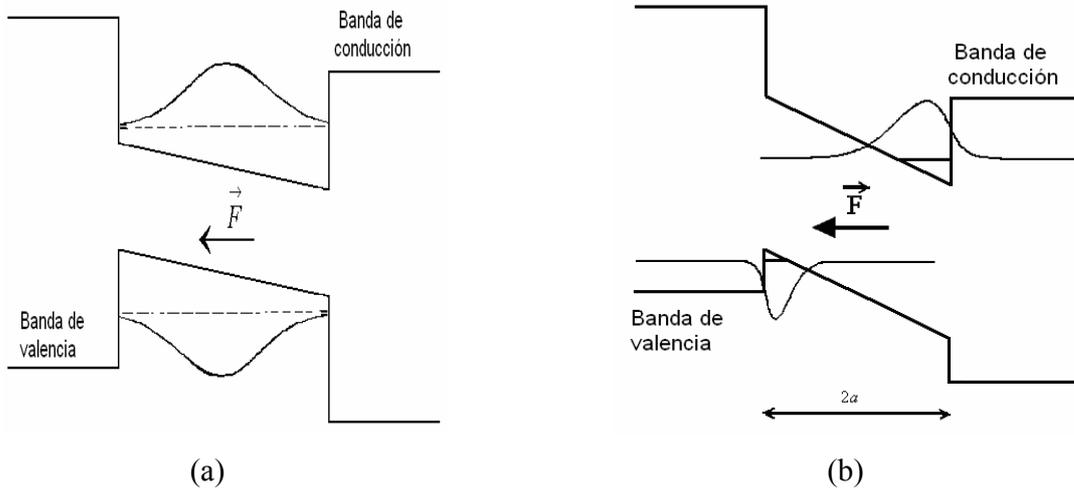


FIGURA 4.1 Diagrama esquemático de las energías y funciones de onda de electrones y huecos en QW 's tensionados con (a) F moderado y (b) campo piezoelectrico fuerte.

Considérese una partícula de carga e y masa efectiva m^* en un QW finito de ancho $2a$. El potencial del QW es

$$V(z) = \begin{cases} eFz, & |z| < a, \\ V_0(z), & z < -a \text{ y } z > a. \end{cases} \quad (4.3)$$

con $F \neq 0$ en el QW y cero dentro de las barreras. La energía del electrón es encontrada resolviendo la ecuación de Schrödinger incorporando la Ec. (4.3) y empleando la función variacional [30]

$$\psi(z) = N_{\beta} \left(1 + \frac{\beta z}{2a}\right) \varphi_0(z) \quad (4.4)$$

donde $\varphi_0(z)$ es la función de onda del estado base no perturbado, β es el parámetro variacional y N_{β} es el factor de normalización definido como $N_{\beta} = [1 + (\beta/2a)^2 \langle z^2 \rangle]^{-1/2}$ con $\langle z^2 \rangle = \langle \varphi_0(z) | z^2 | \varphi_0(z) \rangle$. Usando las Ecs. (4.3) y (4.4) en el valor promedio del Hamiltoniano, se calcula la energía del estado base, cuyo valor minimizado es

$$E(\beta) = E_0 + \frac{1}{N_{\beta}^2} \left[\frac{2e\beta \langle z^2 \rangle}{2a} + \frac{\hbar^2 \beta^2}{2m^* (2a)^2} \right] \quad (4.5)$$

con E_0 la energía del estado base con campo eléctrico cero y

$$\beta = \frac{2a\hbar^2}{4eFm^* \langle z^2 \rangle^2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{16e^2 F^2 m^* \langle z^2 \rangle^3}{\hbar^4}} \right], \quad (4.6)$$

por lo tanto, el cambio de energía producido para electrones atribuible al campo piezoeléctrico puede ser expresado como $\mathcal{E}e(\mathbf{b}) - E_{0e}$, que disminuye con el aumento del campo eléctrico incorporado en el QW . Un proceso similar puede ser realizado considerando el potencial de huecos, con el objetivo de calcular la energía de transición entre el primer estado del electrón y el primer estado del hueco en presencia de campo eléctrico.

Por otro lado, en el límite de campos eléctricos fuertes la energía de emisión de PL está por debajo de la energía del ancho de banda de energía prohibida del GaN . Para modelar estas energías se empleó un potencial triangular, con el cual se calcularon las energías de transición entre el primer estado de energía del electrón y el primer estado de energía del hueco del estado base y se compararon con resultados experimentales. Las funciones de onda analíticas simples hacen posibles, cálculos de las propiedades de QW 's, de forma más conveniente que las soluciones numéricas auto consistentes o funciones analíticas más complicadas han sido empleadas. Por esa razón las soluciones aproximadas han sido ampliamente usadas en los cálculos de QW 's. La más simple de estas, fue propuesta por Takada y Uemura [41], función que es empleada a continuación

$$\xi(z) = \left[\frac{3b^3}{2} \right]^{1/2} z e^{-\frac{(bz)^{3/2}}{2}} \quad (4.7)$$

donde b es el parámetro variacional que se calcula minimizando la energía de electrón para un valor dado del ancho del QW y la masa efectiva del electrón. Debido a la sencillez de la función de onda, es posible calcular el valor promedio del Hamiltoniano. La energía del estado base para electrones es

$$E_e(b) = \frac{5\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)\hbar^2 b_e^2}{16m_e} + \Gamma\left(\frac{2}{3}\right)\frac{10eF}{9b_e}, \quad \text{y} \quad b_e = \left(\frac{16eFm_e}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (4.8)$$

donde $\Gamma(z)$ es la función de Gamma. Entonces, sustituyendo la Ec. (4.8) en la Ec. (4.1), se obtiene la energía de los picos PL como una función del campo de piezoeléctrico y el ancho del QW

$$\delta E = E_g - 2eaF + \frac{5\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)}{12} \left(\frac{6e\hbar F}{m^{*1/2}} \right)^{2/3} \quad (4.9)$$

con

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)^{1/3} = \frac{1}{m_e^{1/3}} + \frac{1}{m_h^{1/3}}$$

como se puede observar en la Ec. (5.9), los picos de energía de *PL* son una función lineal de $2a$ y para el ancho del *QW* y campos eléctricos fuertes tal que $\delta E < E_g$ la energía involucrada en la recombinación electrón-hueco es más baja que el ancho de banda de energía prohibida del *QW*.

4.3 El QW de AlGaIn/GaN

De manera similar al caso de dispositivos optoelectrónicos basados en arseniuro e antimonio, en los *QW's* se usa actualmente como región activa los nitruros que son fundamentales en la elaboración de diodos y diodos láser [38]. Es conocido el enorme campo eléctrico interno del orden de kV/cm en *QW's* con estructura wurtzita de *AlGaIn/GaN* [42,43]. En los últimos años, la polarización espontánea está siendo considerada teóricamente debido a la enorme influencia esperada sobre las propiedades del *AlGaIn/GaN* [9, 44]. Estructuras como los *QW's* de *GaN/AlGaIn* con alto contenido de aluminio [45] muestran emisión en longitudes de onda corta. Sin embargo, la desigualdad de los parámetros de red de la barrera y el pozo da como resultado la presencia de defectos de crecimiento y dislocaciones que, a su vez, causa una disminución en la intensidad de la emisión, sobre todo a temperatura ambiente donde la mayoría de los dispositivos opera. La intensidad de fotoluminiscencia en estos *QW's* disminuye por un factor de 100 cuando se aumenta la temperatura de 10 a 300K. Incorporando el *Al* en el material del pozo tiene un efecto dual: el primero de reducir la falta de coincidencia entre las constantes de red y el segundo la emisión es más intensa (UV). Recientemente, Chitnis *et al.* [46] mostró que heteroestructuras de $Al_xGa_{1-x}N/Al_yGa_{1-y}N$ muestran mejores propiedades ópticas. Los defectos de crecimiento también pueden ser evitados usando aleaciones cuaternarias de *AlGaInN*. Tales capas, con diferentes concentraciones de *Al* y *In* en los pozos y barreras, puede contribuir a la coincidencia entre las constantes de red.

4.3.1 Resultados experimentales

La figura 4.2 muestra el espectro de fotoluminiscencia a la temperatura de 10 K obtenido por Grandjean *et. al.* [7] de una muestra que contenía 6 *QW's* de $Al_{0.17}Ga_{0.83}N/GaN$ con anchos nominales de 10, 15, 25, 40, 60 y 80 Å los pozos están separados por barreras (*AlGa*N) de 100 Å de ancho. En la figura 4.2, para anchos más pequeños de 40 Å la energía de transición es mayor que la emisión del ancho de banda de energía prohibida, (del orden de 3.478 Å en *GaN*, en acuerdo con Langer *et. al.* [40]), que es consecuencia del confinamiento de los portadores. Sin embargo, para anchos mayores de 40 Å la energía de transición es mas pequeña que el ancho de banda de energía prohibida del *GaN*, que se debe al intenso campo eléctrico en *QW's* de *AlGa*N/*GaN* con estructura wurtzita.

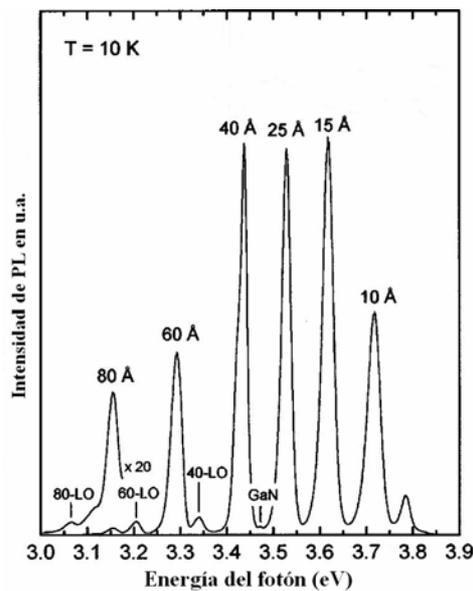


FIGURA 4.2 Intensidad de energía de PL y reflectividad para $Al_{0.17}Ga_{0.83}N/GaN$ en función de la energía del fotón (eV) [7].

En la figura 4.3 se presenta el espectro de *PL* a la temperatura de 10 K obtenido por Langer *et al.* [40], de una muestra de 10, 20 y 30 Å separados por barreras (*AlGa*N) de 50 Å de ancho (crecidas por la técnica de haces moleculares). En esta figura se observa que los

QW 's de 10 y 20 Å poseen una intensidad de emisión de PL mayor que el ancho de banda de energía prohibida del GaN (línea a trazos). Debido a los efectos de confinamiento se espera que la intensidad de PL que para pozos delgados tenga un corrimiento al azul. Para QW 's de 30 Å y de ancho mayor la intensidad de PL es menor debido al fuerte campo eléctrico interno que se presenta en estas heteroestructuras.

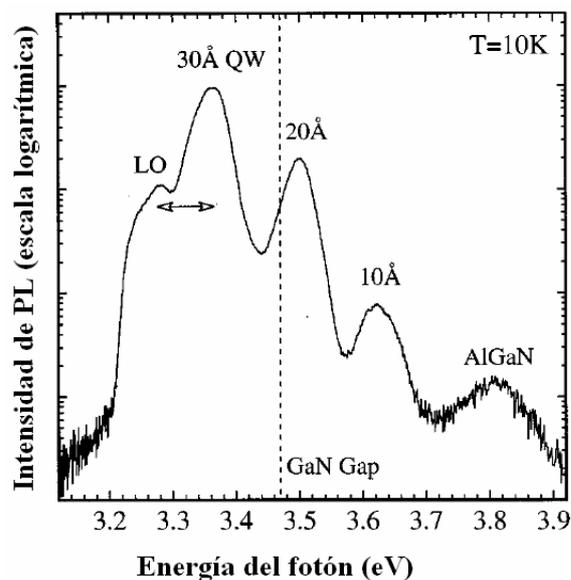


FIGURA 4.3 Espectro de PL ($T=10$ K) de una muestra de múltiples pozos cuánticos de $Al_{0.24}Ga_{0.76}N/GaN$ [40].

En la figura 4.4 se observa la comparación de las energías de transición experimentales (puntos sólidos) con ajustes (líneas sólidas) en función del ancho del QW para diferentes campos eléctricos [49]. Langer *et al.* [40] reportan campos eléctricos para QW 's de $Al_{0.24}Ga_{0.76}N/GaN$ del orden de 1.5 ± 0.2 MV/cm.

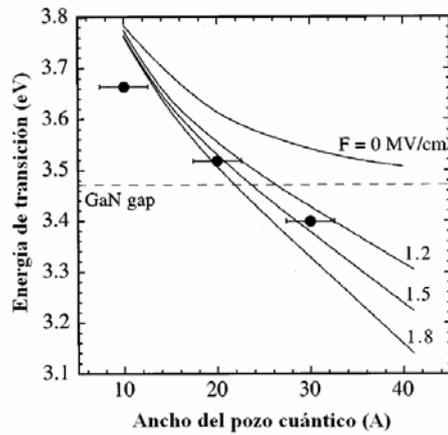


FIGURA 4.4 Comparación de las energías de transición experimentales (puntos sólidos) con ajustes teóricos (líneas sólidas) en función del ancho del QW para diferentes campos eléctricos [40].

4.4 El QW AlN/GaN

Al contrario de los materiales emisores en UV que se mencionaron en la sección anterior anterior, las heteroestructuras de GaN/AlN no poseen problemas asociados con los defectos debido a que sólo poseen materiales binarios puros, y además el ancho de banda de energía prohibida es el más grande de los nitruros. A pesar de esta característica tan relevante, la desigualdad de parámetros de red entre GaN y AlN (2.6%) y la falta de investigaciones ópticas completas en el material de la barrera (AlN), se manifiestan los impedimentos en el desarrollo de emisores en el UV eficaces basado en tales heteroestructuras.

4.4.1 Resultados experimentales

El espectro de PL ($T=8$ K) de tres muestras (crecidas por la técnica de haces moleculares) de múltiples QW 's de GaN de 1 nm, 1.7 nm y 2.6 nm separados por barreras (AlN) de 100 Å de ancho es mostrado en la figura 4.5 [8]. Se observa que la energía de emisión decrece fuertemente con el ancho del QW . La intensidad de emisión del QW de 1.0 nm es de 3.72 eV aproximadamente, mientras que para el QW de 2.6 nm es de 2.35 eV (amarillo).

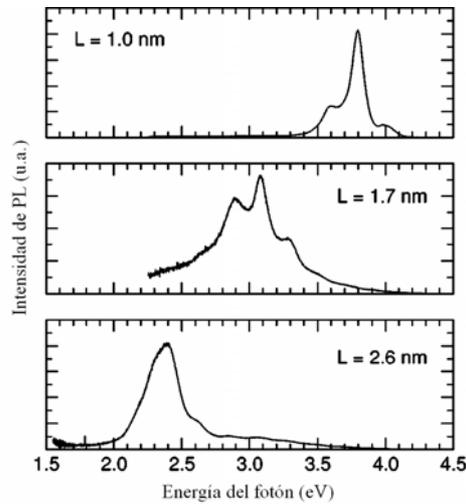


FIGURA 4.5 Espectro de *PL* ($T=8$ K) de tres muestras de múltiples pozos cuánticos de *AlN/GaN* [8].

En la figura 4.6 se presenta la comparación de las energías de transición experimentales (puntos sólidos) con ajustes teóricos (líneas sólidas) en función del ancho del *QW* para diferentes campos eléctricos reportadas por Adelman [8], reportando campos eléctricos para *QW*'s de *AlN/GaN* del orden de 1.1 MV/cm.

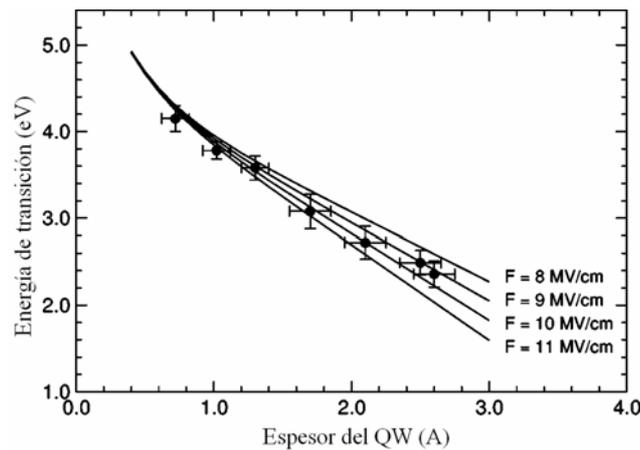


FIGURA 4.6 Comparación de las energías de transición experimentales (puntos sólidos) con ajustes teóricos (líneas sólidas) en función del ancho del *QW* para diferentes campos eléctricos [8].

4.5 Análisis y discusión

La variación de la energía de emisión con el ancho del QW es mostrada en la figura 4.7. La línea sólida representa los resultados teóricos obtenidos en la presente tesis mediante la Ec. (4.9), de las energías de transición fundamentales del QW triangular. Los datos experimentales se tomaron de la Ref. [7] de QW 's de GaN sin esfuerzo con barreras de $Al_xGa_{1-x}N$ y $x = 0.17$. La masa efectiva para electrones es $0.22m_0$ y para huecos $2m_0$. En la Ec.(4.2) $\lambda = 8.84$ eV/K y $\xi = 874$ K. Los efectos excitónicos fueron despreciados, ya que una estimación mostró que las energías de enlace excitónicas eran débiles (algunas décimas de meV) incluso para QW 's delgados [7]. El cambio de Stokes, $0.6 \Gamma_{inh}$ fue restado de las energías de transición calculadas (asumiendo que el ancho de línea de absorción es similar al ancho de línea de PL observado) [40, 8], donde Γ_{inh} es el ancho de línea de PL experimental. Como se muestra en la figura 4.7 el modelo teórico de la energía de transición electrón-hueco en función del ancho de pozo está en acuerdo la energía de los picos PL para un campo eléctrico de 719 kV/cm y energía debido al esfuerzo del orden de 0.02 eV.

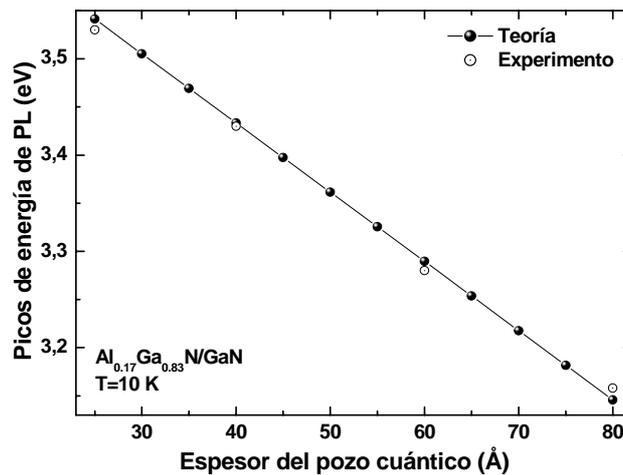


FIGURA 4.7 Energía de los picos de fotoluminiscencia para $Al_{0.17}Ga_{0.83}N/GaN$ en función del ancho del pozo cuántico (pozo triangular), los círculos sólidos representan los datos experimentales tomados de la Ref. [7] y la línea sólida representa los resultados obtenidos con nuestro modelo.

En la figura 4.8, la energía de *PL* de *QW's* de *GaN/AlN*, es dibujada en función del ancho del *QW*. El campo eléctrico interno fue empleado como un parámetro de ajuste. Los resultados están en acuerdo con los picos de *PL* experimentales para un campo eléctrico interno de $F= 10 \text{ MV/cm}$ y $\Delta E=0.18 \text{ eV}$. Los resultados obtenidos muestran que la energía de transición decrece linealmente con el aumento en el ancho de *QW*, en acuerdo favorable con los reportados en la literatura.

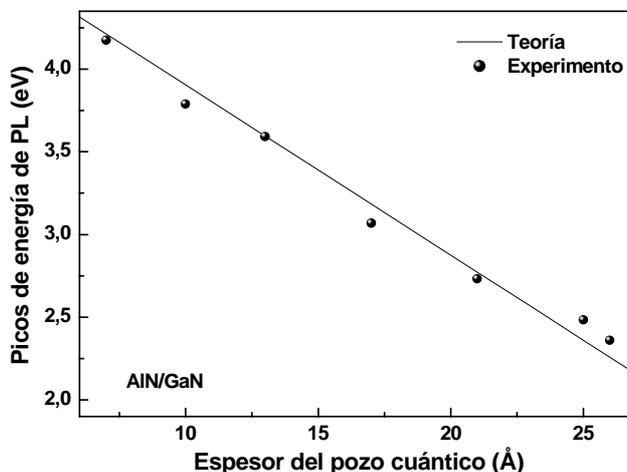


FIGURA 4.8 Energía de los picos de fotoluminiscencia para *AlN/GaN* en función del ancho del pozo cuántico (pozo triangular), los círculos sólidos representan los datos experimentales tomados de la Ref. [7] y la línea sólida representa los resultados obtenidos con nuestro modelo.

4.6 Conclusiones

En conclusión, se ha desarrollado un modelo teórico para explicar las propiedades ópticas de los *QW's* basados en *GaN* en presencia de un campo eléctrico interno. Es mostrado que los picos de energía de *PL* por debajo del ancho de banda de energía prohibida del *GaN*, disminuye en línea recta como una función del ancho del *QW*. Los resultados en la presente tesis con la implementación del método variacional presentan un acuerdo favorable con los resultados reportados en la literatura.

Densidad de portadores y su influencia en las propiedades ópticas de los QW's

5.1 Introducción

Recientemente, ha sido predecido por cálculos *ab initio* y confirmado por resultados experimentales que InN , GaN , AlN con estructura cristalina wurtzita son materiales piezoeléctricos [9, 48, 49] y tal como se ha mencionado anteriormente los valores de la polarización espontánea para estos materiales son enormes, con presencia o sin presencia de campo externo [8] provocando enormes campos eléctricos causados por gradientes de polarización espontánea y piezoeléctrica [50, 51].

En los últimos años, muchos grupos han reportado los enormes campos eléctricos internos en QW 's de $InGaN/GaN$, causando un cambio en la energía de PL [51]. Recientemente, M. Stevens *et al.* usaron la holografía electrónica de alta-resolución para medir el campo eléctrico y potencial electrostático interno en la zona activa del QW de

InGaN/GaN en función del ancho [52]. Sala *et al.* reportaron que el efecto de apantallamiento de los portadores libres explica algunos datos experimentales tales como los inusuales umbrales de excitación de alto *lasing* y la emisión en el azul que esta acompañado del incremento en los niveles de excitación [53]. Posteriormente, Kuroda y Tackeuchi desarrollaron medidas de *PL* resuelta en tiempo para varias densidades de portadores y diferentes anchos del pozo y mostró que el cambio en la energía de *PL* y la variación sobre el tiempo de vida de los portadores puede ser explicado por el apantallamiento de los portadores libres, lo cual apantalla los campos de polarización piezoeléctrica induciendo el perfil de la banda [53].

La influencia del apantallamiento de los portadores libres sobre el cambio de energía de luminiscencia en *QW's* de *GaN* en relación con el efecto Stark confinado es investigado teóricamente. Este efecto modifica los estados electrónicos en el *QW* y la emisión de energía en el espectro de *PL*. En el presente capítulo, se estudia la influencia del campo el campo eléctrico sobre la emisión de *PL* es calculada considerando una función de onda variacional para el electrón y otra para el hueco para obtener las transiciones de energía en la región activa del *QW*. Además, la contribución entre la interacción del electrón con la distribución de carga de los electrones y huecos en el *QW* es tomado en cuenta en la ecuación de Schrödinger, y esta energía potencial satisface la ecuación de Poisson con la densidad de carga en la subbanda del estado base como término fuente. Los cálculos de la energía de transición electrón-hueco en función de la densidad de portadores y el ancho del *QW* están en acuerdo con los experimentos de *PL* reportados en la literatura.

Inicialmente, en la sección 6.2 se describe el modelo teórico propuesto, luego, en la sección 6.3 se comenta algunos resultados experimentales, posteriormente en la sección 6.4 se analiza y se discute los resultados teóricos obtenidos con lo reportado en la literatura y finalmente en la sección 6.5 se presentan las conclusiones.

5.2 Modelo teórico

Este estudio es basado en la comparación del espectro de PL con las energías de transición calculadas. El Hamiltoniano del sistema esta dado por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \xi_n}{dz^2} + [V_F(z) + V_H(z)] \xi_n = E_n, \quad (5.1)$$

donde

$$V_F(z) = \begin{cases} V_0(z) + eFz & |z| < a \\ 0 & \text{en las demás partes} \end{cases} \quad (5.2)$$

con $V_0(z) = V_0[\alpha(z-a) + \alpha(z+a)]$ el potencial del QW cuadrado, $\alpha(z)$ es la función de Heaviside, $V_H(z)$ es el potencial de Hartree dado por la siguiente ecuación

$$V_H = -\frac{e^2}{\epsilon} n_s \left[z + \int_{-\infty}^z (z_0 - z) (\xi_h^2(z_0) - \xi_e^2(z_0)) dz_0 \right] \quad (5.3)$$

La energía del estado base es calculada usando la función variacional dada por la relación

$$\xi(z) = N \left(1 + \frac{\delta z}{2a} \right) \phi_0(z); \quad N = \left[1 + \left(\frac{\delta}{2a} \right)^2 \langle z^2 \rangle \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.4)$$

con $\langle z^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_0^*(z) z^2 \phi_0(z) dz$ y $\phi_0(z)$ la función del estado base del pozo cuadrado finito de profundidad V_0 .

Calculando el valor esperado de H en la ecuación (5.1)

$$-\left\langle \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \right\rangle_{\xi} + \langle V_F(z) + V_H(z) \rangle_{\xi} = \langle H \rangle_{\xi}, \quad (5.5)$$

por un lado se tiene

$$-\left\langle \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} \right\rangle_{\xi} + \langle V_F(z) \rangle_{\xi} = E_0 + N^2 \left[\frac{\hbar^2 \delta^2}{8ma^2} + \frac{eF\delta}{a} \langle z^2 \rangle_L \right], \quad (5.6)$$

donde

$$\langle z^2 \rangle_L = \int_{-a}^a \phi_0^*(z) z^2 \phi_0(z) dz.$$

Por otro lado el potencial de Hartree

$$V_H = -\frac{e^2}{\varepsilon} n_s \left[z + \frac{2\delta N^2}{a} (zC_2(z) - C_3(z)) \right], \quad (5.7)$$

con

$$C_n(z) = \int_{-\infty}^z x^{n-1} |\phi_0(x)|^2 dx \quad \text{y} \quad \langle f(z) \rangle = \int f(z) |\phi_0(z)|^2 dz.$$

Entonces el valor esperado de V_H es

$$\langle V_H \rangle_{\xi} = -\frac{e^2 n_s N^4}{\varepsilon} \left[A_1 \frac{\delta}{a} + A_2 \left(\frac{\delta}{a} \right)^2 + A_3 \left(\frac{\delta}{a} \right)^3 \right], \quad (5.8)$$

con

$$A_1 = \langle z^2 \rangle - 2\langle C_3(z) \rangle, \quad A_2 = 2\langle z^2 C_2(z) \rangle - 2\langle z C_3(z) \rangle, \quad A_3 = \frac{\langle z^2 \rangle^2}{4} - \frac{\langle z^2 C_3(z) \rangle}{2},$$

Remplazando las Ecs. (5.6) y (5.8) en la Ec. (5.5) se obtiene

$$\langle H \rangle_{\xi} = E_0 + N^2 \left[\frac{\hbar^2 \delta^2}{8ma^2} + \frac{eF\delta}{a} \langle z^2 \rangle \right] - \frac{e^2 n_s}{\varepsilon_0} N^4 \left[A_1 \frac{\delta}{a} + A_2 \left(\frac{\delta}{a} \right)^2 + A_3 \left(\frac{\delta}{a} \right)^3 \right].$$

Minimizando $\langle H \rangle_{\xi}$ se puede expresar como

$$\begin{aligned} & \left[\left(4mCA_3 - meF \langle z^2 \rangle \right) \delta^2 + (a\hbar^2 - 8amCA_3 n_s) \delta + 4ma^2 (eF \langle z^2 \rangle - CA_1 n_s) \right] \left(\langle z^2 \rangle \delta^2 + 4a^2 \right) \\ & = 16maCn_s \delta^2 \left(-A_2 \langle z^2 \rangle \delta + 4aA_3 - aA_1 \langle z^2 \rangle \right), \end{aligned} \quad (5.9)$$

donde $C = e^2 / \varepsilon$. En el límite de bajas densidades ($n_s \ll \hbar^2 / 8mCA_2$) el término del lado derecho de la Ec. (5.9) puede ser despreciado y dado que $A_1 \langle z^2 \rangle \approx 4A_3$ la solución puede ser escrita como

$$\delta = -\frac{a\chi}{2m\alpha} \left[1 - \sqrt{1 - \frac{16m^2\alpha\gamma}{\chi^2}} \right], \quad (5.10)$$

Con $\alpha = eF \langle z^2 \rangle - 4CA_3 n_s$, $\gamma = CA_1 n_s - eF \langle z^2 \rangle$, $\chi = \hbar^2 - 8mCA_2 n_s$ y en la aproximación de un electrón en la Ec. (5.9) se reduce a

$$\delta = \frac{a\hbar^2}{2eFm^* \langle z^2 \rangle^2} \left[1 - \sqrt{1 + \frac{16e^2 F^2 (m^*)^2 \langle z^2 \rangle^3}{\hbar^4}} \right], \quad (5.11)$$

Resultado obtenido en la Ref. [4].

La energía de transición electrón-hueco es dada por

$$\delta E = E_g + E_e + E_{hh} + \delta \varepsilon_e + \delta \varepsilon_{hh}. \quad (5.12)$$

donde E_g es el ancho de banda de energía prohibida tensionado del semiconductor en la región activa, $E_{e(h)}$ es la energía del electrón (hueco) en ausencia de campo eléctrico $\delta \varepsilon(h) = \langle H \rangle_{e(h)} - E_{e(h)}$ es el cambio de energía inducido para electrones (huecos) los cuales dependen de la densidad de portadores y del campo eléctrico en el pozo cuántico [54, 55].

5.3 Resultados experimentales

En la figura 5.1 se muestra la dependencia de la posición de los picos de *PL* del poder de excitación para la muestra de múltiples de 3.5 nm de ancho a la temperatura de 6 K. Los triángulos sólidos representan: datos de *PL* en 0.05, 0.1, 1, 10 mW respectivamente y los triángulos abiertos determinan la posición de los picos de cátodo- luminiscencia (*CL*) en un rango de corriente de 0.1-100 nA en $E_B=10$ keV [56].

Por otro lado, en la figura 5.2 se presenta el espectro de *PL* de cuatro muestras de anchos: 20, 43, 78 y 115 Å, crecidas sobre substratos de zafiro en la dirección cristalográfica (0001) por la técnica de epitaxia de fase vapor metalorgánico a presión atmosférica. Para todas las muestras la concentración nominal de *In* fue de 0.13 en el pozo y en las barreras de 0.03. Los cuadrados sólidos y abiertos representan los picos de energía de *PL* a temperatura ambiente con alta potencia de excitación (200 kv/cm^2) y baja potencia de excitación (2 kv/cm^2), respectivamente. Las líneas sólidas y a trazos representan los resultados calculados con campo eléctrico de 1.08 MV/cm y sin campo, respectivamente. De la figura 5.1 se observa, que el incremento en la intensidad de excitación produce un aumento en la energía de los picos de *PL*.

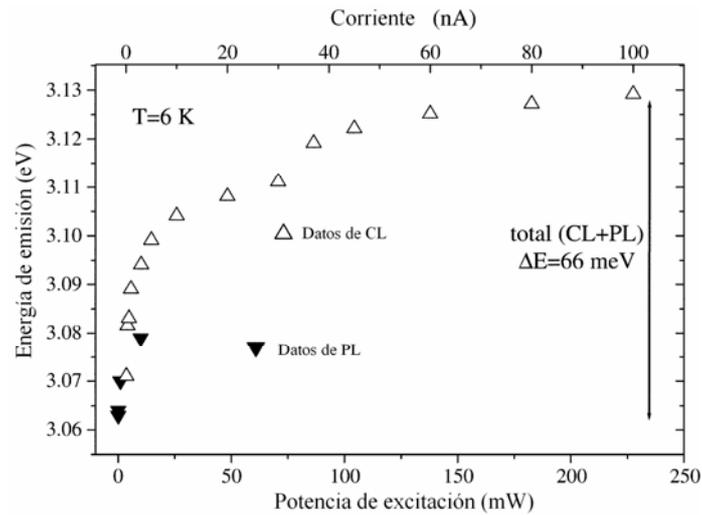


FIGURA 5.1 Dependencia de la posición de los picos de PL del poder de excitación para la muestra de múltiples QW de 3.5 nm de ancho a la temperatura de 6 K. Los triángulos sólidos representan: datos de PL en 0.05, 0.1, 1, 10 mW respectivamente. Los triángulos abiertos representan la posición de los picos de catodoluminiscencia (CL) en un rango de corriente de 0.1-100 nA en $E_B=10$ keV (tomado de la Ref [57]).

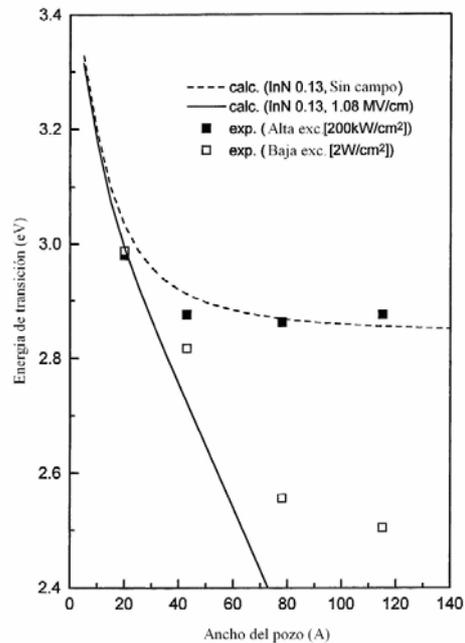


FIGURA 5.2 Picos de energía de PL del QW $Ga_{0.87}In_{0.13}N/Ga_{0.97}In_{0.03}N$ como función del ancho. Los cuadrados sólidos y abiertos representan los picos de energía de PL a temperatura ambiente con alta potencia de excitación (200 kv/cm^2) y baja potencia de excitación (2 kv/cm^2), respectivamente. Las líneas sólidas y a trazos representan los resultados calculados con campo eléctrico de 1.08 MV/cm y sin campo, respectivamente (tomado de la Ref. [56]).

5.4 Análisis y discusión

La figura 5.3 presenta los picos de energía de *PL* de *QW*'s de $In_{0.13}Ga_{0.87}N/Ga_{0.97}In_{0.03}N$ en función de ancho del pozo. Las líneas punteada y sólida representan los resultados teóricos empleando propuesto en la presente tesis para calcular los picos de energía de *PL* (los datos empleados para modelar el *QW* de $Ga_{0.87}In_{0.13}N/Ga_{0.97}In_{0.03}N$ se presentan en la tabla 5.1). Estos picos de *PL* fueron calculados teniendo en cuenta una concentración de portadores de $6 \times 10^{13} cm^{-2}$ (alta potencia de excitación) y $0.18 \times 10^{13} cm^{-2}$ (baja potencia de excitación), respectivamente. Los círculos sólidos y estrellas sólidas representan los resultados experimentales hallados con campo eléctrico de 1.08 MV/cm y sin campo, respectivamente (tomado de la Ref. [56]). La línea sólida fue estimada teniendo en cuenta una densidad de portadores de $0.18 \times 10^{13} cm^{-2}$ y un campo eléctrico $F=1.08 MeV/cm$. Esta línea sólida concuerda con los resultados experimentales medidos a baja potencia (estrellas sólidas). Los resultados obtenidos a baja densidad de portadores muestran que las energías de recombinación menores al ancho de banda de energía prohibida son consecuencia del dominio del campo eléctrico en las propiedades ópticas del sistema. Por otro lado la línea a trazos fue calculada teniendo en cuenta un campo eléctrico nulo, observándose que a densidades de portadores grandes las propiedades ópticas son dominadas totalmente por la densidad de portadores.

En la figura 5.4 se muestra el cálculo de la energía de transición electrón-hueco contra potencia de excitación y densidad de portadores a campo piezoeléctrico de $0.8 MeV/cm$ y un ancho de 35 \AA versus la densidad de portadores. Los puntos sólidos representan resultados experimentales tomados de la Ref.[56] y la línea sólida muestra los resultados teóricos obtenidos empleando el modelo propuesto en la presente tesis (los datos empleados para modelar el *QW* de $GaN/ In_{0.06}Ga_{0.94}N$ se presentan en la tabla 5.2). Como se puede observar en la figura 5.4 la energía calculada entre el nivel más alto del hueco y el nivel mas bajo del electrón tiene un corrimiento hacia el azul a medida que se aumenta la

densidad de portadores, observándose que las propiedades ópticas son afectadas por el enorme campo eléctrico interno.

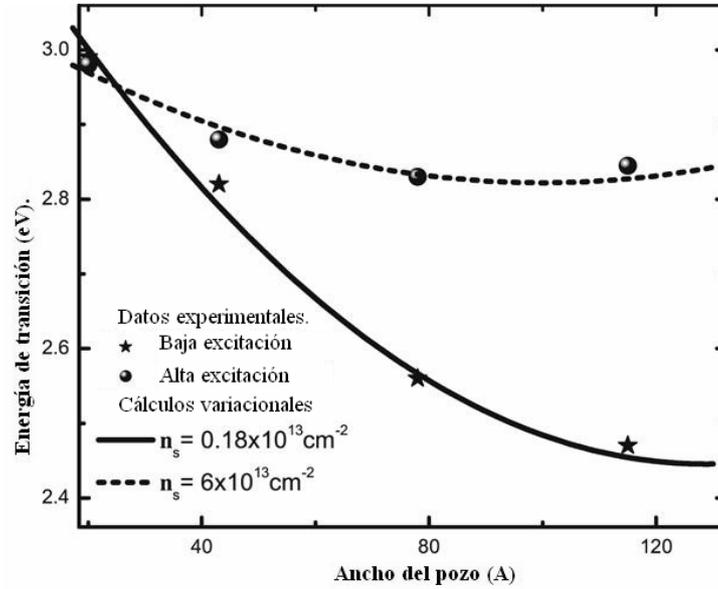


FIGURA 5.3 Picos de energía de PL de pozos cuánticos de $\text{In}_{0.13}\text{Ga}_{0.87}\text{N}/\text{Ga}_{0.97}\text{In}_{0.03}\text{N}$ en función de ancho del pozo. Las líneas punteada y sólida representan los picos de energía de PL empleando el método variacional a temperatura ambiente a una concentración de portadores de $6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (alta potencia de excitación) y $0.18 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (baja potencia de excitación), respectivamente. Los círculos sólidos y estrellas sólidas representan los resultados experimentales hallados teniendo en cuenta un campo eléctrico de 1.08 MV/cm y de 0 MV/cm , respectivamente (tomado de la Ref. [56]).

TABLA 5.1 Parámetros empleados para la elaboración de la gráfica 5.3.

| | |
|------------------------------------|-----------------------------------|
| $m_e = 0.2m_0$ | $m_{hh} = 1.1m_0$ |
| $\Delta V_{0c} = 0.493 \text{ eV}$ | $\Delta V_{0v} = 0.21 \text{ eV}$ |
| $\varepsilon = 11.5\varepsilon_0$ | $F = 1.08 \text{ MeV/cm}$ |
| $E_g = 2.843 \text{ eV}$ | |

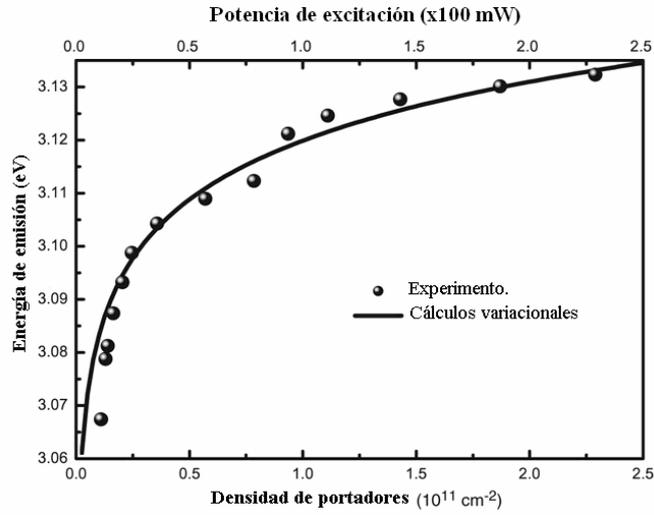


FIGURA 5.4 Posición de los picos de energía de transición como función de la densidad de portadores. La línea sólida representa los cálculos teóricos variacionales obtenido en el presente trabajo y los círculos sólidos representan los resultados experimentales tomados de la Ref. [57].

TABLA 5.2. Parámetros empleados para la elaboración de la gráfica 5.4.

| | |
|------------------------------------|----------------------------|
| $m_e = 0.12m_0$ | $m_{hh} = 1.3m_0$ |
| $\Delta V_{0C} = 0.25 eV$ | $\Delta V_{0V} = 0.107 eV$ |
| $\varepsilon = 11.15\varepsilon_0$ | $F=0.8 MeV/cm$ |
| $E_g = 3.1908eV$ | |

5.5 Conclusiones

Se ha investigado los efectos de la densidad de carga sobre el cambio de energía de luminiscencia en QW 's de GaN por medio del método variacional. Una comparación de los cálculos mencionados anteriormente con los recientes experimentos de PL en función de la densidad de carga y ancho del QW muestra un acuerdo favorable y un corrimiento al azul con el incremento de la densidad de portadores y corrimiento al rojo con la disminución del ancho del pozo para una energía de excitación fija. Este comportamiento ha sido explicado

por diversos grupos debido al efecto de apantallamiento de portadores que compensa el campo eléctrico interno en el QW .

Conclusiones y perspectivas

Una vez desarrollado modelos para explicar los efectos de los campos eléctricos intensos en los *QW's* y los efectos de la densidad de carga sobre el cambio de energía de luminiscencia en *QW's* de *GaN*, obtenido la información que de ello se generó conjuntamente con los respectivos análisis, se obtuvieron unos resultados que nos permiten presentar el siguiente conjunto de conclusiones:

1. Se ha desarrollado un modelo fenomenológico para la recombinación por electrón-hueco en el *QW* tomando en cuenta los efectos de segregación y los campos eléctricos internos. Se graficó, dentro de esta aproximación, los picos de energía de *PL* de *QW's* piezoeléctricos de $In_{0.105}Ga_{0.895}N/GaN$ como una función del ancho del pozo, presentando una excelente correspondencia entre las energías de transición teórica y experimental.
2. Se ha implementado un modelo teórico que toma en cuenta el campo eléctrico interno generado por el esfuerzo para explicar las propiedades ópticas de *PL* para la

transición electrón-hueco en pozos cuánticos $Al_{0.17}Ga_{0.83}N/GaN$ y AlN/GaN . Los resultados obtenidos en la presente tesis por métodos variacionales están de acuerdo favorable con los resultados experimentales.

3. A bajas densidades, la energía de recombinación disminuye no linealmente al disminuir la densidad de portadores, pero a altas densidades llega a aumentar de manera lineal al aumentar η_s . Por otro lado, cuando es pequeña, la energía de transición decrece linealmente al aumentar el ancho del pozo, pero se vuelve insensible al ancho de pozo a valores grandes de η_s .
4. La tasa de recombinación se satura en un valor finito al aumentar fuertemente η_s , por lo tanto no alcanza su valor máximo. Además, se tiene que disminuye no linealmente al aumentar el ancho del pozo. Las distribuciones de electrones y huecos se mantienen separadas de que η_s sea muy grande.
5. Se ha trabajado sobre las propiedades ópticas en estructuras semiconductoras en QW 's, con resultados favorables que nos permiten explicar diversos resultados experimentales recientes en estos dispositivos. El conocimiento adquirido y las metodologías desarrolladas mediante este trabajo, nos han permitido tener la capacidad de explicar y predecir diversas propiedades ópticas en estos dispositivos de vanguardia en la tecnología.

En los desarrollos a futuro se pueden emplear cálculos autoconsistentes para considerar la variación de la constante dieléctrica y por ende del campo eléctrico en el QW y con ello recalcular los picos de energía de PL . También se podría considerar otras funciones variacionales con diferentes valores de masa efectiva que tienen los portadores en la parte activa del pozo y de las barreras.

Bibliografía

1. J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* **31**, 66 (1928).
2. R. H. Fowler, and L. Nordheim, *Proc. Roy. Soc. (London) A* **119**, 173 (1928).
3. J. E. Lilienfeld, *Physik. Z.* **23**, 506 (1922).
4. Z. I. Alferov, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 767 (2001).
5. H. Kromer, *Rev. Mod. Phys.* **73**, 783 (2001).
6. G. C. Osbourn, *Phys. Rev. B.* **27**, R5308 (1983).
7. N. Grandjean, B. Damilano, S. Damalosso, M. Leroux, M. Ilegems, and J. Massies, *J. Appl. Phys.* **86**, 3714 (1999).
8. C. Adelmann, E. Sarigiannidou, D. Jalabert, Y. Hori, J.-L. Rouvieu, and B. Daudin, S. Fanget and C. Bru-Chevallier, T. Shibata and M. Tanaka, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4154 (2003).
9. F. Bernardini, V. Fiorentini and D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B.* **56**, R10024 (1997).
10. K. Shimada, T. Sota and K. Susuki, *J. Appl. Phys.* **84**, 4941 (1998).
11. D. A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices: Basic Principles*, Mc Graw Hill. (2003)
12. C. Kittel. *Introducción a la física del estado sólido*. Barcelona-Reverté. (1993).
13. J. W. Orton and C. T. Foxon, *Semicond. Sic. Technol.* **13**, 310 (1998)
14. S. Strite and H. Morkoc, *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**, 1237 (1992).
15. Q. Guo and A. Yoshida, *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 2453 (1994).
16. M. Drechsler, D. M. Hofmann, B. K. Meyer, T. Detchprohm, H. Amano, and I. Akasaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34**, L1178 (1995).
17. M. Suzuki and T. Uenoyama, *J. Appl. Phys.* **80**, 6868 (1996).
18. P. Harrison, *Quantum wells, wires and dots*, Wiley 2nd edition. (2005).
19. C. Gmachl, H. M. Ng, and A. Y. Cho, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 334 (2000).
20. J. As, F. Schmilgus, C. Wang, B. Schöttker, D. Schikora, and K. Lischka, *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1311 (1997).

21. V. Yu. Davydov, A. A. Klochiknin, V. V. Emtsev, S. Y. Ivanov, V. V. Vekshin, F. Bechstedt, J. Furthmüller, H. Harima, A. V. Mudryi, A. Hashimoto, A. Yamamoto, J. Aderhold, J. Graul, and E. E. Haller, *Phys. Stat. Sol. (b)* **229**, R4 (2002).
22. K. Muraki, S. Fukatsu, Y. Sshiraki and R. Ito, *J. Appl. Phys.* **61**, 557 (1992).
23. A. Dussainge, B. Damilano, N. Grandjean and J. Massies. *J. Crystal growth.* **251**, 471 (2003)
24. C. M. Yee-Rendón, A. Pérez-Centeno, M. Meléndez-Lira, G. González de la Cruz, and M. López-López, *J. Appl. Phys.* **96**, 3702 (2004),
25. C.M. Yee-Rendón, M. Lopez Lopez, and M. Meléndez-Lira, *Rev. Mex. Fís* **50**, 193 (2004)
26. G. Gonzalez de la Cruz, A. Calderon Arenas and H. Herrera, *J. Appl. Phys.* **98**, 023501 (2005)
27. HJ.R. Jinschek, R. Erni, N.F. Gardner, A.Y. Kim, C. Kisielowski, *Solid State commnu.* **137**, 230 (2006)
28. L. D. Landau. *Mecánica cuántica no-relativista*, Vol .**3**. Barcelona.-Reverté. (1967).
29. D. ter Haar , *Problems in Quantum Mechanics*. Pion, London. (1975).
30. G. Bastard, E. E. Mendez, L.L. Chuang y L. Esaki, *Phys. Rev. B* **28**, 3241 (1996).
31. G. González de la Cruz, *J. Appl. Phys.* **96**, 3752 (2004).
32. T. Takeuchi, H. Takeuchi, H. Sakai, H. Amano, I. Akasaki, *Jpn. Appl. Phys.*, Part 2 **36**, L177 (1997).
33. T. Takeuchi, H. Amano, I. Akasaki, *Jpn. Appl. Phys.*, Part 1 **39**, 413 (2000).
34. J.-Yuan, Y.-K. Kuo, *J. Appl. Phys.* **93**, 4992 (2003).
35. J. Shi y Z. Gan, *J. Appl. Phys.* **94**, 407 (2003).
36. E. Berkowicz, D. Gershoni, G. Bahir, A. C. Abare, S. P. DenBaars y L. A. Cooldren, *Phys. Stat. Sol. (b)* **216**, 291 (1999).
37. S. L. Chuang y C. S. Chang, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 252 (1997).
38. S. Nakamura and G. Fasol, *The blue lasers diode* (Springer, Berlin 1997)
39. F. A. Ponce and D. P. Bour, *Nature (London)* **386**, 351 (1997)

40. R. Langer, J. Simon, V.Ortiz, N. T. Pelekanos, a. Barski, R. Andre and M. Godlewski, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3827 (1999)
41. Y. Takada and Y. Uemura, *J. Phys. Soc. Jpn.* **43**, 139 (1977)
42. R. Niebuhr, K.H. Bachem, D. Behr, C. Hoffman, U. Kaufmann, Y. Lu, B. Santic, J. Wagner, M. Arlery, J.L. Rouvière and H. Jürgensen, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* **449**, 769 (1997).
43. P.Lefebvre, J.Allègre, B.Gil, H.Mathieu, P.Bigenwald, N.Grandjean, M.Leroux and J.Massies, *Phys. Rev. B* **58**, R13371 (1998)
44. F. Bernardini and V. Fiorentini, *Phys. Rev. B* **57**, R9427 (1998)
45. J. C. Harris, T. Someya, K. Hoshino, S. Kako, and Y. Arakawa, *phys. stat. sol. (a)* **180**, 339 (2000).
46. A. Chitnis, R. Pachipulusu, V.Mandavilli, M. Shatalov, E. Kuokstis, J. P. Zhang, V. Adivarahan, S. Wu, G. Simin, and M. Asif Khan, *Appl. Phys. Lett.* **81**, 2938 (2002).
47. R. Andre, J. Cibert and L.S. Dang, *Phys. Rev B.* **52**, 12013 (1995).
48. A. Zorodu, F. Bernardini, P. Ruggerone, V. Fiorentini, *Phys. Rev. B* **64** (2001) 45208.
49. O. Ambacher, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **31** (1998) 2653.
50. C. Wetzel, T. Tackeuchi, S. Yamaguchi, H. Katoh, H. Amano, I. Akasaki, *Appl. Phys. Lett.* **73** (1998) 1994.
51. J.S. Im, V. Harle, F. Schulz, A. Hangleiter, Mater. Res. Soc. Int. J. Nitr. Semic. Res. **1** (1996) 37; N. Granjean, J. Massies, M. Leroux, *Appl. Phys. Lett.* **74** (1999) 2361.
52. M. Stevens, A. Bell, M.R. McCartney, F.M. Ponce, H. Marui, S. Tanaka, *Appl. Phys. Lett.* **85** (2004) 4651.
53. F.D. Sala, A. DiCarlo, P. Lugli, F. Bernardini, V. Fiorentini, R. Scholz, J.M. Jancu, *Appl. Phys. Lett.* **74** (1999) 2002; V. Fiorentini, F. Bernardini, F.D. Sala, A. DiCarlo, P. Lugli, *Phys. Rev. B* **60** (1999) 8849.
54. T. Kuroda, A. Tackeuchi, T. Sota, *Appl. Phys. Lett.* **76** (2000) 3753.
55. G. Gonzalez de la Cruz, I. Delgadillo, A. Calderon, *Solid State Commun.* **98** (1996) 357.

56. T. Takeuchi, S. Sota, M. Katsuragawa, M. Komori, H. Takeuchi, H. Amano, I. Akasaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **36** (1997) 382.
57. N. Armani, F. Rosi, C. Ferrari, L. Lazzarini, A. Vinattieri, M. Colocci, A. Reale, A. DiCarlo, V. Grillo, *Superlatt. Microstruct.* **36** (2004) 615.
58. X.H. Zhang, W. Liu, S.J. Chua, *J. Cryst. Growth* **268** (2004) 521.

PRODUCTIVIDAD CIENTIFICA

Publicaciones en revistas internacionales

1. H. J. Herrera Suárez, G. González de la Cruz, A. Calderón. *Journal of Applied Physics*, 98 0235021 (2005).
2. G. Alarcón M. Aguilar, C. Falcony, M. García Hipólito And H. J. Herrera Suárez. *J. Vac. Sci. Technol. b*, 24 (4) 1873 (2006)
3. I. Rojas, César Mora, H. J. Herrera Suárez, *Lat. Am. J. Phys. Educ.* 1, 89 (2007).

Publicaciones en revistas nacionales

1. H. J. Herrera Suárez, César Mora, *Revista Mexicana de Física*, 52 534 (2006).
2. G. González De La Cruz, A. Calderón Arenas and H. Herrera. *Revista Mexicana de Física*, 53 303 (2007).

Proceedings

1. H. J. Herrera Suárez, G. Alarcón Flores, M. Aguilar Frutis, C. Falcony, M. García Hipólito, J. Guzmán Mendoza, J. J. Araiza Ibarra , *Efectos “de la adición de H₂O y nh₄oh en las propiedades eléctricas de películas delgadas de Y₂O₃ depositadas por rocío pirolítico”*. X CONFERENCIA INTERNACIONAL Y XX CONGRESO NACIONAL SOBRE DOSIMETRIA DE ESTADO SÓLIDO (septiembre 2005, página 95)

Trabajos presentados en congresos internacionales

1. H. J. Herrera Suárez, G. Alarcón Flores, M. Aguilar Frutis, C. Falcony, M. García Hipólito, J. Guzmán Mendoza, J. J. Araiza Ibarra, *Efectos “de la adición de H₂O y NH₄OH en las propiedades eléctricas de películas delgadas de Y₂O₃ depositadas por rocío pirolítico”*. VIII CONFERENCIA INTERNACIONAL Y XVIII

CONGRESO NACIONAL SOBRE DOSIMETRIA DE ESTADO SÓLIDO (2005),
Zacatecas.

2. H. J. Herrera Suárez, G. González de la Cruz, J. A. Calderón Arenas, *Photoluminescence spectrum changes of GaN Quantum Wells caused by strong piezoelectric fields*, IX CONFERENCIA INTERNACIONAL XIX CONGRESO NACIONAL SOBRE DOSIMETRIA DE ESTADO SÓLIDO (2006) México D.F.
3. H. J. Herrera Suárez, G. González de la Cruz, J. A. Calderón Arenas, *Photoluminescence spectrum changes of GaN Quantum Wells caused by strong piezoelectric fields*, X CONFERENCIA INTERNACIONAL Y XX CONGRESO NACIONAL SOBRE DOSIMETRIA DE ESTADO SÓLIDO (2007) México D.F..

Trabajos presentados en congresos nacionales

1. H. J. Herrera Suárez, G. Gonzalez de la Cruz, A. Calderón, *Determinación de eigenestados en pozos cuánticos tipo Pöschl-Teller bajo la influencia de un campo eléctrico externo*. XXIV Congreso Nacional de la Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, 27 de septiembre al 1 de octubre 2004, Riviera Maya.
2. H. J. Herrera Suárez, G. González de la Cruz, A. Calderón, *Efectos de segregación en las propiedades ópticas de pozos cuánticos piezoeléctricos*. I Congreso Nacional De Investigación Estudiantil I Congreso de Investigación politécnica (2005), México D.F.
3. G. Alarcón-Flores, H. J. Herrera Suárez, M. Aguilar-Frutis, C. Falcony, M. García-Hipolito, J. Guzmán-Mendoza y J. J. Araiza-Ibarra. *Propiedades ópticas, estructurales y eléctricas de películas delgadas de óxido de itrio depositadas por la técnica de rocío pirolítico ultrasónico*, I Congreso Nacional De Investigación Estudiantil I Congreso de Investigación politécnica (2005), México D.F.
4. H. J. Herrera Suárez, G. Gonzalez de la Cruz, A. Calderón, *Effects of the Segregation on the Optic Properties of InGaN/GaN and InGaAs/GaAs Quantum Wells*, Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales S M C T S M XXV Congreso Nacional Superficies y Vacío 26-30 Septiembre de 2005 Teatro Calderón, Zacatecas, Zacatecas
5. G. Alarcón-Flores, H. J. Herrera Suárez, M. Aguilar-Frutis, C. Falcony, M. García-Hipolito, J. Guzmán-Mendoza y J. J. Araiza-Ibarra. *Propiedades ópticas, eléctricas y estructurales de películas delgadas de oxido de Itrio obtenidas por rocío*

pirolítico, Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales S M C T S M XXV Congreso Nacional Superficies y Vacío 26-30 Septiembre de **2005** Teatro Calderón, Zacatecas, Zacatecas

6. H. J. Herrera Suárez, G. González de la Cruz, *Effect of giant electric fields on the optical properties of GaN quantum wells*, Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales S M C T S M XXVI Congreso Nacional 25-29 de Septiembre 2006 Puebla, Puebla.

Distinciones académicas

Mejor promedio durante el ciclo escolar **2006-2007**, en el programa de TECNOLOGÍA AVANZADA del CENTRO DE INVESTIGACION EN CIENCIA APLICADA Y TECNOLOGIA AVANZADA Unidad legaria del INSTITUTO POLITECNICO NACIONAL.