

SOME CURRENT TOPICS IN CONDENSED MATTER PHYSICS 2014

M. E. MORA-RAMOS

R. PÉREZ-ÁLVAREZ

L. M. GAGGERO-SAGER

(editors)

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

Colección: *Contemporary Condensed Matter Physics: Selected Topics*

Some current topics in condensed matter physics

2014

M. E. Mora-Ramos, R. Pérez-Álvarez,
L. M. Gaggero-Sager
(Eds.)

Universidad Autónoma del Estado de Morelos
Cuernavaca, México
2014

Some current topics in condensed matter physics, 2014
Colección: Contemporary Condensed Matter Physics: Selected Topics

D.R. © 2014
M. E. Mora-Ramos, R. Pérez-Álvarez, L. M. Gaggero-Sager

D.R. © 2014, Universidad Autónoma del Estado de Morelos
Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa
62210, Cuernavaca, Morelos
publicaciones@uaem.mx
libros.uaem.mx

ISBN: 978-607-8434-79-4
ISBN (colección): 978-607-8434-78-7

Imagen de portada: Ernesto Ríos. *E»fki q'F²fcnq"K*
v̇ eplec"o kzvc"uqdtg'\grc."342"z"342"eo

Cuerpo Académico de Física del Estado Sólido
Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Foreword

For some years, a group of researchers have edited a series of compilations of selected talks that were presented at the Workshop of Molecular and Condensed Matter Physics, held in the city of Cuernavaca since 2008. After the publication of the first two volumes (<http://web.fc.uaem.mx/tallerfmcm/temas.htm>) of this series of electronic books, we present to the physical community the third issue which corresponds to the choice made in 2014. It contains some recent contributions in several areas of the research frontier in Condensed Matter Physics.

Since the first edition we have decided to keep the bilingual format (english-spanish) with the purpose of achieving a wider diffusion of the contents via electronic means.

Cuernavaca, Mexico. November 2014

M. E. Mora-Ramos
(memora@uaem.mx)

R. Pérez-Álvarez (rpa@uaem.mx)

L. M. Gaggero-Sager (lgaggero@uaem.mx)

Durante varios años, un grupo de profesores del Cuerpo Académico de Física del Estado Sólido de la Universidad Autónoma de Estado de Morelos, hemos realizado compilaciones de algunas de las conferencias impartidas en el Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular, que se celebra desde 2008 en predios de la mencionada Institución. Luego de la publicación de los dos primeros volúmenes (<http://web.fc.uaem.mx/tallerfmcm/temas.htm>) de esta serie de libros electrónicos, presentamos a la comunidad el tercero, correspondiente a la reunión del año 2014. Esta vez, las contribuciones abarcan áreas de actividad de vanguardia de la Física de la Materia Condensada que no habían sido abordadas en los libros anteriores.

Como comentamos en el prefacio del primer volumen de la serie, hemos mantenido con toda intención el formato bilingüe (español-inglés), en aras de que los materiales publicados puedan encontrar mayor difusión vía *internet*.

Cuernavaca, México. Noviembre 2014

M. E. Mora-Ramos
(memora@uaem.mx)

R. Pérez-Álvarez (rpa@uaem.mx)

L. M. Gaggero-Sager (lgaggero@uaem.mx)

Contents

Ecuación de Schrödinger con masa variable unidimensional	1
María de la Luz Silba-Vélez, R. Pernas y R. Pérez-Álvarez	
1 Antecedentes y fundamentos	2
2 Aproximación de masa efectiva	3
2.1 Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	3
2.2 Aproximación de la función envolvente	4
2.3 Condiciones de empalme cuando la masa es dependiente de la posición	5
3 Ecuación de Schrödinger con masa variable unidimensional	6
4 Métodos para abordar el problema en sistemas a capas	6
4.1 Matriz de transferencia completa $\mathbf{M}(z, z_0)$	7
4.2 Matriz de transferencia asociada, ATM	10
5 Ecuación de Schrödinger con masa variable unidimensional	12
5.1 Forma general de la solución	12
6 Problemas exactos de la ecuación de Schrödinger con masa variable	15
6.1 Estados de dispersión	15
6.2 Estados ligados o acotados	23
6.3 El problema de escape	26
6.4 Problema de pozo con un extremo rígido y regularidad en el otro extremo	30
6.5 Problema periódico	31
7 Problemas no exactos de la ecuación de Schrödinger con masa variable	32

7.1	Relación entre el problema de transmisión del perfil de potencial doble delta y el pozo intermedio	32
7.2	Coefficiente de transmisión de perfil de potencial gaussiano y problema de escape	34
7.3	Coefficiente de transmisión de perfil de potencial de barreras uniformes	36
8	Relaciones entre algunos problemas de contorno en la ecuación de Schrödinger con masa variable	38
8.1	Preliminares	38
8.2	Continuidad entre los estados virtuales acotados y los acotados	39
8.3	Extremos de bandas y eigenenergías de los problemas de Dirichlet y Neumann	40
8.4	Estados virtuales acotados y brechas nulas	40
9	Conclusiones	41
	Notación	42
	Bibliografía	44
	Anisotropic Emission and Bragg reflector in Strain-Balanced Quantum Well Solar Cells	49
	C. I. Cabrera, J. C. Rimada, L. Hernández, Maykel Courel, Julio C. Rimada	
1	Introduction	50
2	Anisotropic radiative emission and gain	52
3	Photon recycling	57
4	Influence of anisotropic radiative emission and photon recycling on the SB-QWSC performance	62
5	Summary	64
	References	64
	Acoplamiento Rashba para huecos pesados en heteroestructuras semiconductoras	67
	A. Mendoza-Álvarez, R. Cuan y L. Diago-Cisneros	
1	Introducción	67
1.1	Nacimiento de la Espintrónica	68
1.2	Modelo de Rashba	69
2	Acoplamiento Rashba para huecos pesados en heteroestructuras semiconductoras	76

2.1	Heteroestructuras con dopaje tipo p	76
2.2	Hamiltoniano de Pidgeon-Brown para heteroestructuras	78
2.3	Esquema de particionamiento de Löwdin	88
2.4	Hamiltoniano efectivo para huecos pesados en el caso <i>quasi</i> -bi-dimensional	91
3	Propiedades de transporte de huecos bajo acoplamiento Rashba	101
3.1	Sistema físico y modelo teórico	101
3.2	Tratamiento de la dependencia cúbica en k en el término de acoplamiento Rashba	104
3.3	Aproximación Dispersiva Multicomponente	109
3.4	Transporte cuántico dependiente del espín	112
4	Conclusiones	118
	Bibliografía	121

Espejos omnidireccionales para el rango visible a partir de multicapas dieléctricas de silicio poroso 127

Augusto David Ariza-Flores, Luis Manuel Gaggero-Sager, Vivechana Agarwal

1	Introducción	128
2	Fabricación de silicio poroso	130
2.1	Anodización electroquímica	130
2.2	Oxidación térmica	131
3	Cálculo de la reflectancia en un sistema de multicapas dieléctricas	132
4	Espejos omnidireccionales en la región visible	135
	Bibliografía	144

Cristales fotónicos basados en silicio poroso: Panorama actual 147

J. Octavio Estevez, J. Arriaga, Vivechana Agarwal

1	Introducción	148
2	Cristales fotónicos fabricados con SP	152
2.1	Estructuras con banda prohibida fotónica a base de SP	155
2.2	Monocapas y multicapas 1D basadas en SP	156
2.3	Aplicaciones de estructuras 1D basadas en SP	157
2.4	Ejemplos de multicapas basadas en SP	158

3	Conclusiones	165
Propiedades ópticas lineales y no lineales en pozos		
δ-dopados dobles tipo n en GaAs		
173		
K. A. Rodríguez-Magdaleno ¹ , J. G. Rojas-Briseño ¹ , J. C. Martínez-Orozco ¹ , I. Rodríguez-Vargas ¹ , C. A. Duque ² .		
1	Introducción	174
1.1	Crecimiento de pozos δ -dopados.	178
2	Metodología	178
2.1	Método de cálculo	181
2.2	Expresiones para el cálculo de propiedades ópticas no lineales	181
3	Estructura electrónica	185
3.1	Perfil de potencial de pozos δ -dopados dobles tipo n	186
3.2	Como función de la separación entre pozos ℓ_p	186
3.3	Como función de la concentración de los pozos	191
3.4	Como función del campo eléctrico F aplicado.	193
4	Coefficiente de absorción e índice de refracción	195
4.1	En función de la separación entre pozos ℓ_p ...	197
4.2	Como función de la la concentración de los pozos	200
4.3	Como función del campo eléctrico F aplicado.	204
5	Conclusiones	208
	Bibliografía	210
Generalized Snell's Law and the Optical Absorption		
213		
M. J. Luévano Robledo, A. Enciso-Muñoz, and D. A. Contreras-Solorio		
1	Introduction	213
2	Method	214
2.1	Generalized Snell's Law	214
2.2	Transfer matrix method	216
3	Results and discussion	219
4	Conclusions	226
	References	227

Propagación de Electrones de Dirac en Estructuras	
Multicapas Fibonacci	229
H. García-Cervantes, J. Madrigal-Melchor, J. C. Martínez-Orozco e I. Rodríguez-Vargas. ¹	
1	Introducción
1.1	Barreras electrostáticas en grafeno
1.2	Rompimiento de simetría en grafeno usando sustratos
2	Metodología
3	Resultados
3.1	Probabilidad de Transmisión
3.2	Distribución angular de la probabilidad de transmisión
3.3	Contornos de transmisión
3.4	Propiedades de transporte: Conductancia en el régimen lineal
3.5	Estados Acotados
4	Conclusiones
	Bibliografía
Electrones de Dirac bajo Potenciales Cantor Aperiódicos	
Basados en Grafeno	
R. Rodríguez-González, J. Madrigal-Melchor, J. C. Martínez-Orozco and I. Rodríguez-Vargas. ¹	
1	Introducción
2	Metodología
2.1	Barreras generadas por medio de sustratos y por campo electrostático
2.2	Formalismo matricial aplicado a sistemas multicapas
3	Resultados
3.1	Propiedades de Transmisión
3.2	Propiedades de Transporte
4	Conclusiones
	Bibliografía
Acoustic transmittance of a multilayer system with a Lorentzian modulation of impedances	
281	

J. J. Rodríguez Pérez, R. A. Reyes Villagrana, A. Enciso
Muñoz, and D. A. Contreras-Solorio

1	Introduction	281
2	Theoretical model and calculation method	282
3	Results	285
4	Conclusions	290
	References	291
	Index	293

Ecuación de Schrödinger con masa variable unidimensional

María de la Luz Silba-Vélez, R. Pernas y R. Pérez-Álvarez

Resumen

En los años 70's Esaki y Tsu [1] proponen construir estructuras artificiales de materiales semiconductores en las cuales se pudiera confinar los portadores de carga del semiconductor. Los primeros resultados se dieron en el confinamiento de electrones en dos dimensiones (pozos cuántico), seguido por el confinamiento de electrones en una y cero dimensiones (hilos y puntos cuánticos). La necesidad de tener control sobre las propiedades ópticas y electrónicas sobre sistemas semiconductores dieron por respuesta el nacimiento de las heteroestructuras [2]. Los avances tecnológicos en aspectos de comunicación e información en los últimos años han impactado de manera más que considerable y no están restringidos sólo a asuntos de investigación sino que el impacto en la sociedad es palpable [3,4]. En el estudio de heteroestructuras es de importancia tomar en cuenta la dependencia de la masa respecto a la posición ya que cada capa está compuesta por diferente material semiconductor. Por tanto, estudiar la estructura electrónica suele realizarse a partir de la aproximación de masa efectiva donde la ecuación de movimiento incluye la dependencia de la masa respecto la posición. La ecuación de movimiento para dicha aproximación también es denominada ecuación de Schrödinger con masa variable. A lo largo de este trabajo se muestran los fundamentos de la aproximación de masa efectiva unidimensional, el formalismo de matrices de transferencia que es muy socorrido para esta clase de sistemas y en consecuencia abordar problemas de estados

María de la Luz Silba-Vélez
Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, CP 62209, Cuernavaca,
Morelos, México. e-mail: svml@uaem.mx

R. Pernas, R. Pérez-Álvarez
Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Facultad de Ciencias.
e-mail: rpa@uaem.mx

acotados, dispersión y escape en sistemas generales además de presentar casos particulares. En otro de los apartados de este trabajo se muestran algunas de las relaciones que existen entre diferentes problemas de contorno.

1 Antecedentes y fundamentos

Como ya lo hemos mencionado las heteroestructuras juegan un papel importante en la tecnología de la información. Siendo más específicos respecto a los dispositivos diseñados con semiconductores tenemos por ejemplo los transistores de heterounión¹ empleados en amplificadores de alta frecuencia y bajo ruido, utilizados en las comunicaciones vía satélite, así como en el mejoramiento de la razón señal a ruido de la telefonía celular. Los láseres semiconductores basados en heteroestructuras son usados en las comunicaciones por fibra óptica, en el almacenamiento de información, como lectores en las unidades de disco compacto, etc.[4]

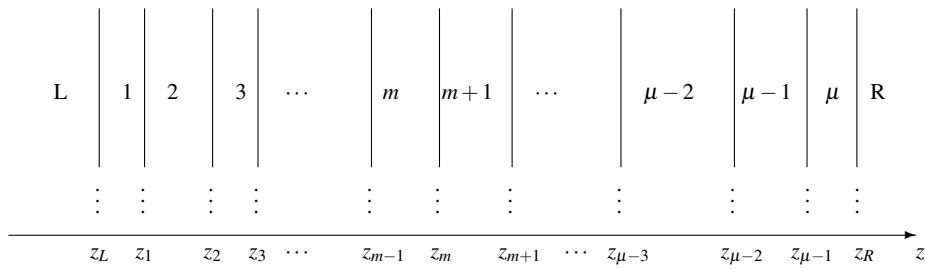


Fig. 1 Forma general de un sistema unidimensional a capas. Se denota los extremos de esta con L (izquierda), R (derecha) y desde 1 hasta μ son las distintas capas intermedias entre z_L y z_R . A menos que se indique otra cosa, la capa L va de $-\infty$ a z_L mientras que R va de z_R a $+\infty$.

Comencemos definiendo que una heteroestructura consiste en dos o más capas con diferente ancho de banda prohibida (*gap*). Los semiconductores de una heteroestructura son generalmente compuestos por Germanio (*Ge*) ó Silicio (*Si*) otras más por elementos de los grupos III y V de la tabla periódica, por ejemplo, el Arseniuro de

¹ Es la unión entre dos semiconductores cuya banda prohibida es diferente.

Galio (*GaAs*) [3]. La tecnología actual así como la evolución y mejoramiento de diversas técnicas de crecimiento de sistemas a capas como la epitaxia de haces moleculares (Molecular Beam Epitaxy MBE [5,6], la deposición química de vapores (Metal-organic Chemical Vapor Deposition MOCVD) y otras han permitido el desarrollo de materiales cuyas funciones y propiedades dependen exclusivamente de los efectos implícitos a escala nanométrica y sus componentes.

El estudio de la estructura electrónica en heteroestructuras suele hacerse a partir de la aproximación de masa efectiva la cual describe una situación en la que el electrón experimenta la acción de un potencial, cuyo origen se debe al desajuste de las bandas de conducción en ambos semiconductores, cuando se acerca a la heterounión [2].

2 Aproximación de masa efectiva

Para el estudio de heteroestructuras es bien conocida la aproximación de masa efectiva o también llamada **aproximación de una banda** la cual sabemos describe los estados electrónicos con un grado de exactitud razonable [9-11]. Para ello recurriremos al método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y la **aproximación de la función envolvente**². Por tanto, a lo largo de esta sección se presentan los fundamentos físicos involucrados para obtener la ecuación de movimiento

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\psi(z)}{dz} \right] + (V(z) - E)\psi(z) = 0, \quad (1)$$

donde $\hbar = h/2\pi$ y h es la constante de Planck, $V(z)$ es la energía potencial y $m(z)$ la masa efectiva.

2.1 Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ se utiliza para describir las bandas de energía y funciones de onda de los semiconductores cristalinos cerca los puntos de alta simetría de la zona de *Brillouin*, por medio de la teoría de pertur-

² *Envelope function approximation*, EFA.

baciones³. Con el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ basta con conocer un número pequeño de parámetros, como discontinuidades de bandas y masas efectivas. El hamiltoniano de un electrón en un cristal es

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V_{cr}(\mathbf{r}) - E \right) \phi(\mathbf{r}), \quad (2)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre y $V_{cr}(\mathbf{r})$ es un potencial periódico. Como el hamiltoniano es invariante ante translaciones en la red cristalina, las autofunciones pueden escogerse de manera que sean simultáneamente autofunción del operador translación \hat{T} . No es interés de este trabajo mostrar a detalle todo el proceso matemático pero el resultado a dicho procedimiento es que el modelo nos indica que la inclusión de un potencial periódico sobre el movimiento de una partícula libre se traduce en un cambio en su masa.

2.2 Aproximación de la función envolvente

La aproximación de la función envolvente EFA considera que los materiales que componen la heteroestructura cristalizan en la misma estructura cristalográfica, es decir que poseen constantes de red similares, y que la interfaz que los separa está libre de defectos. Esta aproximación es utilizada para simular la pérdida de la periodicidad debida a la unión de diversos materiales. De acuerdo al teorema de Bloch y considerando la simetría translacional del cristal, la función envolvente es de la forma $\exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]$. Ahora bien, si rompemos dicha simetría en la dirección z pero la mantenemos en las direcciones perpendiculares, la envolvente queda expresada como [9]

$$f(\mathbf{r}) = \exp[i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp] \psi(z), \quad (3)$$

³ La teoría de perturbaciones consiste en identificar dentro del Hamiltoniano (perturbado) qué parte corresponde a un problema con solución conocida y considerar el resto como un potencial que modifica al anterior Hamiltoniano. Dicha identificación permite escribir a los autoestados del Hamiltoniano perturbado como una combinación lineal de los autoestados del Hamiltoniano sin perturbar y a las autoenergías como las autoenergías del problema sin perturbar más términos correctivos.

donde \mathbf{k}_\perp y \mathbf{r}_\perp se refieren al plano xy , y $\psi(z)$ es la función desconocida que describe la envolvente en la dirección z .

La aproximación EFA considera iguales las funciones de Bloch en cada uno de los materiales que componen la heteroestructura, debido a que, como hemos establecido anteriormente, éstos presentan la misma estructura cristalográfica y constantes de red similares. De acuerdo con la formulación EFA y el hamiltoniano (2) para una banda en el marco de aproximación de masa efectiva se obtiene la función envolvente desconocida y la energía aproximada de los estados de la banda de conducción como el autosistema de una ecuación diferencial de valores propios [9]

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m^*} \right) \psi(z) = E \psi(z). \quad (4)$$

La ecuación (4) corresponde a un movimiento unidimensional sometido a un potencial $V(z)$ de tipo escalón, determinado por la diferencia energética entre los bordes de las bandas de conducción de los materiales que componen la heteroestructura. Así pues, la combinación de materiales de diferente alineamiento de bandas provoca un confinamiento de los electrones cuyo fondo de la banda de conducción presenta menor energía.

2.3 Condiciones de empalme cuando la masa es dependiente de la posición

El hamiltoniano (4) no resulta válido en el caso de que la masa depende de la posición ya que los operadores de masa y momento no conmutan, lo que hace necesario precisar el término cinético el cual es $\hat{p}_z \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \hat{p}_z$. Por tanto, las condiciones de empalme son $\psi(\mathbf{r})$ y $\frac{1}{m^*(z)} \psi'(\mathbf{r})$ sean continuas.

Cabe hacer mención que estamos interesados en estudiar sistemas unidimensionales, por tanto en el caso de heteroestructuras laminares de materiales isótropos la masa depende únicamente de la posición en la dirección de crecimiento z , por tanto el hamiltoniano para una sola dimensión también conocido como de **BenDaniel-Duke** para $k_\perp = 0$ es el descrito por la ecuación (1) donde las condiciones de empalme

están expresadas por ⁴ $\Psi(z)$ y $\frac{1}{m(z)}\Psi'(z)$ las cuales como ya se ha mencionado anteriormente deben de ser continuas.

3 Ecuación de Schrödinger con masa variable unidimensional

Para el caso unidimensional tenemos que la ecuación de movimiento es:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right] + (V(z) - E)\Psi(z) = 0, \quad (5)$$

donde se exige la continuidad en las condiciones de empalme, es decir $\Psi(z)$ y $\frac{1}{m(z)}\Psi'(z)$ continuas.

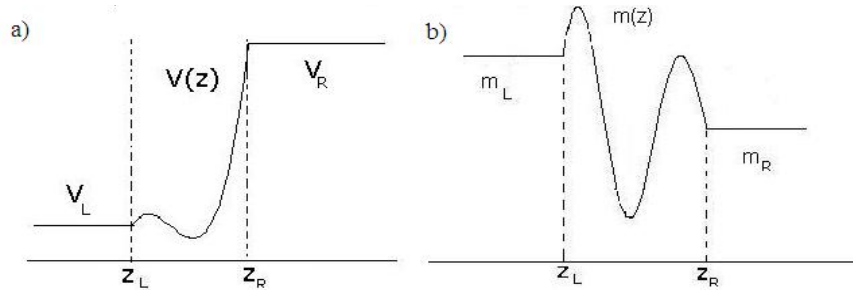


Fig. 2 Perfil de potencial $V(z)$ y masa $m(z)$ donde en los extremos el potencial y la masa son constantes (en general $V_L \neq V_R$ al igual que las masas $m_L \neq m_R$).

4 Métodos para abordar el problema en sistemas a capas

Antes de entrar de lleno a la resolución del problema general mostrado en la Fig. 2 es pertinente hacer mención que un formalismo muy so-corrído a la hora de estudiar sistemas a capas para diferentes proble-mas de contorno es el formalismo de matrices de transferencia. Parti-endo de un problema más general de eigenvalores ⁵ - y con el fin de mostrar el alcance de las matrices de transferencia- consideramos

⁴ A lo largo de este trabajo la masa efectiva está representada m y en todo caso un subíndice para indicar de que compuesto estamos hablando.

⁵ El problema que abordaremos en caso particular de este planteamiento.

un sistema de N ecuaciones diferenciales lineales de segundo orden al cual le asociamos un operador diferencial $\hat{\mathbf{L}}$ representado por una matriz \mathbf{L} . Entonces, nuestro problema de Sturm-Liouville matricial queda representado como sigue

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{F} = \frac{d}{dz} \left[\mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z) \right] + \mathbf{Y}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}(z)}{dz} + \mathbf{W}(z) \cdot \mathbf{F}(z) = 0, \quad (6)$$

donde los coeficientes son matrices de $N \times N$ y \mathbf{F} es un vector columna. \mathbf{L} es hermítico por tanto requiere que \mathbf{B} y \mathbf{W} lo sean y que $\mathbf{Y} = -\mathbf{P}^\dagger$.

Es de nuestro conocimiento que un sistema de N ecuaciones diferenciales admite $2N$ soluciones linealmente independientes $\mathbf{f}_i(z)$, donde $i = 1, \dots, 2N$. La representación de la solución en términos de esta base es:

$$\mathbf{F}(z) = \sum_i a_i \mathbf{f}_i(z). \quad (7)$$

Los coeficientes a_i quedarán determinados por las condiciones de contorno BCs. Como se ha mencionado antes para resolver el problema es necesario introducir el concepto de matriz de transferencia, de lo cual vamos a tratar en las secciones siguientes.

4.1 Matriz de transferencia completa $\mathbf{M}(z, z_0)$

La Matriz de transferencia completa⁶ (*Full Transfer Matrix*, FTM) es aquella que transfiere el campo y su derivada de un punto a otro [12]. Definamos pues a $\Phi(z)$ como un vector de la forma

$$\Phi(z) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{F}'(z) \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Se puede escribir a $\Phi(z)$ como:

$$\Phi(z) = \mathbf{M}(z, z_0) \Phi(z_0), \quad (9)$$

⁶ También conocida como matriz de transferencia, TM

en donde el campo estará determinado por el producto de la matriz de transferencia $\mathbf{M}(z, z_0)$ y el campo evaluado en la condición inicial. En general la matriz de transferencia está dada por [13-15]:

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \mathbf{N}(z)\mathbf{N}^{-1}(z_0). \quad (10)$$

Elegimos una base arbitraria $\mathbf{f}_i(z)$ con elementos $f_{j,i}$ con $i = 1, \dots, 2N$ y $j = 1, \dots, N$ solución al sistema (6). La matriz $\mathbf{N}(z)$ de tamaño $2N \times 2N$ estará formada por $f_{j,i}$ y $f'_{j,i}$ que es la derivada respecto de z , tal que

$$\mathbf{N}(z) = \begin{pmatrix} f_{1,1}(z) & f_{1,2}(z) & \dots & f_{1,2N}(z) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_{N,1}(z) & f_{N,2}(z) & \dots & f_{N,2N}(z) \\ f'_{1,1}(z) & f'_{1,2}(z) & \dots & f'_{1,2N}(z) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f'_{N,1}(z) & f'_{N,2}(z) & \dots & f'_{N,2N}(z) \end{pmatrix}, \quad (11)$$

Una vez obtenida la matriz (11) es posible obtener la TM de acuerdo con la ecuación (10).

4.1.1 Matriz de transferencia cuando $N = 1$

Cuando se tiene una ecuación diferencial de segundo orden en lugar de un sistema de ecuaciones se puede deducir la forma de la matriz de transferencia como sigue⁷: la solución siempre se puede escribir como combinación lineal de las dos soluciones linealmente independientes, tomemos pues dos soluciones linealmente independientes $f_1(z)$ y $f_2(z)$ y escribimos la solución como una combinación lineal tal que

$$\Psi(z) = Af_1(z) + Bf_2(z) \quad (12)$$

$$\Psi'(z) = Af'_1(z) + Bf'_2(z).$$

El sistema de ecuaciones anterior se evalúa en la condición inicial, en el punto z_0 . Del sistema evaluado en z_0 podemos obtener el valor de los coeficientes A y B , dichos coeficientes quedarán es-

⁷ También se puede llegar a la expresión de la Matriz de Transferencia para una ecuación lineal de segundo orden utilizando el formalismo general.

critos en términos de $f_1(z_0)$, $f_2(z_0)$, $\Psi(z_0)$ y sus derivadas correspondientes; reescribiendo el sistema (12), al final todo puede escribirse como $\Psi(z) = \mathbf{M}(z, z_0)\Psi(z_0)$ donde la matriz de transferencia (TM) es: [14]

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} f_1(z)f_2'(z_0) - f_2(z)f_1'(z_0) & f_2(z)f_1(z_0) - f_2(z_0)f_1(z) \\ f_1'(z)f_2'(z_0) - f_2'(z)f_1'(z_0) & f_1(z_0)f_2'(z) - f_1'(z)f_2(z_0) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

donde $\Delta = f_1(z_0)f_2'(z_0) - f_1'(z_0)f_2(z_0)$ y es conocido como el wronskiano.

4.1.2 Propiedades de TM

En general, la TM cumple con las siguientes propiedades [14, 16]:

1. Determinante unidad,

$$\det \mathbf{M}(z, z_0) = 1; \quad \forall z, z_0. \quad (14)$$

2. Simpléctica

$$\mathbf{M}^T(z, z_0)\mathbf{J}\mathbf{M}(z, z_0) = \mathbf{J}, \quad (15)$$

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

3. Si Ψ es continua en z_1 y está entre z_0 y z_2 . Entonces, la TM en el intervalo $[z_0, z_2]$ es de la forma:

$$\mathbf{M}(z_2, z_0) = \mathbf{M}(z_2, z_1)\mathbf{M}(z_1, z_0). \quad (17)$$

Si Ψ tiene un salto, es decir, si no es continua y esto es debido, por ejemplo, a que la masa depende de la posición $m(z)$ ⁸, la TM toma la forma:

$$\mathbf{M}(z_2, z_0) = \mathbf{M}(z_2, z_1+)\mathbf{C}(z_1)\mathbf{M}(z_1-, z_0), \quad (18)$$

⁸ Esta propiedad es de interés ya que esta sería la expresión para el problema que queremos resolver donde la ecuación de movimiento es (1).

$$\mathbf{C}(z_0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{m(z_1+)}{m(z_1-)} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

4.1.3 TM para perfil de masa y potencial constante

Cuando el $V(z) = V$ y $m(z) = m$ son constantes tenemos que (5) se reduce a resolver la ecuación de Schrödinger,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + (V - E)\Psi(z) = 0. \quad (20)$$

Definimos $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$ de manera que la ecuación se pueda escribir de forma compacta.

$$\frac{d^2\Psi(z)}{dz^2} + k^2\Psi(z) = 0. \quad (21)$$

Las dos soluciones linealmente independientes son $f_1 = \cos k(z - z_0)$ y $f_2 = \sin k(z - z_0)$. Para obtener la TM^9 es necesario primero encontrar la matriz \mathbf{N} (véase (11)) y su inversa, entonces

$$\mathbf{M}(z, z_0) = \begin{pmatrix} \cos[k(z - z_0)] & \frac{\sin[k(z - z_0)]}{k} \\ -k \sin[k(z - z_0)] & \cos[k(z - z_0)] \end{pmatrix}. \quad (22)$$

4.2 Matriz de transferencia asociada, ATM

Otro tipo de matriz de transferencia es la llamada matriz de transferencia asociada (ATM) la cual transfiere de un punto a otro el campo y la forma lineal asociada a la ecuación de movimiento. [12] Del tratamiento general, sabemos que podemos escribir:

$$\Psi(z) = \mathbf{T}(z, z_0) \cdot \Psi(z_0). \quad (23)$$

⁹ Podemos aplicar lo expuesto en la sección 4.1.1 ó la sección 4.1

Definamos el vector $\Psi = \begin{pmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{A}(z) \end{pmatrix}$ donde $\mathbf{A}(z) = \mathbf{B}(z) \cdot \frac{d\mathbf{F}}{dz} + \mathbf{P}(z) \cdot \mathbf{F}(z)$ de acuerdo con (6).

La matriz de transferencia cumplirá las mismas propiedades que la TM (véase la sección 4.1.2), con la salvedad de que en la propiedad 3 no hay necesidad de considerar si la derivada tiene un salto ya que esto es tomado en cuenta en la definición de $\mathbf{A}(z)$, de forma que $\mathbf{A}(z)$ siempre sea continua, por tanto en un intervalo (z_0, z_2) con $z_1 < z_2$ la ATM se puede escribir como $\mathbf{T}(z_2, z_0) = \mathbf{T}(z_2, z_1)\mathbf{T}(z_1, z_0)$.

Elegimos una base arbitraria la cual conformará a la matriz $\mathbf{Q}(z)$ de tamaño $2N \times 2N$ de manera que

$$\mathbf{Q}(z) = \begin{pmatrix} f_{1,1}(z) & f_{1,2}(z) & \dots & f_{1,2N}(z) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_{N,1}(z) & f_{N,2}(z) & \dots & f_{N,2N}(z) \\ A_{1,1}(z) & A_{1,2}(z) & \dots & A_{1,2N}(z) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{N,1}(z) & A_{N,2}(z) & \dots & A_{N,2N}(z) \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Siguiendo un procedimiento análogo al de las TM tenemos que la ATM es de la forma $\mathbf{T}(z, z_0) = \mathbf{Q}(z)\mathbf{Q}^{-1}(z_0)$.

4.2.1 Matriz de Transferencia Asociada cuando $N = 1$

Al igual que para la TM, podemos obtener la forma de la ATM en el caso de una ecuación tomando la combinación lineal de dos soluciones linealmente independientes f_1 y f_2 , tal que

$$\Psi(z) = af_1(z) + bf_2(z) \quad (25)$$

$$\frac{\Psi'(z)}{m(z)} = \frac{1}{m(z)} [af_1'(z) + bf_2'(z)].$$

El sistema de ecuaciones anterior se evalúa en la condición inicial z_0 y se determinan los valores de a y b podemos escribir la solución $\Psi(z) = \mathbf{T}(z, z_0)\Psi(z_0)$ donde la ATM es

$$\mathbf{T}(z, z_0) = \frac{1}{\Delta} \begin{pmatrix} f_1(z)f_2'(z_0) - f_2(z)f_1'(z_0) & m(z_0)[f_2(z)f_1(z_0) - f_2(z_0)f_1(z)] \\ [f_1'(z)f_2'(z_0) - f_2'(z)f_1'(z_0)]\frac{1}{m(z)} & [f_1(z_0)f_2'(z) - f_1'(z)f_2(z_0)]\frac{m(z_0)}{m(z)} \end{pmatrix}. \quad (26)$$

donde $\Delta = f_1(z_0)f_2'(z_0) - f_1'(z_0)f_2(z_0)$.

4.2.2 ATM de un intervalo con potencial y masa constantes

Al igual que en el caso de TM, las soluciones linealmente independientes son $f_1 = \cos k(z - z_0)$ y $f_2 = \sin k(z - z_0)$ sustituyendo en (26) la ATM estará dada por

$$\mathbf{T}(z, z_0) = \begin{pmatrix} \cos[k(z - z_0)] & \frac{m}{k} \sin[k(z - z_0)] \\ -\frac{k}{m} \sin[k(z - z_0)] & \cos[k(z - z_0)] \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Al igual que para la TM, es necesario tener en cuenta los casos en que $E > V$ y $V > E$, ya que la ATM se verá modificada en el sentido de que para el primer caso queda tal cual, pero para el segundo esta matriz estará en términos de senos hiperbólicos y cosenos hiperbólicos y en lugar de k aparecerá κ ¹⁰.

5 Ecuación de Schrödinger con masa variable unidimensional

5.1 Forma general de la solución

Sea la ecuación de movimiento (5) y el perfil para masa y potencial mostrado en la Fig. 2, se propone una solución que desde $-\infty$ hasta $+\infty$. Sea pues

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{d\Psi(z)}{dz} \right] + (V(z) - E)\Psi(z) = 0.$$

Como ya lo hemos planteado recurriremos a los formalismo de matrices de transferencia por tanto definimos a $\Psi(z)$ como:

¹⁰ $\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V - E)}$. k y κ están relacionadas por: $k = i\kappa$.

$$\Psi(z) = \begin{pmatrix} \psi(z) \\ \frac{\psi'(z)}{m(z)} \end{pmatrix}, \quad (28)$$

de manera que $\Psi(z) = \mathbf{T}(z, z_0)\Psi(z_0)$. La matriz $\mathbf{T}(z, z_0)$ tiene elementos T_{ij} con $i, j = 1, 2$, donde i es el número de fila y j el número de columna.

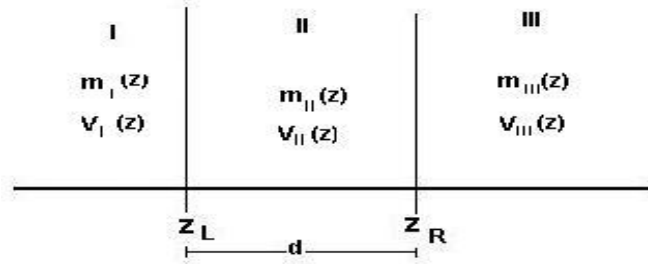


Fig. 3 Perfil general de masa y potencial.

De acuerdo con la Fig. 3 el cual está dividido en tres regiones donde cada región debe tener asociado un vector Ψ , por ejemplo, para el vector en región I se denotará Ψ_I y recíprocamente Ψ_{II} , Ψ_{III} a las regiones II y III correspondientemente.

Aplicando las condiciones de empalme en z_L y z_R tenemos que¹¹:

$$\Psi_{III}(z_R) = \mathbf{T}(z_R, z_L)\Psi_I(z_L), \quad (29)$$

escrito de forma explícita, el sistema de ecuaciones es:

$$\psi_{III}(z_R) = T_{11}\psi_I(z_L) + T_{12}\frac{\psi'_I(z_L)}{m_I(z_L)} \quad (30)$$

$$\frac{\psi'_{III}(z_R)}{m_{III}(z_R)} = T_{21}\psi_I(z_L) + T_{22}\frac{\psi'_I(z_L)}{m_I(z_L)}. \quad (31)$$

¹¹ La solución en la región II escrita en términos de la ATM es: $\Psi_{II}(z) = \mathbf{T}(z, z_L)\Psi_{II}(z_L)$. Recordar que $\mathbf{T}(z_L, z_L) = \mathbf{1}$

Ya con las expresiones generales (30) y (31) lo que resta es aplicarlo a los distintos problemas de contorno.

Ahora bien, si consideramos perfil de masa y potencial en la región II y en los extremos potencial y masa constante pero distinto en cada extremo como se muestran en las Fig. 2 y proponemos una solución (véase (28)) que va desde $-\infty$ hasta $+\infty$, la solución del problema expresada en términos de la ATM está representada como sigue

$$\Psi(z) = \begin{cases} \mathbf{A}\mathbf{E}_L^+(z) + \mathbf{B}\mathbf{E}_L^-(z) & z \in (-\infty, z_L) \\ \mathbf{T}(z, z_L)\Psi(z_L) & z \in (z_L, z_R) \\ \mathbf{C}\mathbf{E}_R^+(z) + \mathbf{D}\mathbf{E}_R^-(z) & z \in (z_R, +\infty) \end{cases} \quad (32)$$

$$\mathbf{E}_L^+(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{ik_L}{m_L} \end{pmatrix} e^{ik_L(z-z_L)} \quad ; \quad \mathbf{E}_L^-(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{ik_L}{m_L} \end{pmatrix} e^{-ik_L(z-z_L)} \quad (33)$$

$$\mathbf{E}_R^+(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{ik_R}{m_R} \end{pmatrix} e^{ik_R(z-z_R)} \quad ; \quad \mathbf{E}_R^-(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{ik_R}{m_R} \end{pmatrix} e^{-ik_R(z-z_R)} \quad (34)$$

donde k_L y k_R están definidos por

$$k_L = \sqrt{\frac{2m_L}{\hbar^2}(E - V_L)} \quad ; \quad k_R = \sqrt{\frac{2m_R}{\hbar^2}(E - V_R)}. \quad (35)$$

De la sección ?? donde se establece el hecho de exigir continuidad, el empalme en z_L y z_R nos da por resultado el siguiente sistema de ecuaciones

$$\mathbf{T}(\mathbf{A}\mathbf{E}_L^+ + \mathbf{B}\mathbf{E}_L^-) = \mathbf{C}\mathbf{E}_R^+ + \mathbf{D}\mathbf{E}_R^-, \quad (36)$$

Para simplificar la notación escribamos $\mathbf{E}_L^\pm \equiv \mathbf{E}_L^\pm(z_L)$, $\mathbf{E}_R^\pm \equiv \mathbf{E}_R^\pm(z_R)$ y la ATM $\mathbf{T} \equiv \mathbf{T}(z_R, z_L)$. Los elementos de la ATM están denotados por

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}.$$

6 Problemas exactos de la ecuación de Schrödinger con masa variable

A lo largo de este capítulo se muestran diversos problemas de la ecuación de movimiento con masa variable utilizando el formalismo de la ATM, así como casos particulares.

Para tener una idea más clara acerca de las diferentes condiciones de contorno nos basaremos en la Fig. 4.

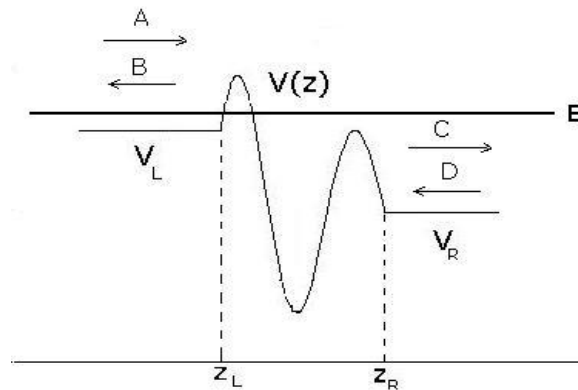


Fig. 4 A indica el coeficiente de una onda incidente por el lado izquierdo mientras que D es el coeficiente de una onda incidente por el lado derecho. El coeficiente de la onda reflejada es B y el coeficiente de la onda transmitida es C .

6.1 Estados de dispersión

La teoría cuántica establece que cuando un electrón incide sobre una barrera de potencial, es reflejado con probabilidad R y transmitido con probabilidad T . La probabilidad de transmisión puede ser distinta de cero aún si la energía cinética del electrón incidente es menor que la altura de la barrera de potencial; a este fenómeno se le conoce como **efecto túnel** [17].

6.1.1 Coeficientes de reflexión y transmisión

El coeficiente de reflexión R y el coeficiente de transmisión T , por definición están dados por $R \equiv \frac{|j_{ref}|}{|j_{inc}|}$ y $T \equiv \frac{|j_{trans}|}{|j_{inc}|}$ donde j es el flujo de energía el cual escrito en términos de ψ es

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi(z) \frac{d\psi^*(z)}{dz} - \psi^*(z) \frac{d\psi(z)}{dz} \right]. \quad (37)$$

Las soluciones de las ondas incidente, reflejada y transmitida están dadas por $\psi_{inc} = \exp[ik_L(z - z_L)]$, $\psi_{ref} = r \exp[-ik_L(z - z_L)]$ y $\psi_{trans} = t \exp[ik_R(z - z_R)]$. Ahora escribimos los flujos de energía incidente j_{inc} , reflejado j_{ref} y transmitido j_{trans} . En base a lo expuesto se obtiene que $j_{inc} = \frac{\hbar k_L}{m_L}$ donde el módulo de es $|j_{inc}| = \frac{\hbar k_L}{m_L}$ pero, para el flujo reflejado y transmitido no hay que olvidar que r y t no necesariamente son reales. Se procede de igual forma para obtener los valores de j_{ref} y j_{trans} .

De la sección 5 al pedir continuidad tenemos la ecuación para la condición de empalme (36), a dicha condición hay que adicionar las condiciones de contorno del problema, es decir, para este caso considerar una onda incidente, una onda reflejada y una transmitida. Sea A la amplitud de la onda incidente, B la amplitud de la onda reflejada, C la amplitud de la onda transmitida y $D = 0$ debido a que no hay una onda incidente por el lado derecho, se procede a renombrar estos coeficientes tal que $A = 1$, $B = r$ y $C = t$. Entonces, la condición de empalme está dada por

$$\mathbf{T}(\mathbf{E}_L^+ + r\mathbf{E}_L^-) = t\mathbf{E}_R^+, \quad (38)$$

Lo que resta por hacer es determinar r y t , para esto es necesario resolver el sistema de ecuaciones, realizando un poco de álgebra tenemos que tanto r como t están en términos de la ATM. En consecuencia los coeficientes de reflexión y transmisión también quedan en términos de la matriz de transferencia.

$$R = |r|^2 = \frac{\left(\frac{k_R k_L}{m_R m_L} T_{12} + T_{21} \right)^2 + \left(\frac{k_R}{m_R} T_{11} - \frac{k_L}{m_L} T_{22} \right)^2}{\left(T_{21} - \frac{k_R k_L}{m_R m_L} T_{12} \right)^2 + \left(\frac{k_L}{m_L} T_{22} + \frac{k_R}{m_R} T_{11} \right)^2} \quad (39)$$

$$T = \frac{m_L k_R}{m_R k_L} |t|^2 = \frac{4k_R k_L}{m_R m_L \left[\left(T_{21} - \frac{k_R k_L}{m_R m_L} T_{12} \right)^2 + \left(\frac{k_L}{m_L} T_{22} + \frac{k_R}{m_R} T_{11} \right)^2 \right]}. \quad (40)$$

Uno puede verificar que efectivamente que la suma de R con T es igual a uno. Es posible encontrar una demostración formal de que $R + T = 1$ en el libro de Walter A. Strauss. [18] Ya con las expresiones generales de R y T lo que resta y aplicarlo a casos particulares.

Barrera de potencial cuadrada

Sea el perfil de masa $m(z)$ y potencial $V(z)$ de una barrera cuadrada

$$V(z) = \begin{cases} V_L & z < z_L \\ V & z_L < z < z_R \\ V_R & z_R < z \end{cases} \quad y \quad m(z) = \begin{cases} m_L & z < z_L \\ m & z_L < z < z_R \\ m_R & z_R < z \end{cases}. \quad (41)$$

Recordemos que en la sección 4.2.2 se obtuvo la matriz de transferencia para un perfil de potencial y masa constante (véase ecuación (27)), sea $k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V)}$ y $d = z_R - z_L$. En el intervalo (z_L, z_R) para el caso $E < V$ se tiene que k es imaginaria, por practicidad, redefinimos a k como $k = i\kappa = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V - E)}$. Sabemos que cuando el argumento del seno y el coseno son imaginarios ocurre que $\cos(i\kappa d) = \cosh(\kappa d)$ y $\sin(i\kappa d) = i \sinh(\kappa d)$ entonces la ATM queda en términos de κ , senos hiperbólicos y cosenos hiperbólicos. Entonces, si sustituimos los elementos de la ATM en las ecuaciones (39) y (40) los coeficientes R y T correspondientemente y simplificamos

$$R = \frac{\left(\frac{k_R k_L m}{m_R m_L \kappa} + \frac{\kappa}{m} \right)^2 \sinh^2[\kappa d] + \left(\frac{k_R}{m_R} - \frac{k_L}{m_L} \right)^2 \cosh^2[\kappa d]}{\left(\frac{\kappa}{m} - \frac{k_R k_L m}{m_R m_L \kappa} \right)^2 \sinh^2[\kappa d] + \left(\frac{k_L}{m_L} + \frac{k_R}{m_R} \right)^2 \cosh^2[\kappa d]} \quad (42)$$

y

$$T = \frac{4k_L k_R}{m_L m_R \left[\left(\frac{\kappa}{m} - \frac{k_R k_L m}{m_R m_L \kappa} \right)^2 \sinh^2[\kappa d] + \left(\frac{k_L}{m_L} + \frac{k_R}{m_R} \right)^2 \cosh^2[\kappa d] \right]}. \quad (43)$$

Barrera de potencial con masa constante

Un caso particular de la sección 6.1.1 es cuando $k_L = k_R = k$ y $m_L = m_R = m$, entonces las ecuaciones (42) y (43) se reducen a

$$R = \frac{(k^2 + \kappa^2)^2 \sinh^2(\kappa d)}{(\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2(\kappa d) + 4k^2 \kappa^2 \cosh^2(\kappa d)} \quad (44)$$

$$T = \frac{4k^2 \kappa^2}{(\kappa^2 - k^2)^2 \sinh^2(\kappa d) + 4k^2 \kappa^2 \cosh^2(\kappa d)}. \quad (45)$$

Esta es la solución que se esperaba y se puede verificar en diversos libros de mecánica cuántica, entre ellos el de la serie Shaum [19] en §3, página 30.

Barrera deltaica

Para el caso de un perfil de potencial delta y considerando $k_L = k_R = k$, $m_L = m_R = m$ los coeficientes R y T son

$$R = \frac{m^2 \alpha^2}{m^2 \alpha^2 + k^2 \hbar^4} \quad y \quad T = \frac{k^2 \hbar^4}{m^2 \alpha^2 + k^2 \hbar^4}. \quad (46)$$

Se puede mostrar que la suma de R y T es igual a uno, como debe de ser. Las expresiones de los coeficientes de reflexión y transmisión se pueden consultar en las páginas 56-57 del Griffiths [17] y verificar que son las mismas.

Barrera deltaicas doble

Sea el perfil de masa y potencial mostrado en la Fig. 5, la ATM para este problema está dado por

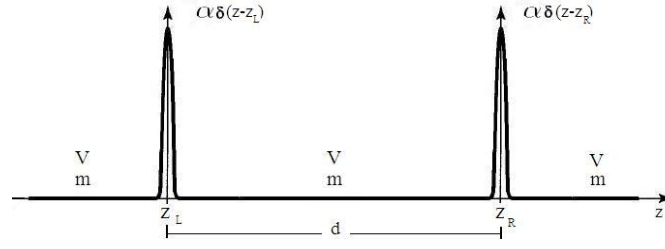


Fig. 5 Perfil de Potencial de una Barrera Doble Deltaica.

$$\mathbf{T}_\delta(z_R^+, z_L^-) = \mathbf{T}_2(z_R^+, z_R^-) \mathbf{T}(z_R^-, z_L^+) \mathbf{T}_1(z_L^+, z_L^-). \quad (47)$$

Sustituyendo los elementos de la ATM para la doble barrera deltaica de potencial en (39) y (40) tenemos que

$$R = \frac{4m^2\alpha^2 [\hbar^2 k \cos(kd) + m\alpha \sin(kd)]^2}{\hbar^4 k^2 (\hbar^4 k^2 + 4m^2\alpha^2) \cos^2(kd) + 8\hbar^2 km^3 \alpha^3 \cos(kd) \sin(kd) + (\hbar^8 k^4 + 4m^4\alpha^4) \sin^2(kd)} \quad (48)$$

y

$$T = \frac{\hbar^8 k^4}{\hbar^4 k^2 (\hbar^4 k^2 + 4m^2\alpha^2) \cos^2(kd) + 8\hbar^2 km^3 \alpha^3 \cos(kd) \sin(kd) + (\hbar^8 k^4 + 4m^4\alpha^4) \sin^2(kd)} \quad (49)$$

Coefficiente de transmisión para un potencial gaussiano

El caso de los sistemas con perfil de potencial gaussiano resulta interesante debido a su utilidad en la construcción de filtros (*energy band-pass filter*¹²) los cuales pueden permitir que los electrones incidentes puedan ser transmitidos en su totalidad cuando la energía de los electrones incidentes corresponde a la banda de paso (*passband*) y ocurre reflexión total cuando la energía incidente corresponde a la banda de rechazo (*stopband*). [21-23]

Comencemos pues determinando qué significa que el sistema tiene un perfil de potencial gaussiano. Dicho sistema está compuesto por barreras donde las alturas de las barreras V_i estarán centradas en z_i y moduladas por la función gaussiana $V(z) = V_0 \exp\left(-\frac{z^2}{\sigma^2}\right)$ donde V_0

¹² EBBF.

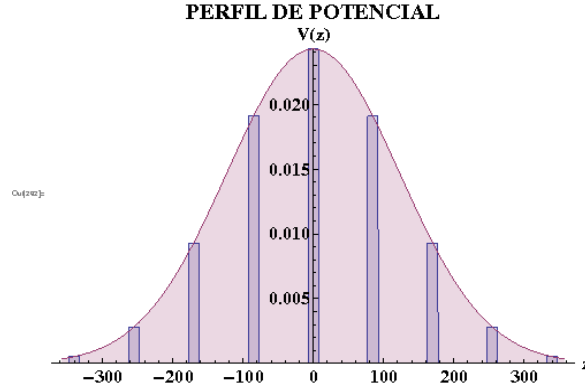


Fig. 6 Perfil de potencial gaussiano. El potencial esta dado en Ry y la posición en Å.

es constante y $\frac{\sigma}{\sqrt{2}}$ es la desviación estándar (véase Fig. 6). Dicha estructura se construye variando la fracción molar de la aleación semiconductor de $Al_{\chi}Ga_{1-\chi}As$. Los pozos están hechos de $GaAs$ y las barreras de $Al_{\chi}Ga_{1-\chi}As$. La altura V_0 corresponde al $AlAs$. Con el fin de calcular la concentración χ y la masa efectiva del electrón m de la aleación utilizaremos la aproximación del cristal virtual [24] por tanto

$$\chi_i = \frac{V_i}{V_0} \quad \text{y} \quad \frac{1}{m_i} = \frac{\chi_i}{m_A} + \frac{1-\chi_i}{m_G}. \quad (50)$$

donde m_A y m_G son las masas efectivas para el $AlAs$ y $GaAs$ respectivamente. De aquí es claro ver que a tramos tenemos potencial y masa constante lo cual implica que la ecuación de movimiento en cada uno de esos intervalos se convierte en $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} + V\psi(z) = E\psi(z)$.

Para obtener la ATM del sistema consideramos el caso de tener N_c capas donde la ATM será un producto de N_c matrices, por ejemplo, si en el intervalo (z_L, z_R) se tiene $N_c = 5$ entonces $\mathbf{T}_{sistema}(z_R, z_L) = \mathbf{T}_{b3}(z_R, z_4)\mathbf{T}_{w2}(z_4, z_3)\mathbf{T}_{b2}(z_3, z_2)\mathbf{T}_{w1}(z_2, z_1)\mathbf{T}_{b1}(z_1, z_L)$ donde el subíndice $b1$, $b2$ así como $w1$, $w2$ nos indican si es la matriz de transferencia correspondiente a una barrera o un pozo numerando barreras y pozos de izquierda a derecha¹³. El coeficiente de transmisión para sistemas de barreras gaussianas [22, 23, 25] se muestra en las Fig. 7 y Fig. 8. Para sistemas de parámetros $V_0 = 0.0242542$ Ry, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$,

¹³ En el caso de 9 barreras para obtener la ATM se realizará el producto de 17 matrices.

$L = (N_{capas} - 1)(W_b + W_w) + W_b$, N_b es el número de barreras, con anchos $W_b = 32 \text{ \AA}$ y $W_w = 62 \text{ \AA}$.

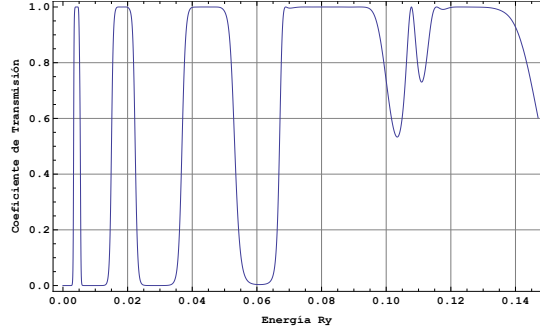


Fig. 7 Coeficiente de transmisión para 15 barreras de potencial gaussiano con $V_0 = 0.0242542 \text{ Ry}$, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$, $L = 1093 \text{ \AA}$, N_b es el número de barreras, con anchos $W_b = 32 \text{ \AA}$ y $W_w = 62 \text{ \AA}$.

Se aprecia de manera clara que a mayor número de barreras el coeficiente de transmisión en determinadas regiones de energía son más planas, por ejemplo como se muestra en Fig. 8.

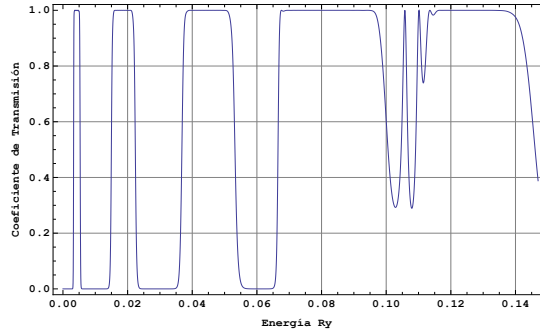


Fig. 8 Coeficiente de transmisión para 27 barreras de potencial gaussiano con $V_0 = 0.0242542 \text{ Ry}$, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$ y $L = 2017 \text{ \AA}$.

Coefficiente de transmisión para potencial de barreras uniformes

Un potencial con distribución uniforme es aquel compuesto por barreras y pozos como el mostrado en la Fig. 9. Es decir, el potencial es constante e igual para todas las barreras. Se consideraron masas iguales en cada barrera pero distintas de la masa en los pozos.

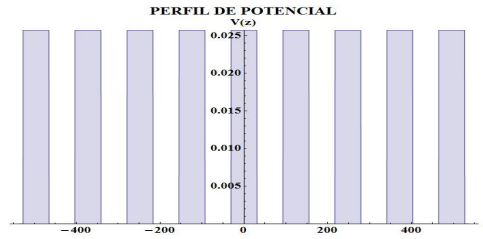


Fig. 9 Perfil de Barreras Uniforme. El potencial está dado en Ry y la posición en Å.

El coeficiente de transmisión para un perfil de potencial de 15 barreras de potencial uniforme como el que se muestra en [21], donde la masa a lo largo de todo el sistema también es constante se muestra en la Fig. 10.

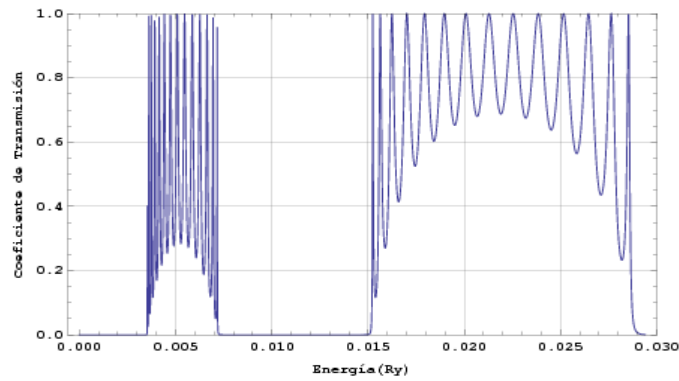


Fig. 10 Coeficiente de transmisión para un sistema de 15 barreras de potencial uniformes, donde $L = 1093\text{Å}$, $m_b = m_w = m_G$, $m_G = 0.067m_0$, $V_0 = 0.0257242\text{Ry}$, $W_b = 15\text{Å}$ y $W_w = 62\text{Å}$.

6.2 Estados ligados o acotados

En esta sección se abordan los problemas donde la partícula realizará un movimiento limitado. De la descripción cuántica se tiene que la partícula no puede acceder a energías arbitrarias sino que debe tomar valores discretos.

6.2.1 Estados acotados en sistema general

Como ya se ha mencionado se pretende estudiar sistemas en los cuales la partícula este confinada, por tanto para este problema las condiciones de contorno que debe cumplir son

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} \psi(z) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{z \rightarrow -\infty} \psi(z) = 0. \quad (51)$$

Basándonos en la sección 5 y la condición de empalme (36) para este caso es claro que $A = 0$ y $D = 0$ además deben cumplir las condiciones de contorno por tanto las soluciones son exponenciales para evitar que diverjan las soluciones. Cuando $E < V$ en lugar de k aparecerá κ , es decir, $k_L = i\kappa_L$ y $k_R = i\kappa_R$. En base a lo anterior, la solución y el empalme son los siguientes

$$\Psi(z) = \begin{cases} B\mathbf{E}_L^-(z) & z \in (-\infty, z_L) \\ \mathbf{T}(z, z_L)\Psi(z_L) & z \in (z_L, z_R) \\ C\mathbf{E}_R^+(z) & z \in (z_R, +\infty) \end{cases} \quad \text{y} \quad B\mathbf{T}\mathbf{E}_L^- = C\mathbf{E}_R^+. \quad (52)$$

De resolver el sistema se obtiene la expresión general para estados acotados.

$$\boxed{\frac{\kappa_R}{m_R} T_{11} + \frac{\kappa_L}{m_L} T_{22} + T_{21} + \frac{\kappa_L \kappa_R}{m_L m_R} T_{12} = 0}. \quad (53)$$

Pozo con dos deltas

Sea el perfil de potencial $V(z) = \alpha\delta(z - z_L) + \alpha\delta(z - z_R)$, $\alpha < 0$ y $E < 0$. La ATM en el intervalo (z_R, z_L) , es el producto de tres ATM,

dos de ellas debidas a las deltas y una al perfil de potencial y masa constante.

$$\mathbf{T}_\delta(z_R^+, z_L^-) = \mathbf{T}_2(z_R^+, z_R^-) \mathbf{T}(z_R^-, z_L^+) \mathbf{T}_1(z_L^+, z_L^-), \quad (54)$$

Entonces, la ecuación trascendente está dada por

$$\tanh(\kappa d) = - \frac{1 + \frac{\hbar^2}{2\alpha m d}(\kappa d)}{1 + \left(\frac{\alpha m d}{\hbar^2}\right) \left(\frac{1}{\kappa d}\right) + \frac{\hbar^2}{2\alpha m d}(\kappa d)}. \quad (55)$$

Pozo con paredes impenetrables

El problema a resolver tiene condiciones de contorno tipo Dirichlet esto quiere decir que la función de onda cumple con:

$$\psi(z_L) = 0 \quad y \quad \psi(z_R) = 0; \quad (56)$$

En general se cumplen las ecuaciones (30) y (31); a este hecho hay que agregarle la condición de empalme (véase (56)), lo cual nos da por resultado lo siguiente

$$T_{12} \frac{\psi'_I(z_L)}{m_I(z_L)} = 0 \quad y \quad T_{22} \frac{\psi'_I(z_L)}{m_I(z_L)} = \frac{\psi'_{III}(z_R)}{m_{III}(z_R)}, \quad (57)$$

de (57), como $\psi'_I(z_L) \neq 0 \implies$

$$\boxed{T_{12} = 0}. \quad (58)$$

Con fines meramente ilustrativos para obtener (58) de la ecuación de estados acotados general (53), consideramos cuando $\kappa_R \longrightarrow \infty$ y $\kappa_L \longrightarrow \infty$. Como las κ tienden a ∞ se eliminan los tres primeros términos quedando solo $T_{12}=0$, lo cual corresponde al resultado que previamente obtenido.

Recuperación del caso de potencial constante

Sea pues el perfil de potencial

$$V(z) = \begin{cases} \infty & z < z_L \\ 0 & z_L < z < z_R \\ \infty & z_R < z \end{cases} \quad (59)$$

Con el perfil de masa constante m para toda z y $z_R - z_L = d$ tenemos que (58) se convierte en:

$$\frac{m \sin kd}{k} = 0 \quad (60)$$

entonces $kd = n\pi$, por tanto las energías permitidas son la que cumplen con $E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2md^2}$. Este resultado se puede ver en casi cualquier libro de mecánica cuántica. A modo de ejemplo se puede citar a los libros: Griffiths ([17], §2.2, página 24), y el de Luis la Peña ([20], §3.4, página 64).

Pozo doble simétrico rectangular

Sea el perfil de potencial mostrado en la Fig. 11 con masa m constante a lo largo de todo z . Es claro ver que la solución al problema se obtiene cuando $T_{12} = 0$.

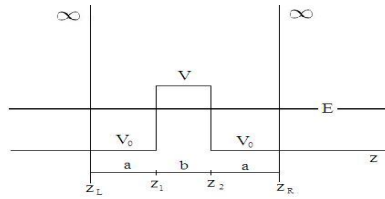


Fig. 11 Pozo Doble Simétrico.

Una vez obtenida la ATM obtenemos que la condición de cuantización está dada por

$$\tan ka + \frac{k}{\kappa} = \pm \left(\tan ka - \frac{k}{\kappa} \right) \exp(-\kappa b). \quad (61)$$

El análisis completo a este problema se puede ver el libro de ejercicios de mecánica cuántica de Luis de la Peña y Mirna Villavicencio [26], p.102-106.

Pozo delta

Sea el perfil de potencial $V(z) = \alpha\delta(z)$ sustituyendo los valores de la matriz en la ecuación (53), obtenemos que los estados ligados están dadas por

$$\kappa = -\frac{m\alpha}{\hbar^2}. \quad (62)$$

Este resultado puede consultarse en el libro de Problemas de Luis de la Peña [26] pag. 97-99 o el Griffiths [17] pag.53-55.

6.3 El problema de escape

Este problema se refiere al caso de tener electrones confinados en la heteroestructura y, de alguna manera, estos escapan del sistema. Dicho en otras palabras, para el problema de escape ya no estamos hablando de **estados estacionarios**¹⁴ sino que la población de electrones decrece. En la secciones siguientes se muestra el tratamiento general así como algunos ejemplos sencillos para ilustrar lo antes mencionado.

6.3.1 Escape en sistema general

El problema de escape de un sistema de masa variable consiste en tener sólo ondas salientes en los extremos del intervalo (z_L, z_R) es decir del perfil general solo consideraremos ondas salientes (véase la ecuación (32)), es decir $A = 0$ y $D = 0$. El empalme, es decir, la ecuación (36) queda como sigue

$$B\mathbf{T}(z_R, z_L)\mathbf{E}_L^-(z_L) = C\mathbf{E}_R^+(z_R) \quad (63)$$

una vez resuelto el sistema (63) se obtiene la ecuación trascendente

$$\boxed{\frac{k_R}{m_R} T_{11} + \frac{k_L}{m_L} T_{22} + i \left(T_{21} - \frac{k_R k_L}{m_R m_L} T_{12} \right) = 0}. \quad (64)$$

Como ya tenemos la ecuación general trascendente el siguiente paso es aplicarla en algunos casos particulares.

¹⁴ Estado estacionario: La densidad de probabilidad no cambia con el tiempo.

6.3.2 Escape de partículas confinadas en un pozo a través de una barrera finita

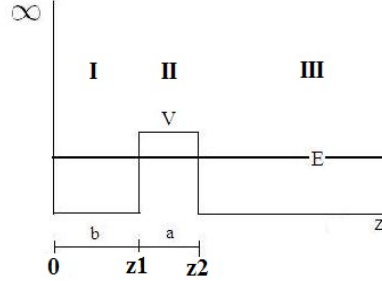


Fig. 12 Potencial usado para mostrar el escape de partículas confinadas en un pozo a través de una barrera finita. El número de partículas confinadas decae exponencialmente con el tiempo.

Para mostrar en qué consiste el problema de escape nos basaremos en el potencial mostrado en la Fig. 12. Aunque no se mostrará el desarrollo exhaustivo de cómo resolver este caso es posible consultar el libro *Introducción a la Mecánica Cuántica* para mayor detalle [20]. Podemos ver que las soluciones de la ecuación de Schrödinger para las distintas regiones son:

$$\begin{aligned}\psi_I &= A_1 \sin(kz) \\ \psi_{II} &= A_2 \exp[-q(z - z_1)] + B_2 \exp[q(z - z_1)] \\ \psi_{III} &= A_3 \exp[ik(z - z_2)] + B_3 \exp[-ik(z - z_2)],\end{aligned}\quad (65)$$

con $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ y $q^2 = \frac{2m(V-E)}{\hbar^2}$.

La aplicación de las condiciones de frontera y la consideración del hecho que las partículas están inicialmente confinadas en el pozo implica que en la región III sólo hay partículas *fugadas* que se desplazan a la derecha, por tanto $B_3 = 0$. Entonces

$$\left(\tan(kz_1) + \frac{k}{q}\right) \left(1 + \frac{k-iq}{k+iq} \exp[-2qa]\right) = \frac{2k}{q} \left(\frac{k-iq}{k+iq}\right) \exp[-2qa]. \quad (66)$$

Como podemos observar las soluciones a esta ecuación son complejas. Para ver el significado de esto, recordamos que la densidad de partículas dentro del pozo es

$$\rho_I = \left| \psi_I \exp\left[-\frac{iE}{\hbar}t\right] \right|^2 = |\psi_I|^2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(E - E^*)t\right] = |\psi_I|^2 \exp\left[\frac{2\text{Im}E}{\hbar}t\right], \quad (67)$$

es decir,

$$\rho_I = |\psi_I|^2 \exp[-\Gamma t], \quad (68)$$

donde $\Gamma = -\frac{2}{\hbar} \text{Im}E$.

La ecuación (68) nos muestra que la población dentro del pozo decrece exponencialmente con el tiempo si las partículas poseen energía compleja. La fuga a través de la barrera produce un decaimiento análogo al radiactivo, en el cual la fracción de la población que decae es independiente de la población.

Entonces, para energías complejas¹⁵ tenemos que mientras la parte real (E_r) representa los niveles de energía del pozo la parte imaginaria (Γ) describe la aparición de un nuevo fenómeno: **los niveles de energía dejan de ser estacionarios y se produce un decaimiento.**

Escape de partículas alfa

Para el caso de tener una pared impenetrable es decir $k_L \rightarrow \infty$ y escape por el otro la solución se reduce a

$$T_{22} = i \frac{k_R}{m_R} T_{12}. \quad (69)$$

Una vez obtenida la ATM y sustituyendo en (69) se tiene la ecuación trascendente

$$\left(\tan kb + \frac{k}{\kappa} \right) \left(1 + \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \exp[-2\kappa a] \right) = \left(\frac{2k}{\kappa} \left[\frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \right] \right) \exp[-2\kappa a]. \quad (70)$$

Como no es la intención resolver un problema ya conocido no se presenta las soluciones ni el análisis referente a la ecuación trascendente donde resulta que las energías no son reales sino complejas, pero si este problema resulta de interés se puede consultar el libro de Luis de la Peña [20] en la sección de *Barreras Rectangulares*.

¹⁵ $E = E_r + i\Gamma$

6.3.3 Escape para un perfil de barreras gaussianas

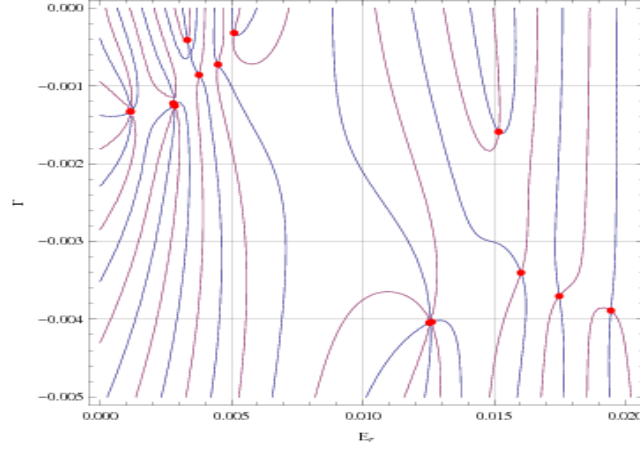


Fig. 13 Gráfica correspondiente a la solución del problema de Escape para 9 barreras con perfil de potencial gaussiano, $\text{Re}[Escape(E_r, \Gamma)] = 0$ y $\text{Im}[Escape(E_r, \Gamma)] = 0$ con $V_0 = 0.0257242$ Ry, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$, $W_b = 15 \text{ \AA}$, $W_w = 62 \text{ \AA}$ y $L = 631 \text{ \AA}$. Los puntos rojos indican la solución, es decir el conjunto: $\{0.0011609, -0.0013303\}$, $\{0.0011608, -0.0013296\}$, $\{0.0027905, -0.0012242\}$, $\{0.0028447, -0.0012553\}$, $\{0.0033213, -0.00041047\}$, $\{0.0037676, -0.00085916\}$, $\{0.0044914, -0.00072527\}$, $\{0.0051048, -0.00032010\}$, $\{0.012531, -0.0040451\}$, $\{0.012627, -0.0040352\}$, $\{0.015170, -0.0015902\}$, $\{0.016019, -0.0034021\}$, $\{0.017476, -0.0037033\}$, $\{0.019442, -0.0038888\}$.

Consideremos un sistema con perfil de 9 barreras gaussianas las cuales siguen la descripción mostrada en 6.1.1 con parámetros $V_0 = 0.0257242$ Ry, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$, $W_b = 15 \text{ \AA}$, $W_w = 62 \text{ \AA}$ y $L = 631 \text{ \AA}$. En este caso, una vez obtenida la ATM es necesario sustituirla en (64) y resolver la ecuación teniendo en cuenta que $E = E_r + i\Gamma$. La Fig. 13 muestra dichas soluciones las cuales se obtienen de la intersección de la parte real y la parte imaginaria, que se anulan independientemente.

6.3.4 Escape para un perfil de potencial de barreras uniformes

Siguiendo la misma metodología que para el caso del perfil de potencial gaussiano se aplica para el de barreras regulares, para dicho sistemas los parámetros son $V_0 = 0.0257$ Ry, masas $m_G = 0.067m_0$ y $m_A = 0.15m_0$, con anchos $W_b = 15 \text{ \AA}$ y $W_w = 62 \text{ \AA}$.

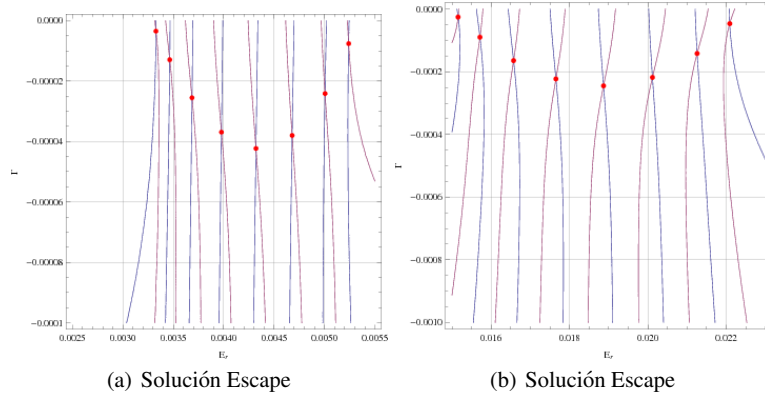


Fig. 14 Las Fig. 14(a) y 14(b) muestran las soluciones del problema de escape. Los parámetros del sistema son: $V_0 = 0.0257 \text{ Ry}$, $m_G = 0.067m_0$, $m_A = 0.15m_0$, $W_b = 15 \text{ \AA}$ y $W_w = 62 \text{ \AA}$.

6.4 Problema de pozo con un extremo rígido y regularidad en el otro extremo

6.4.1 Solución en el caso general

Las condiciones de contorno que debe cumplir son

$$\psi(z_L) = 0 \quad \text{y} \quad \lim_{z \rightarrow \infty} \psi(z) = 0. \quad (71)$$

por tanto

$$\psi_{III}(z_R) = T_{12} \frac{\psi'_I(z_L)}{m_I(z_L)} \quad \text{y} \quad \frac{\psi'_{III}(z_R)}{m_{III}(z_R)} = T_{22} \frac{\psi'_I(z_L)}{m_I(z_L)}. \quad (72)$$

En el intervalo $(z_R, +\infty)$ la solución debe ser de la forma¹⁶, entonces $\psi_{III} = \begin{pmatrix} 1 \\ -\kappa_{III} \\ m_{III}(z) \end{pmatrix} \exp[-\kappa(z - z_R)]$

¹⁶ Recordar que la ecuación de movimiento esta dada por (1), por tanto en la región III las soluciones linealmente independientes son exponenciales. Pedimos regularidad de dicha solución en la región III y como $E < V_{III}$, para que no diverja descartamos la solución que involucra a $\exp[\kappa_{III}(z - z_R)]$.

6.4.2 Recuperación del caso típico

Sea el caso más simple con $m_{II} = m_{III} = m$ y el perfil de potencial dado por

$$V(z) = \begin{cases} \infty & (-\infty, z_L) \\ V & (z_L, z_R) \\ V_1 > V & (z_R, +\infty) \end{cases}, \quad (73)$$

Si sustituimos en el sistema (72) la ATM se tiene que

$$\tan kd = -\frac{k}{\kappa}. \quad (74)$$

6.5 Problema periódico

Para resolver el problema periódico recurrimos al teorema de Bloch. Nuestras soluciones son de la forma

$$\Psi(z_R) = \exp(iqd)\Psi(z_L) \quad (75)$$

$$\mathbf{T}(z_R, z_L)\Psi(z_L) = \exp(iqd)\Psi(z_L) \quad (76)$$

$$\mathbf{T}\Psi = \lambda\Psi. \quad (77)$$

Resolvemos el problema de eigenvalores es decir, encontrar los valores de λ del sistema (77), para ello se resuelve una ecuación cuadrática obteniendo

$$\cos(qd) = \frac{1}{2}\text{Tr}(\mathbf{T}) \quad (78)$$

6.5.1 Problema de Kronig-Penney

La matriz de transferencia para un período de la superred es $T(z_R, z_L) = T_W(z_R, z_1)T_B(z_1, z_L)$. De acuerdo con (78), la ecuación trascendente para la superred es: [28]

$$\cos(qd) = \cos ka \cosh \kappa b + \frac{1}{2} \frac{\kappa^2 - k^2}{k\kappa} \sin ka \sinh \kappa b. \quad (79)$$

6.5.2 Superred de potenciales deltas

Si tenemos una superred de potenciales delta la ATM es el producto la ATM para el $V = 0$ y una ATM correspondiente a una delta, de manera que al evaluar la matriz en un período de la red.

De acuerdo con (78) la ecuación trascendente para la superred periódica es

$$\cos(qd) = \cos kd - \frac{m\alpha}{k\hbar^2} \sin kd. \quad (80)$$

En el libro de Hendrick F. Hemeka [27] en la página 134 se puede encontrar este resultado.

7 Problemas no exactos de la ecuación de Schrödinger con masa variable

En la sección anterior se muestran una gran variedad de problemas exactos para la ecuación de Schrödinger con masa variable. A lo largo de esta sección vamos a abordar algunos problemas donde la solución no se obtiene de manera exacta.

7.1 Relación entre el problema de transmisión del perfil de potencial doble delta y el pozo intermedio

En la sección 6.1.1 se encontró la expresión del coeficiente de transmisión para el problema de dos barreras deltaicas, por comodidad la reescribimos como sigue

$$T = \frac{f^4}{f^2 \left[f^2 + \frac{4\alpha^2}{\epsilon_0^2 d^2} \right] \cos^2(f) + \frac{8\alpha^3 f}{\epsilon_0^3 d^3} \cos(f) \sin(f) + \left[f^4 + \frac{4\alpha^4}{\epsilon_0^4 d^4} \right] \sin^2(f)}, \quad (81)$$

donde

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{md^2}, \quad f(E) = \sqrt{\left(\frac{m}{m_0}\right) \left(\frac{d}{a_B}\right)^2 \left(\frac{E}{Ry}\right)} = f.$$

Ahora bien, como ya tenemos una expresión de T la cual sólo depende de la energía $T(E)$ y estamos interesados en relacionarlo con el pozo infinito evaluamos T en $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2md} = \left(\frac{m_0}{m}\right) \left(\frac{a_B}{d}\right)^2 n^2 \pi^2$ que es la energía del pozo infinito. Denotaremos por T_n a la transmisión en E_n , entonces

$$T_n = \frac{1}{1 + \frac{4\alpha^2 m^2 d^2}{n^2 \pi^2 \hbar^4}}. \quad (82)$$

Tomando (81) se procede a graficar para distintos valores de α , lo que se observa no es más que el efecto ondulatorio debido al perfil de potencial. Lo interesante aparece cuando se compara con los valores de T_n que es T evaluado en las energías del pozo intermedio (82). Si $T_n \approx 1$ se debe cumplir que $\frac{4\alpha^2 m^2 d^2}{n^2 \pi^2 \hbar^4} \ll 1$ entonces

$$\alpha \ll \frac{\hbar^2 \pi}{2md} n. \quad (83)$$

De acuerdo con lo anterior en la Fig. 15 se muestra que para valores pequeños de α , T se aproxima a 1 más “rápido”. Ahora bien, para determinar cuando coinciden las energías que corresponden al máximo de T con las energías del pozo intermedio, sabemos que cuando $T_n \approx 1$ entonces $\alpha \ll \frac{\hbar^2 \pi}{2md} n$, pero ésta condición nos dice precisamente que tan “rápido” (81) se aproxima a 1, lo cual implica que a valores pequeños de alfa el intervalo de energías E_n donde hay una mayor coincidencia se reduce, mientras que conforme aumentemos el valor de α el intervalo de energías E_n es mayor.

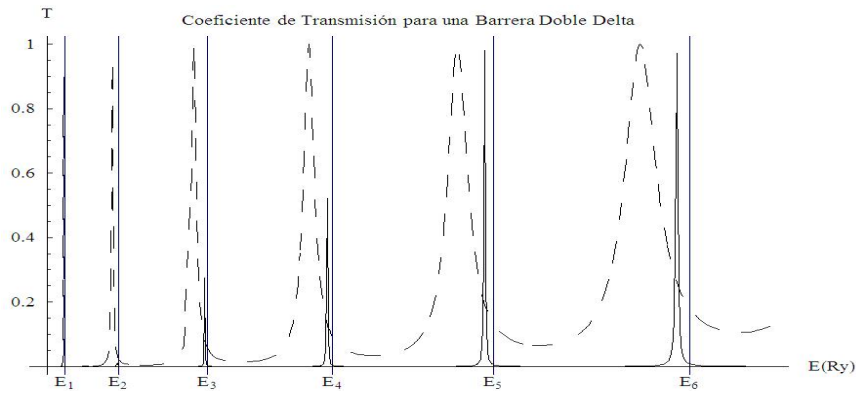


Fig. 15 Problema de Dos Barreras Deltaicas. La imagen muestra el coeficiente de transmisión T en función de la energía para $\alpha = 10a_B$ Ry (línea continua) y $\alpha = 2a_B$ Ry (línea punteada). De la imagen se puede apreciar que a mayor valor de α los máximos de T coinciden con las energías del pozo intermedio las cuales en el gráfico están denotadas por las E_n con $n = 1..6$. Para ambos casos la masa y la distancia es $m = 0.1m_0$ y $d = 100a_B$.

7.2 Coeficiente de transmisión de perfil de potencial gaussiano y problema de escape

De las secciones 6.1.1 y 6.3.3 se muestra como obtener el coeficiente de transmisión y las soluciones al problema de escape de un sistema con perfil de potencial gaussiano. Para el caso de un sistema de 9 barreras con parámetros $V_0 = 0.0257242$ Ry, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$, $W_b = 15\text{\AA}$, $W_W = 62\text{\AA}$ y $L = 631\text{\AA}$. Ahora bien, para relacionar dichos problemas se procede a graficar el coeficiente de transmisión y también las E_r encontradas a las cuales se les asocia un intervalo $(E_r - \frac{\Gamma}{2}, E_r + \frac{\Gamma}{2})$ (véase Fig.16).

El mismo proceso se sigue para el caso de 7 barreras dando por resultado la Fig. 17.

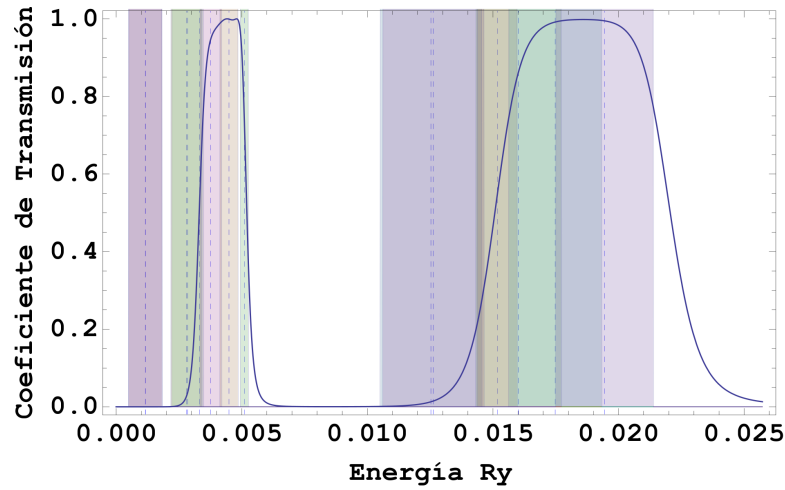


Fig. 16 Coeficiente de Transmisión para 9 barreras de potencial gaussiano con $V_0 = 0.0257242\text{Ry}$, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$, $W_b = 15\text{Å}$, $W_W = 62\text{Å}$ y $L = 631\text{Å}$. Las líneas punteadas naranjas corresponden a los E_r y el ancho de cada E_r encontrado es su correspondiente Γ tal que $(E_r - \frac{\Gamma}{2}, E_r + \frac{\Gamma}{2})$.

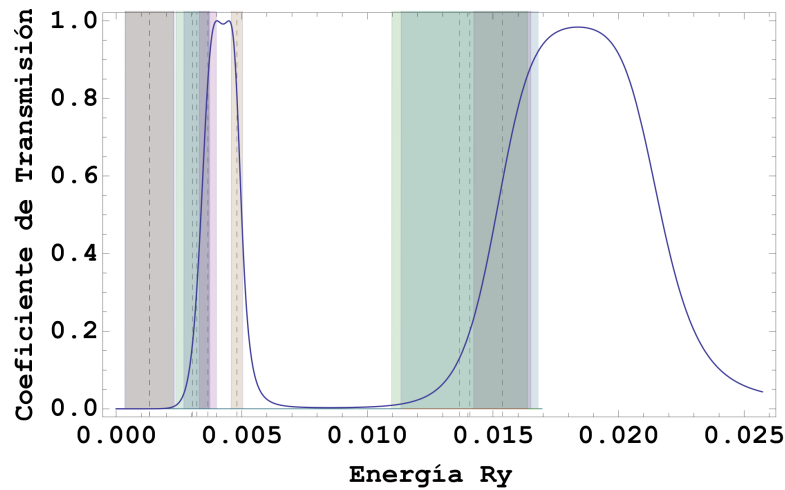


Fig. 17 Coeficiente de Transmisión para 7 barreras de potencial gaussiano con $V_0 = 0.0257242\text{Ry}$, $m_A = 0.15m_0$, $m_G = 0.067m_0$, $W_b = 15\text{Å}$, $W_W = 62\text{Å}$ y $L = 323\text{Å}$. Las líneas punteadas naranjas corresponden a los E_r y el ancho de cada E_r encontrado es su correspondiente Γ tal que $(E_r - \frac{\Gamma}{2}, E_r + \frac{\Gamma}{2})$.

Es importante mencionar que un mayor número de barreras existen intervalos de transparencia y las energías E_r y Γ tienden a agruparse

hacia las zonas justamente donde la transmisión es total. Básicamente lo que se observa es un mayor traslape en las zonas de $T = 1$ dicho en otras palabras la rapidez de decaimiento en el sistema (el escape de los electrones) por tanto, que exista un traslape de los Γ se ve reflejado en el hecho de que al traslaparse los anchos determinados por los Γ aparecen bandas de transparencia. Ahora bien esto no es concluyente debido a que las soluciones del problema de escape no caen exactamente en los intervalos de transmisión total.

7.3 Coeficiente de transmisión de perfil de potencial de barreras uniformes

Siguiendo la misma metodología de la sección anterior se muestra para el caso de 9 barreras de potencial uniforme el coeficiente de transmisión y las soluciones al problema de escape (véase las Fig. 7.3 y Fig. 19).

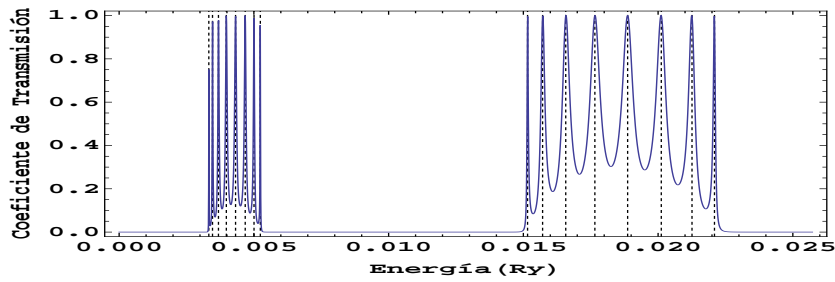
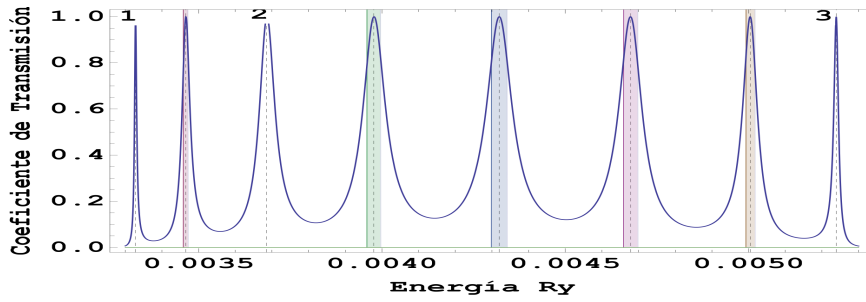
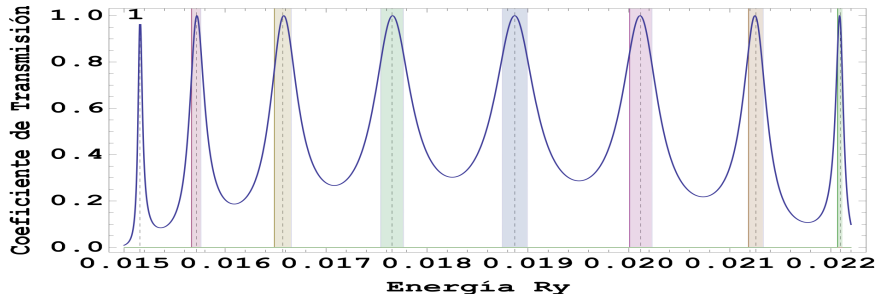


Fig. 18 Coeficiente de Transmisión. Las líneas punteadas indican los distintos E_r obtenidos de resolver el problema de escape. Los parámetros del sistema son: $V_0 = 0.0257$ Ry, $m_G = 0.067m_0$, $m_A = 0.15m_0$, $W_b = 15$ Å y $W_w = 62$ Å.



(a) Primer zona de transmisión de la Fig.7.3. Los números indican E_r a los que no se les aprecia el intervalo $(-\frac{\Gamma}{2}, \frac{\Gamma}{2})$ correspondiente, por tanto, para el 1, 2 y 3 tenemos los siguientes $(0.0033262, 0.0033297)$, $(0.0036729, 0.0036984)$ y $(0.0052356, 0.0052433)$.



(b) Segunda zona de transmisión de la Fig.7.3. El número 1 indica al E_r que no se le aprecia el intervalo $(-\frac{\Gamma}{2}, \frac{\Gamma}{2})$ correspondiente, por tanto, para el 1 es $(0.015143, 0.015169)$.

Fig. 19 Coeficiente de transmisión del sistema de 9 barreras regulares junto con las soluciones de escape donde las líneas punteadas representan los E_r y cada uno de estos tiene asociado un Γ producto de resolver la ecuación trascendente de manera las zonas iluminadas indican intervalos $(E_r - \frac{\Gamma}{2}, E_r + \frac{\Gamma}{2})$.

En el caso de sistemas de barreras uniforme, se observa que a diferencia del caso gaussiano al comparar el coeficiente de transmisión y las soluciones del problema de escape, el traslape de los intervalos $(E_r - \frac{\Gamma}{2}, E_r + \frac{\Gamma}{2})$ no ocurre, además también resulta interesante observar como los E_r son muy cercanos a las energías para las cuales la transmisión vale uno.

8 Relaciones entre algunos problemas de contorno en la ecuación de Schrödinger con masa variable

8.1 Preliminares

A muchos efectos vale la pena estudiar la relación que existe entre las soluciones de diversos problemas de contorno planteados en la misma ecuación. A continuación analizaremos algunos de estos para la ecuación de Schrödinger con masa variable. Se trata siempre del mismo potencial y la misma masa definidos en el intervalo $[z_L, z_R]$ de la figura 2. La diferencia entre uno u otro problema está en cómo se extienden estas magnitudes a la izquierda de z_L y a la derecha de z_R y correspondientemente qué condiciones de contorno se exige a las soluciones en estos intervalos extremos. Algunos pocos ejemplos:

1. Extensión periódica. Se impondrían las condiciones de Bloch. El periodo $d = z_R - z_L$.
2. Extensión constante. Es la que sugiere la figura 2. Para $E < \text{Min}\{V(-\infty), V(+\infty)\}$ suele exigirse que las soluciones vayan a cero. Para $E > \text{Max}\{V(-\infty), V(+\infty)\}$ suele pedirse condiciones de regularidad [15, 17, 20, 26, 29-31]. Para el intervalo intermedio, si existe, se exige una condición en uno de los lados y la otra condición en el otro extremo.
3. Barreras infinitas. Nos referimos a las condiciones de impenetrabilidad de los extremos, es decir que la función se anule en z_L y z_R .
4. Extremos libres. En este caso lo que se anula es la derivada de la función. Esta es una condición difícilmente obtenible experimentalmente en un problema de Mecánica Cuántica pero no olvidemos la coincidencia entre la ecuación de Schrödinger unidimensional y la correspondiente ecuación para las ondas elásticas o las ondas electromagnéticas TE o TM [32].

Este asunto tiene importancia múltiple. Para no ir más lejos, en ocasiones no se tienen claras las condiciones experimentales de modo que se puedan inferir estas condiciones de contorno para el cálculo teórico. Para la comparación teoría y experimento no queda otra salida que aventurar ideas sobre las condiciones de contorno y estudiar las relaciones entre las condiciones que escogemos y otras plausibles.

Cabe destacar que este es una temática con aristas matemáticas insoslayables. Un operador se define por su regla de actuación, en un espacio dado. Cuando hablamos de espacio debemos entender condiciones de contorno que caracteriza al espacio de trabajo. Es decir, que en lo que sigue estamos relacionando las soluciones (eigenvalores y eigenfunciones) de dos operadores distintos. Ver, por ejemplo, el excelente libro de Friedman [33].

En [13, 16, 34] discutimos algunas de las particularidades de estos asuntos.

8.2 Continuidad entre los estados virtuales acotados y los acotados

Expliquemos en palabras en qué consiste esta propiedad.

Llamemos estados virtuales acotados a aquellos del continuo que tienen coeficiente de transmisión igual a uno. Cuando se varían los parámetros de la estructura, anchos de los pozos, por ejemplo, las energías de estos estados cambian. Imaginemos que variamos uno de los parámetros de tal manera que estas energías disminuyen de modo que se acercan al borde del potencial. Si se siguen variando los parámetros en cuestión aparecerá un estado acotado por debajo, evidentemente, del borde de potencial.

Hasta donde conocemos, los primeros en hacer un reporte y análisis de esta coincidencia en estructuras a capas fueron Bastard y colaboradores [35]. Más tarde nosotros mismos [34] demostramos inambiguamente la propiedad para un potencial de forma arbitraria y masa constante. La extensión a masa variable es inmediata.

Esta propiedad no solo es un análisis bello desde el punto de vista matemático y teórico. Se conoce que los estados virtuales acotados tienen características semejantes a los estados acotados a pesar de estar en una región del espectro bien distinta. Y esto se manifiesta en magnitudes como la luminiscencia medida en sistemas de heteroestructuras [9, 35-46].

8.3 Extremos de bandas y eigenenergías de los problemas de Dirichlet y Neumann

Se conoce que los estados de las bandas del problema periódico se obtienen de la diagonalización de la ATM $\mathbf{T} \equiv \mathbf{T}(z_R, z_L)$ y que esto conduce a la ecuación para las eigenenergías $\cos(qd) = 1/2\text{Tr}(\mathbf{T})$, donde q es el vector de onda de Bloch de este problema. Se sabe asimismo que el problema de Dirichlet conlleva la ecuación trascendente $T_{12} = 0$ y que el problema de Neumann o de extremos libres se resuelve a través de una ecuación trascendente semejante ($T_{21} = 0$).

En [13] se demuestra que las energías de los estados del pozo infinito $[z_L, z_R]$ o están en las brechas del esquema de bandas de su problema periódico correspondiente o coinciden con algunos bordes de bandas de este mismo problema. Y lo mismo sucede con las soluciones del problema de Neumann o sea de extremos libres. La relación entre los espectros de estos tres problemas aumenta cuando se puede escoger una celda unitaria con simetría de inversión. Entonces los espectros de los problemas de Dirichlet y Neumann se encajan uno en el otro pasando alternativamente por los bordes de banda del problema periódico [13].

Esta propiedad resulta ser particularmente importante en las estructuras cuasirregulares [47, 48], donde prácticamente nunca queda claro qué condición satisfacen los sistemas en sus extremos. Tener entonces problemas con espectros topológicamente equivalentes nos salva de la incertidumbre.

8.4 Estados virtuales acotados y brechas nulas

En [16] se demuestra que a las energías en que el sistema finito tiene un estado virtual acotado, el problema periódico correspondiente tiene una brecha (*gap*) nula; y viceversa.

Como resultado de esta propiedad tenemos que un potencial antireflectante [49] tiene un problema periódico asociado sin brechas.

Note que un problema periódico tiene un número infinito de problemas no periódicos asociados, en correspondencia con las infinitas maneras posibles de escoger la celda unitaria. Como consecuencia cuando un problema periódico tiene un estado de brecha nula, todos

los problemas no periódicos asociados tienen un estado virtual acotado a dicha energía. Lo inverso no siempre es cierto ya que solo los valores de energía para los cuales el problema no periódico tiene coeficiente de transmisión unidad pero correspondiente a un borde banda tiene la propiedad de ser una brecha nula. Más detalles pueden encontrarse en [16].

9 Conclusiones

A lo largo de este trabajo hemos mostrado el estudio de la estructura electrónica en heteroestructuras partiendo de la aproximación de masa efectiva donde la ecuación de movimiento es la ecuación de Schrödinger con masa variable. El mismo muestra el formalismo de matrices de transferencia como base para abordar problemas de dispersión, estados acotados, problemas periódicos y de escape.

Cabe resaltar que mediante la aproximación de masa efectiva se pueden obtener soluciones exactas al problema de dispersión (obtención de los coeficientes de reflexión y transmisión), al caso de estados ligados, problema periódico, problema de escape y también permite reproducir casos particulares donde la masa es constante.

Otro punto de interés es cuando se quiere relacionar dos problemas de contorno mostrando que no hay coincidencia exacta por ejemplo, en el caso de las zonas transparentes de un perfil de potencial de barreras regulares las energías del problema de escape para el mismo potencial no coinciden de manera exacta (véase el Cap. 7), mismo caso ocurre en perfiles de potencial de barreras gaussianas.

En el capítulo 8 se muestran algunas relaciones entre diferentes problemas de contorno lo cual tiene relevancia debido a que en ocasiones no se tienen claras las condiciones experimentales por tanto tener esta clase de relaciones ayuda al cálculo teórico. A lo largo del capítulo se muestra la continuidad entre los estados virtuales acotados y los acotados, los extremos de bandas y energías de los problemas de Dirichlet y Neumann además de los estados virtuales acotados y brechas nulas.

Notación**Constantes universales**

- \hbar Constante de Planck
 ($\hbar = 1.05457168 \dots \times 10^{-34}$ J . s = $4.83771 \dots \times 10^{-17}$ Ry.s)
- m_0 Masa del electrón libre
 ($m_0 = 0.91093826 \dots \times 10^{-30}$ kg)
- m_A Masa efectiva de la banda de conducción del Arseniuro de Aluminio (*AlAs*)
 ($m_A = 0.15m_0$)
- m_G Masa efectiva de la banda de conducción del Arseniuro de Galio (*GaAs*)
 ($m_G = 0.067m_0$)
- Ry Rydberg
 (1 Ry = 13.6056923 \dots eV)
- a_B Radio de Bohr
 ($a_B = 0.529177 \dots \times 10^{-10}$ m = 0.529177 Å)

Magnitudes nombradas con el alfabeto latino

N_b	Número de barreras.
N_p	Número de pozos $N_p = N_b - 1$.
N_{capas}	Número de capas $N_{capas} = N_b + N_p$.
W_b	Ancho de las barreras.
W_w	Ancho de los pozos.
$\frac{\sigma}{2}$	Desviación estándar de la función gaussiana donde $\sigma = \frac{L_0}{4}$.
E	Energía.
E_r	Parte real de la energía en el caso que E sea de la forma $E = E_r + i\Gamma$.
\mathbf{E}_L^+	Solución propagante de izq. a der. en la parte izquierda de la estructura.
\mathbf{E}_L^-	Solución propagante de der. a izq. en la parte izquierda de la estructura.
\mathbf{E}_R^+	Solución propagante de izq. a der. en la parte derecha de la estructura.
\mathbf{E}_R^-	Solución propagante de der. a izq. en la parte derecha de la estructura.
$V(z)$	Potencial dependiente de la posición.
V_L	Potencial constante del extremo izquierdo.
V_R	Potencial constante del extremo derecho.
V_0	Potencial máximo del perfil gaussiano.
$m(z)$	Masa dependiente de la posición.
m_L	Masa constante del extremo izquierdo.
m_R	Masa constante del extremo derecho.
k_L	$i\kappa_L = \sqrt{2m_L/\hbar^2(E - V_L)}$.
k_R	$i\kappa_R = \sqrt{2m_R/\hbar^2(E - V_R)}$.
$\mathbf{T}(z, z_0)$	Matriz de Transferencia Asociada (ATM).

Magnitudes nombradas con el alfabeto griego

κ_L	$\sqrt{2m_L/\hbar^2(V_L - E)}$.
κ_R	$\sqrt{2m_R/\hbar^2(V_R - E)}$.
Γ	Parte imaginaria de la energía problema escape en el caso que E sea de la forma $E = E_r + i\Gamma$.

Bibliografía

1. L. Esaki and R. Tsu. *Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors*, IBM Journal of Research and Development 14, 61-65 (1970).
2. Ignacio Gómez Cuesta. *Transporte Electrónico y Localización en Heteroestructuras de Semiconductores*, PhD thesis, Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid (2003).
3. Hugo. L. Aya Baquero. *Aspectos del desarrollo de heteroestructuras semiconductoras usadas en electrónica de alta frecuencia y optoelectrónica*, Ingeniería 5, 108-113 (2000).
4. Zh. I Alferov. *The History and Future of Semiconductor Heterostructures*, American Institute of Physics 32 (1998).
5. Daniel Granados Ruiz. *Nanoestructuras Autoensambladas mediante Epitaxia de haces moleculares de InAs sobre sustratos de GaAs (001): De los puntos cuánticos de los anillos cuánticos*, PhD thesis, Instituto de Microelectrónica de Madrid (IMM-CNM-CSIC), Facultad de Ciencias (2006).
6. L. Tirado-Mejía, J. Segura, Aminta Mendoza, and H. Ariza-Calderón. *Análisis de inhomogeneidades en el crecimiento por epitaxia en fase líquida del cuaternario $Ga_{1-x}In_xAs_ySb_{1-y}$* , Revista Colombiana de Física 35 (2003).
7. Santalla Arribas Silvia Noemí. *Crecimiento coherente de heteroestructuras semiconductoras de baja dimensión*, PhD thesis, Universidad Complutense de Madrid (2009).
8. Optoelectronics Department. *Basics of Molecular Beam Epitaxy*, University of Ulf (2002).
9. Gerald Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Les Éditions de Physique (1988).
10. José Luis Movillar Rosell. *Confinamiento nanoscópico en estructuras semiconductoras cero-dimensionales*, PhD thesis, Department de química física i analítica, Universitat Jaume I (2007).
11. Leonor Chico Gómez. *El gas electrónico confinado en sistemas semiconductores cuánticos*, PhD thesis, Universidad Complutense de Madrid (1993).
12. R. Pérez-Álvarez. *Matrices de Transferencia y Funciones de Green en el estudio de heteroestructuras multicapas*, Dr. Sc. thesis, Universidad de La Habana, La Habana (2005).

13. R. Pérez-Álvarez, C. Trallero-Herrero, and F. García-Moliner. *1D Transfer Matrices*, European Journal of Physics, 22, 275 (2001).
14. M. E. Mora, R. Pérez, and Ch. B. Sommers. *Transfer matrix in one dimensional problems*, J. Physique 46, 1021-1026 (1985).
15. R. Pérez-Álvarez and F. García-Moliner. *Transfer Matrix, Green Function and Related Techniques: Tools for the Study of Multi-layer Heterostructures*, Universitat Jaume I, 1 edition (Castellón, 2004).
16. R. Pérez-Alvarez and H. Rodríguez-Coppola. *Transfer Matrix in 1D Schrödinger Problems with Constant and Position-Dependent Mass*, Physica Status Solidi (b) 145, 493-500 (1988).
17. David J. Griffiths. *Introduction to quantum mechanics*, (Prentice Hall, New York, 1995).
18. Walter A. Strauss. *Partial Differential Equations: An Introduction*, (Wiley, Hoboken, 1992).
19. Reuven Pnini, Yoav Peleg and Elyahu Zaarur and E. Hecht. *Shaum's outline series: Theory and Problems of Quantum Mechanics*, (McGraw Hill, 2008).
20. Luis de la Peña. *Introducción a la mecánica cuántica. 3ra. Ed.*, (Ediciones Científicas Universitarias. Fondo de Cultura Económica, México, 2006).
21. I. Gómez and F. Domínguez Adame. *Electron Transport across a Gaussian Superlattice*, J. Appl. Phys. 85, 3916-3918 (1999).
22. Hasin-Han Tung and Chien-Ping Lee. *An Energy Band-Pass Filter Using Superlattice Structures*, IEEE J. Quantum Electron. 32, 507-512 (1996).
23. A. Enciso-Muñoz J. G. González-Castañón, J. Madrigal-Melchor and A. Contreras-Solorio. *Transmission and band structure of a Gaussian Superlattice*.
24. J. Singh. *Physics of semiconductor and their heterostructures*, (McGraw-Hill, 1993).
25. F. Domínguez-Adame R. Hey V. Bellini E. Diez, I. Gómez and G.B. Parravicini. *Gaussian semiconductor superlattices*, Physica E 7, 832-835, (2000).
26. Luis de la Peña and Mirna Villavicencio. *Problemas y Ejercicios de Mecánica Cuántica*, (Ediciones Científicas Universitarias, Fondo de Cultura Económica, México, 2003).
27. Hendrick F. Haneka. *Quantum Mechanics*, (University of Pennsylvania, Wiley Interscience Publication, 1981).

28. R. D Krönig and W.G. Penney. *Quantum mechanics of electrons in crystal lattices*, Royal Society London 130, 499 (1931).
29. A. Galindo and P. Pascual. *Quantum Mechanics I*, (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1990).
30. BC Cohen-Tannoudji and F Laloe. *Quantum Mechanics, volume I*, (Hermann, John Wiley & Son. INC Printed, 1977).
31. L. D. Landau and E. M. Lifschitz. *Mecanique Quantique*, (Mir, Moscow, 1966).
32. David J Griffiths and Carl A Steinke. *Waves in locally periodic media*, Am. J. Phys. 69, 137-154 (2001).
33. B Friedman. *Principles and techniques of applied mathematics*, (J. Wiley, 1956).
34. R Pérez Alvarez. *La matriz de transferencia y algunas propiedades del problema unidimensional de schödinger*, Revista Cubana de Física VI, 91-95 (1986).
35. C. Delalande, M Voos, A. C. Gossard G Bastard, U. O. Ziemelis and W. Wiegmann. *Bound and virtual bound states in semiconductor quantum wells*, Sol. Stat. Commun. 49, 671-674 (1984).
36. G Bastard. *Electronic states in semiconductor heterostructures*, IEEE J. Quantum Electron. QE-22, 1625-1644 (1986).
37. E. Reyes-Gómez, L.E. Oliveira, and M. de Dios-Leyva. *Quasi-bound states and intra-band transition energies in Gaas-(Ga,Al)As variably spaced semiconductor superlattices*, Physica B 358, 269-278 (2005).
38. H. C. Ohanian and C. G. Ginsburg. *Antibound 'states' and resonances*, Am. J. Phys. 42, 310-315 (1974).
39. Carey Schwartz. *Efficient technique for calculating the bound and virtual energy spectrum of semiconductor structures*, Appl. Phys. Lett. 50, 457-459 (1987).
40. D. W. L. Sprung, P. Jagiello, J. D. Sigetich, and J. Martorell. *Continuum bound states as surface states of a finite periodic system*, Phys. Rev. B 67, 085318 (2003).
41. D. C. Marinica, A. G. Borisov, and S. V. Shabanov. *Bound states in the continuum in photonics*, Phys. Rev. Lett. 100, 183902 (2008).
42. T. A. Weber and D. L. Pursey. *Continuum bound states*, Phys. Rev. A 50, 4478-4487 (1994).
43. H. Friedrich and D. Wintgen. *Physical realization of bound states in the continuum*, Phys. Rev. A 31, 3964-3966 (1985).

44. H. Friedrich and D. Wintgen. *Interfering resonances and bound states in the continuum*, Phys. Rev. A 32, 3231-3242 (1985).
45. Frank H. Stillinger and David R. Herrick. *Bound states in the continuum*, Phys. Rev. A 11, 446-454 (1975).
46. A. del Rio de Santiago, I. Rodriguez-Vargas and S. J. Vlaev. *Quasi-bound Electronic States in Multiple Delta-doped Quantum Wells*, PIERS Online 4, 168-170 (2008).
47. R Pérez-Álvarez, F García-Moliner, and V R Velasco. *Some elementary questions in the theory of quasiperiodic heterostructures*, J. Phys.: Condens. Matter 13, 3689 (2001).
48. V R Velasco, R Pérez-Alvarez, and F García-Moliner. *Some properties of the elastic waves in quasiregular heterostructures*, J. Phys.: Condens. Matter 14, 5933 (2002).
49. H. B. Thacker, C. Quigg, and Jonathan L. Rosner. *Inverse scattering problem for quarkonium systems. I. One-dimensional formalism and methodology*, Phys. Rev. D 18, 274-286 (1978).

Anisotropic Emission and Bragg reflector in Strain-Balanced Quantum Well Solar Cells

C. I. Cabrera, J. C. Rimada, L. Hernández, Maykel Courel, Julio C. Rimada

Resumen

Strain-balanced quantum well solar cells (SB-QWSC) extend the photon absorption edge beyond that of bulk GaAs by incorporation of quantum wells in the i-region of a p-i-n device. Anisotropy arises from a splitting of the valence band due to compressive strain in the quantum wells, suppressing a transition which contributes to emission from the edge of the quantum wells. We have studied both the emission light polarized in the plane perpendicular (TM) to the quantum well which couples exclusively to the light hole transition and the emission polarized in the plane of the quantum wells (TE) which couples mainly to the heavy hole transition. It was found that the spontaneous emission rates TM and TE increase when the quantum wells are deeper. The addition of a distributed Bragg reflector (DBR) can substantially increase the photocurrent while decreasing the radiative recombination current. We have examined the impact of the photon

C. I. Cabrera, L. Hernández, A. Enciso and D. A. Contreras-Solorio
Academic Unit of Physics, Autonomous University of Zacatecas, Czada. Solidaridad y Paseo La Bufo S/N, 98060 Zacatecas, Zac., Mexico. e-mail: luisman@fisica.uh.cu

J. C. Rimada
Solar cell laboratory, Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Zapata y G, 10400 La Habana, Cuba.

L. Hernández
Faculty of Physics, University of Havana, Colina Universitaria. 10400 La Habana, Cuba.

J. P. Connolly
Nanophotonics Technology Center, Universidad Politécnica de Valencia, 46022 Valencia, Spain.

recycling effect on SB-QWSC performance. We have optimized SB-QWSC design to achieve single junction efficiencies above 30%.

1 Introduction

The strain-balanced quantum well solar cell (SB-QWSC) is a GaAs p-i-n solar cell with quantum well (QW) layers incorporated into the i-region with InGaAs as well material and GaAsP as barrier material. The compressive strain in the InGaAs QW is matched by tensile strain in GaAsP barriers, overcoming the lattice-mismatch limitation. Using this strain-balancing technique, more than 65 quantum well layers have been grown without dislocations [1,2]. The purpose of this design is to extend the spectral response of the cell to the energy region below the absorption edge of host material, thereby increasing the short-circuit current. The consequent drop in open circuit voltage (V_{oc}) of a SB-QWSC due to the extended spectral response is minimised due to the higher bandgap of the GaAsP barriers with respect to the bandgap of GaAs. The net result is an increase in solar cell conversion efficiency due to the additional short-circuit current (J_{sc}) from the quantum wells. Photo-generated carriers can escape from the quantum wells with near unity efficiency via a thermally-assisted tunneling process due to the presence of the built-in electric field in the intrinsic region. SB-QWSC can achieve optimal band-gaps for the highest single-junction efficiencies due to the tunability of the quantum well thickness and composition.

The GaAsP and InGaAs layer widths were chosen to ensure the average lattice parameter across the i-region was equal to that of GaAs. Elastic constants were considered to evaluate the tensile and compressive strain in GaAsP and InGaAs layers. Thus, if L_B is the barrier thickness, L_W is the well thickness, $a_{GaAs_{1-y}P_y}$ and $a_{In_xGa_{1-x}As}$ are the respective well and barrier lattice constants; we define

$$a_{GaAs} = \langle a \rangle = \frac{L_B a_{GaAs_{1-y}P_y} + L_W a_{In_xGa_{1-x}As}}{L_B + L_W}. \quad (1)$$

Biaxial strain can only be achieved on the nano-scale, giving nano-structured solar cells a fundamental advantage over bulk semiconductor solar cells. The changes in the band structure of the layer un-

der strain have significant effects on the SB-QWSC. The growth of strained GaAsP and InGaAs layers allows a wider choice of P and In compositions to fit the energy levels in the quantum wells. Thus, the balanced strain between GaAsP and InGaAs layers is also designed as an extra parameter to tailor the layer materials and the SB-QWSC performance.

The total strain in the layer may be resolved into a hydrostatic component and an axial component. For unstrained bulk material, the heavy hole (hh) and light hole (lh) bands at the top of the valence band are degenerated at the Brillouin zone center. The hydrostatic component of strain modifies the band edges, thereby changing the band gaps. The axial strain component acts on degenerate bands, specifically the valence bands, lifting the degeneracy that exists for the heavy-hole and light-hole bands at the band edge (Γ -point). More specifically, compressive strain displaces the bottom energy of the conduction band to higher energy and splits the valence band, with the lh band moving further from the conduction band such that the highest valence band is the hh band. Conversely, under tensile strain, the GaAsP band gap is reduced and the highest valence band is the lh band. Consequently, when the In and P compositions are varied, the strains in the barrier and well layers modify absorption threshold in both layers. This behavior was demonstrated in previous work [3].

As a consequence of this behavior, compressive strain results in lower thermal occupancy of the lh band relative to the hh band, and radiative transitions from the conduction to the hh band are favored over those to the lh band. If the splitting becomes greater than a few $k_B T$, lh transitions may be almost entirely suppressed [4,5]. In order to examine this behavior, the anisotropic radiative recombination and gain, as consequence of the strain in the quantum wells, is investigated in this paper in order to determinate their influence in the SB-QWSC performance.

As a result of the dislocation-free material, the radiative recombination dominates in SB-QWSCs at high current levels bringing the structure close to the radiative limit [6]. This allows the exploitation of radiative photon recycling by means of the growth of distributed Bragg reflectors between the active region and the substrate of the cell, increasing the efficiency of the SB-QWSC [7].

This observed increase in solar cell efficiency due to distributed Bragg reflectors (DBRs) is due to first to the reduction of the dark

current via radiative photon recycling, and secondly to an increase in photocurrent. The first is due to the reflection of radiative emission back into the cell, reducing the net radiative emission and therefore the radiative dark current which, as we have seen, dominates in these structures. The second is the product of the reflection of photons back into the cell of photons which would otherwise have been absorbed in the substrate, leading to decreased photon loss to the substrate, and increasing the photocurrent, equivalent to a net increase in the quantum well absorption.

We will discuss the theoretical background to radiative recombination, gain and photon recycling. The electron and hole quasi-Fermi separation was calculated in order to compute the spontaneous TE and TM emission rate from QW and gain as a function of In composition. Similarly, the optical transitions in a quantum well are evaluated to calculate the QW absorption coefficient. Then we present the results of simulations of the SB-QWSC that it takes account of DBR and anisotropic effects. We calculate quantum and conversion efficiencies and observe an increment in the SB-QWSC performance, particularly under solar concentration.

2 Anisotropic radiative emission and gain

In a previous paper [3], it was shown that high SB-QWSC performance was achieved for 3% In composition. Moreover, for SB-QWSC with deeper quantum wells (higher indium fraction) the efficiency falls. However, the radiative recombination current could be suppressed in SB-QWSC devices with deep QWs relative to the prediction of the generalized Planck formula assuming isotropic emission. This effect was not considered in reference [3] but it will be taken into account in the present work.

Following reference [4,5], emission can be defined as TE, which is polarized in the plane of the QWs, and TM, which is polarized perpendicular to the plane of the QWs. It is therefore possible for TE-polarized light to be emitted either out of the face or the edge of the QWs, whereas TM-polarized light can only be emitted out of the edge of the QWs, as shown in Fig. 1. The hh transition couples solely

to TE-polarized emission, and the lh band couples predominantly to TM-polarized emission with a minor TE-polarized contribution [8].

The spontaneous emission rates, R_{spont} , were calculated by ab-initio methods [9], where the transition from bulk to quantum wells structures was carried out by converting the 3D density of states to the 2D density states. Calculations of TE and TM emission out of the faces and edges of a quantum well include the strain modifications to the spontaneous emission rate resulting from varying the In and P compositions and their layer widths such that the condition given by Eq. (1) is satisfied.

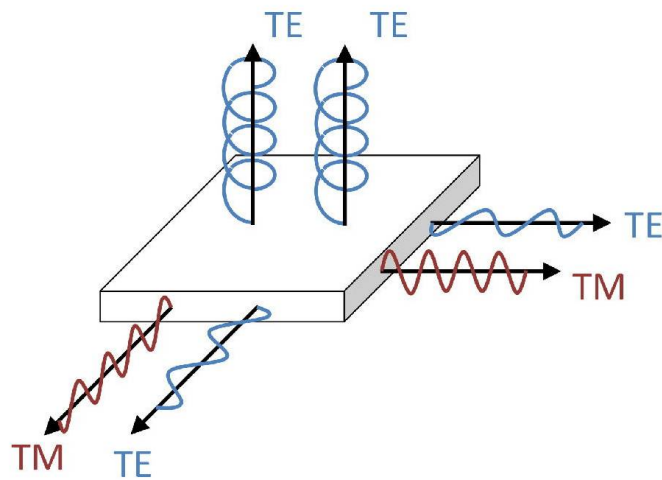


Fig. 1 The polarization of the emission out of the faces and edges of a quantum well. Light polarized in the TM mode can only be emitted out of the edge. Light polarized in the TE mode can be emitted out of the face or edge [4,5].

The emission spectrum from a solar cell depends on the absorption coefficient and the carrier density through the quasi-Fermi-level separation, μ . To model the emission from either sample at a given generated strain we first calculated the absorption coefficient using a quantum-mechanical model. We solved for the energy levels of the strain-balanced QW within the envelope function approximation and then calculated the absorption coefficient using Fermi's golden rule. In order to determine the QW energy levels in the hh and lh bands

under varying compressive strain a $4 \times 4 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Kohn-Luttinger Hamiltonian was used [3]. Furthermore, valence band structure for holes in the quantum well was calculated using a $4 \times 4 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ Hamiltonian model. The ΔE_f values for the AM1.5 solar spectrum [10] were computed for a more general method to the one reported by Tsiu et al [11].

We assumed that the number of photogenerated carrier pairs is equal to the total emitted photo flux. In the absence of any photon density, the emission rate is the spontaneous emission rate, provided an electron is present in the state \mathbf{k} and a hole is present in the same state \mathbf{k} in the valence band. The rate depends on the occupation probability functions for electrons, f_e , and holes, f_h , with the same k -value. The occupation probability function for electrons and holes depends on the corresponding quasi-Fermi level. The spontaneous emission rate expression for quantum well structures is obtained by integration over all possible electronic states:

$$R_{\text{spont}} = \int d(\hbar\omega) A \hbar\omega \sum_{n,m} \frac{d^2k |\hat{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{p}_{if}|^2}{(2\pi)^2} \delta(E_n^e(\mathbf{k}) - E_m^h(\mathbf{k}) - \hbar\omega) f_e(E_n^e(\mathbf{k})) f_h(E_m^h(\mathbf{k})). \quad (2)$$

The integral over $d(\hbar\omega)$ is carried out in order to find the rate for all photon emitted and the integration over $d^2\mathbf{k}$ is performed to include all the occupied electron and hole subband states.

Equation (2) summarizes the discrete energy states of the electrons (n) and the heavy holes (m) in the well. $E_n^e(\mathbf{k})$ and $E_m^h(\mathbf{k})$ denote the energies of the QW subbands of electrons and heavy holes, respectively, and δ denotes the Dirac delta function. The factor $A = 2q^2 n_r / (m_0^2 c^3 \hbar^2)$ is a material-dependent constant, where \hbar is the reduced Planck constant, n_r is the refractive index of the well material, m_0 is the free electron mass, q is the electron charge and c is the speed of light. The first term inside the element $|\hat{\mathbf{a}} \cdot \mathbf{p}_{if}|$ is the polarization unit vector, $\hat{\mathbf{a}}$, whereas the second term represents the momentum matrix element, \mathbf{p}_{if} . The spontaneous emission rate of the QWs was calculated using the above formula.

In a semiconductor under nonequilibrium conditions, the total electron concentration n and the total hole concentration p are related to be the respective electron and hole quasi-Fermi levels. If detailed bal-

ance is applied when each photon produces one electron-hole pair and all recombination events produce one photon, the electron and hole quasi-Fermi levels in the quantum well structure can be calculated by solving the following system of equations:

$$\begin{aligned} n(E_{F_e}) &= p(E_{F_h}) \\ \Delta E_f &= E_{F_e} - E_{F_h}, \end{aligned} \quad (3)$$

where E_{F_e} and E_{F_h} are the electron and hole quasi-Fermi level respectively.

Determining ΔE_f is essentially a matter of normalizing the emission spectrum to the generation rate. If detailed balance applies, the number of photogenerated carrier pairs is equal to the total emitted photon flux, and the gain (G) is defined as the number of photogenerated carrier pairs per unit area and time:

$$G = \int_0^\infty \int G(\lambda, z) dz d\lambda = \int_0^\infty L(\hbar\omega) d(\hbar\omega), \quad (4)$$

where $G(\lambda, z)$ is the electron-hole pair generation rate at a depth z from the surface, along the growth direction, and is given by the expression:

$$G(\lambda, z) = [1 - R(\lambda)] \alpha(\lambda, z) F(\lambda) \exp \left[- \int_0^z \alpha(\lambda, z') dz' \right]. \quad (5)$$

In this expression, $R(\lambda)$ is the surface reflectivity spectrum of the antireflection layer (ARC), $F(\lambda)$ is the AM1.5 solar spectrum and $\alpha(\lambda, z)$ is the absorption coefficient to a z depth from the surface. The exponential factor is due to the attenuation of light in the layers between the surface of the cell and the depletion layer. The layers considered in our calculus are antireflection layer, emitter layer, and space-charge region from to the emitter layer (see figure 2).

On the other hand, the emitted flux density, $L(\hbar\omega)$, of photons with energy $\hbar\omega$, is given by:

$$L(\hbar\omega) = \frac{2n_r^2}{\hbar^3 c^2} \frac{\alpha(\hbar\omega) (\hbar\omega)^2}{e^{\frac{\hbar\omega - \Delta E_f}{k_B T}} - 1}. \quad (6)$$

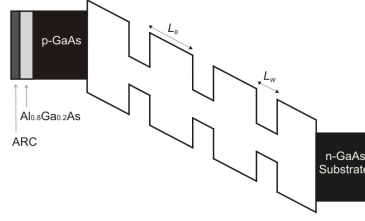


Fig. 2 The schematic band-structure of the SB-QWSC. The QW stack is embedded within the depletion zone of the GaAs cell and extends the absorption edge of the cell beyond that of a classical GaAs solar cell.

At a low enough carrier density, when ΔE_f is much smaller than the effective band gap, the Boltzmann approximation can be used, and Eq. (6) simplifies in such a way that the dependence on ΔE_f becomes an explicit function. From Eq. (4) and Eq. (6), we find:

$$\Delta E_f = -k_B T \ln \left[\frac{1}{G} \int_0^\infty \frac{2n_r^2}{(2\pi\hbar)^3 c^2} \alpha(\hbar\omega) (\hbar\omega)^2 e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} d(\hbar\omega) \right]. \quad (7)$$

The total electron concentration is calculated by:

$$n = \int_{E_{w_e}}^{E_{b_e}} g_e^{QW}(E) f_e(E) dE + \int_{E_{b_e}}^\infty g_e^{bulk}(E) f_e(E) dE \quad (8)$$

where E_{w_c} (E_{b_c}) is the conduction band edge energy for the quantum well (barrier) material; g_e^{QW} is the quantum well electron density of states and g_e^{Bulk} is the bulk density of electron states in the quantum well material. To calculate the total hole concentration we proceed in a similar way. Accordingly, the equation system (3) can be solved and the quasi-Fermi level is determined. The spontaneous emission rate from QW region was then computed by using equation (2).

Figure 3 shows TE and TM spontaneous emission rates and the ratio TM/TE as a function of In fraction. The discontinuous steps at approximately 6% In contents are due to the emergence of QW energy transitions, $e2 - hh2$ and $e2 - lh2$, as long as the well depth increases. It can be seen that for increasing In fraction, the QWs are under higher compressive strain. As a result of this, radiative transitions from the conduction band to the hh band (TE) are favored over those to the lh band (TM). However, both polarized emissions increase with well

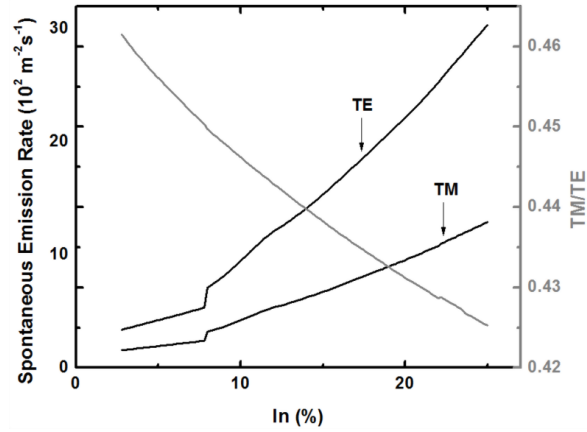


Fig. 3 Modeled spontaneous emission rate for TE and TM modes and TM/TE ratio versus In composition for 10 well embedded within i-region of the SB-QWSC. Well width, $L_W = 15$ nm and P composition $y = 0.05$. The TE mode is favored over TM mode, but both polarized emissions increase with well depth.

depth, showing that biaxial compressive strain does not suppress a mode of radiative recombination in the plane of the QWs, although certainly the TM/TE ratio is reduced. We therefore observe that augmenting the In composition leads to larger radiative recombination which increases the total recombination dark current.

In figure 4, spontaneous emission rates and gain are plotted as functions of In molar fraction. The spontaneous emission rates in QWs have already been displayed in a previous figure but are repeated here together with G in order to emphasize the huge difference between their values. From these results it follows that the generation of electron-hole pairs in the QWs is much higher than the radiative recombination, and if to these is added the existence of transverse electric field in the depletion region, which favors thermally assisted tunneling, then the carriers escape from the QWs with unity efficiency.

3 Photon recycling

A DBR is a region consisting of layers of alternating refractive indices optimized for a specific wavelength such that each layer is a quarter wavelength thick. As a result, partial reflections from each interface

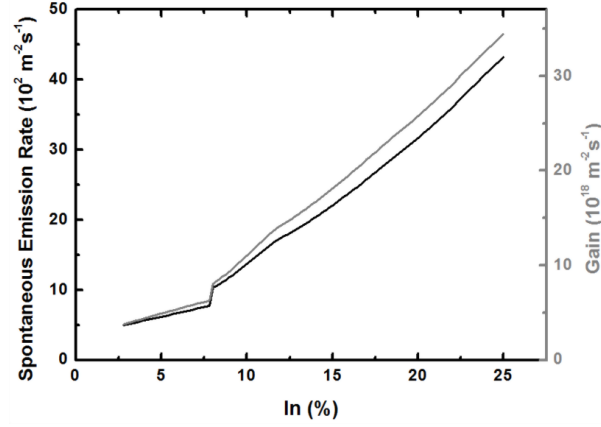


Fig. 4 Spontaneous emission rate and gain versus In composition for 10 wells embedded within intrinsic region of the SB-QWSC. Well width, $L_w = 15$ nm and P composition $y = 0.05$. Gain is several orders greater than radiative recombination.

interfere constructively and the reflectivity is high over a narrow wavelength band.

Photon-recycling is the generation of an electron-hole pair via the absorption of a photon emitted elsewhere in the cell. The increased absorption is due to the reflection of incident solar radiation which has not been absorbed on its first pass through the cell and may then be reabsorbed on its second pass. It is equivalent to say that a DBR doubles the optical path length of a SB-QWSC without altering the length over which minority carriers must travel. The photons emitted by recombination into quantum wells were also considered. The net solar incident radiation flow on front surface of a solar cell was modeled as a Fabry-Perot cavity. We obtained an expression to calculate the contribution of the multiple internal reflections inside the device and, so that the new AM1.5 solar spectrum $F_{net}(\lambda)$ is given by:

$$F_{net}(\lambda) = F(\lambda) \left[1 + \frac{r_B (r_A + e^{\alpha_T^*})}{e^{\alpha_T^*} - r_A r_B} \right]$$

$$\alpha_T^* = \sum_j \alpha_j(\lambda) l_j; \quad (9)$$

where $\alpha_j(\lambda)$ are the absorption coefficients of each layer of Fabry-Perot cavity structure, where the exciton effect in the quantum well was taken into account, where l_j are the corresponding layer widths, and r_A, r_B are the internal reflectivity from the front and back surface of the cell, respectively.

The photocurrent J_{PH} is calculated from the total quantum efficiency (QE_{TOTAL}) of the cell:

$$J_{PH} = q \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} F(\lambda) \left[1 + \frac{r_B (r_A + e^{\alpha_T^*})}{e^{\alpha_T^*} - r_A r_B} \right] QE_{TOTAL}(\lambda) d\lambda. \quad (10)$$

In this expression, $\lambda_1 = 400\text{nm}$ and λ_2 is the effective absorption threshold determined by the fundamental electron and hole confinement states.

The p-region and n-region contributions to QE_{TOTAL} were classically evaluated by solving the carrier transport equations at room temperature within the minority carrier and depletion approximations [12]. The contribution of photo-generated carriers in the intrinsic region to QE_{TOTAL} values is calculated by the expression [13]:

$$QE_i(\lambda) = [1 - R(\lambda)] \exp \left\{ \sum_{j=1}^3 \alpha_j z_j \right\} \times [1 - \exp(-\alpha_B W - N_W \alpha_W^*)]. \quad (11)$$

Here, $R(\lambda)$ is, again, the surface reflectivity spectrum of ARC. The first exponential factor is due to the attenuation of light in the layers between the surface of the cell and the depletion layer (see figure 1). On the other hand, α_j and z_j are the absorption coefficient and the width of these precedent layers, respectively; α_B is the absorption coefficient of the bulk barrier material, and α_W^* is the dimensionless quantum well absorption coefficient, used for energies below the barrier band gap. Following Bastard [8], we calculate the density of states for the single quantum well within the envelope function approximation. The dimensionless quantum well absorption coefficient can be calculated as follows:

$$\alpha_W^* = \alpha_W \Lambda \quad (12)$$

$$\alpha_W(E) = \sum_{n,m} \alpha_{e_n-hh_m}(E) + \sum_{n,m} \alpha_{e_n-lh_m}(E); \quad (13)$$

where α_W is the well absorption coefficient and Λ is the "quantum thickness of the heterostructure", which represents the width of the region containing the QW system. Furthermore, $\sum_{n,m} \alpha_{e_n-hh_m}(E)$ and $\sum_{n,m} \alpha_{e_n-lh_m}(E)$ are sums over well states n and m , whose numbers depend on the quantum wells width and depth. $\alpha_{e_n-hh_m}(E)$ and $\alpha_{e_n-lh_m}(E)$ are the absorption coefficients due to electron-heavy hole and electron-light hole transitions to conduction band, respectively, which take into account the exciton absorption to accurately match experimental data in the long wavelength region.

The quantum well absorption coefficient $\alpha_{e_n-hh_m}(E)$ was computed by Fermi's Golden rule [8]:

$$\alpha_{e_n-hh_m}(E) = \frac{BE_p}{\Lambda E} |\langle \Psi_{e-n} | \Psi_{hh_m} \rangle|^2 \left[\frac{m_{e-hh}^*}{\hbar^2} \Theta(E - E_{gw} - E_{e_n} - E_{hh_m}) + \frac{4}{a_{ex}^2} \delta(E - E_{gw} - E_{e_n} - E_{hh_m} + E_{e_n,hh_m}^B) \right] \quad (4)$$

The formula accounts for the discrete energy states of the electrons (n) and the heavy holes (m) in the well. E_{e_n} and E_{hh_m} label the QW energies of the electrons and heavy holes with respect to the conduction or valence band edges, respectively. E_{e_n,hh_m}^B denotes the exciton binding energy and $\Theta(E)$ is the step function. For the simulation model, the δ -distribution was modified by a Gaussian broadening term to represent the inhomogeneous broadening caused by thermal effects, as well as the deviation from ideality of the QW material properties due to the limitations in the growth process. The factor $B = \pi q^2 / (n_r c m_0 \hbar)$ is a material dependent constant. The matrix element contains the electron wave function Ψ_{e_n} for the n -th electron level and the heavy hole wave function Ψ_{hh_m} of the m -th heavy hole level and E_p is the Kane matrix element (23 eV). The first term inside square brackets represents the occupation probability and determines the absorption edge of a bound state. There, m_{e-hh}^* is the reduced mass of the $e-hh$ system, whereas the second term is the additional absorption peak associated to the excitons. The quantity a_{ex} is the effective Bohr radius of the exciton. For a $e-lh$ transition a similar expression

is obtained with hh replaced by lh and $E - p$ by $E_p/3$. The absorption of the QWs was calculated using the above formula. The remaining parameters have been previously stated. On the other hand, the exciton binding energies were analytically evaluated in the framework of the fractional-dimensional space analysis [15].

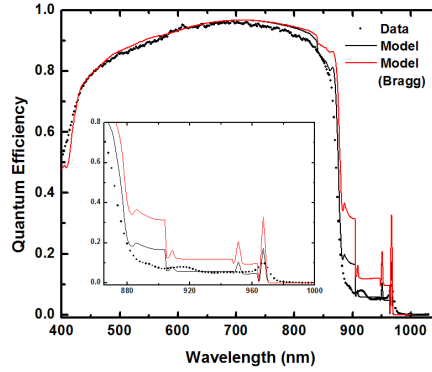


Fig. 5 Modelled and experimental quantum efficiency versus wavelength for 5 well qt1897b sample from the Quantum photovoltaics Group of Imperial College. The inset shows the wavelength range dominated by the QW absorption with and without influence of Bragg reflector.

Figure 5 shows modeled and experimental quantum efficiency (QE) versus wavelength for the qt1897b sample obtained in the Quantum Photovoltaics Group of the Imperial College. The cell is a p-i-n diode with an *i*-region containing five 9.6nm wide QWs of compressively strained $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}$ inserted into tensile-strained $\text{GaAs}_{0.91}\text{P}_{0.09}$ barriers at strain-balance condition. The extra absorption is displayed in the inset of figure 4, at wavelengths in excess of the GaAs band gap. The increase in quantum efficiency in the 880nm-1 μm is readily apparent. The figure also shows the computed QE spectrum with DBR, using $r_A = 0.1$ and $r_B = 0.95$. The main feature of this plot is that for a highly reflecting mirror, nearly all photons absorbed contribute to the QE. This is clearly a desirable feature as it implies that carrier collection from the MQW is very efficient allowing the increase in short circuit current. It is a good indicator that the QE of an MQW cell could well approach that of a bulk cell with a similar band-gap if the light could be confined inside the cell until it was completely absorbed.

4 Influence of anisotropic radiative emission and photon recycling on the SB-QWSC performance

The conventional current-voltage characteristic for a p-i-n solar cell can be written as a function of applied voltage (V) by the well-known Shockley equation for ideal diode to which the generation and recombination currents in the intrinsic region of photogenerated carriers are added. To calculate the recombination current density and photocurrent, anisotropic radiative emission and photon recycling were taken into account. Once the expressions for the effective density of states, the absorption coefficient, the radiative recombination current density, and photocurrent were found for SB-QWSC, then it is possible to compute the J-V characteristic, and conversion efficiency (η) can be evaluated [3, 16].

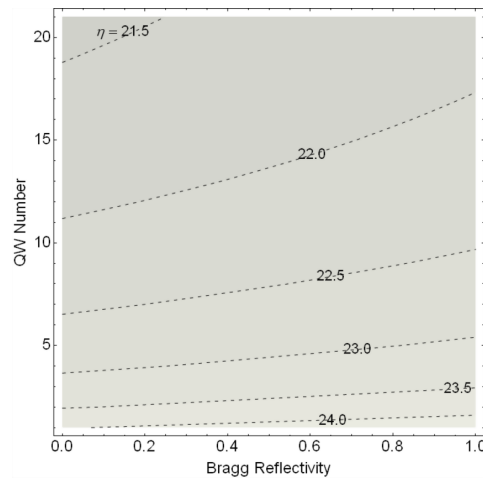


Fig. 6 Contour plot for conversion efficiency as a function of Bragg reflectivity and quantum well number. P composition is $y = 0.09$. In composition is $x = 0.17$ and $L_W = 9.6$ nm.

The dependence of conversion efficiency on back mirror reflectivity and quantum well number (N_w) is examined in figure 6. This plot suggests that with the addition of a distributed Bragg reflector in the device, fewer quantum wells are required to grow in the *i*-region in order to achieve high performance. In fact, low energy photons from the radiative recombination in the QWs can be reflected back into the

i-region and reabsorbed, reducing the dominant radiative recombination current and improving the open-circuit voltage

It can be expected that SB QWSC under concentration will be operating in a regime where recombination is dominated by radiative processes. Therefore, photon recycling effect is favored under solar concentration when photons emitted from radiative recombination are subsequently re-absorbed by the solar cell. This outcome can be observed as an increase in minority carrier lifetime or reduction in dark-current [17]. This behavior is shown in Figure 7, where we have examined the conversion efficiency as a function of solar concentration for optimized $\text{GaAs}_{0.96}\text{P}_{0.04}/\text{In}_{0.03}\text{Ga}_{0.97}\text{As}/\text{GaAs}$ solar cell with 20 nm quantum well width [3]. We used $r_A = 0.1$, $r_B = 0.95$ and resistive effects were neglected. It can be observed how the conversion efficiency should increase with solar concentration up to 1000 suns. In any concentration range, the DBR cell efficiency improvement over the non-DBR cell which is explained by the fact of the lower dark current in the DBR cell. This effect also causes that the net increase in conversion efficiency is lower with increasing N_W , as shown by figure 7.

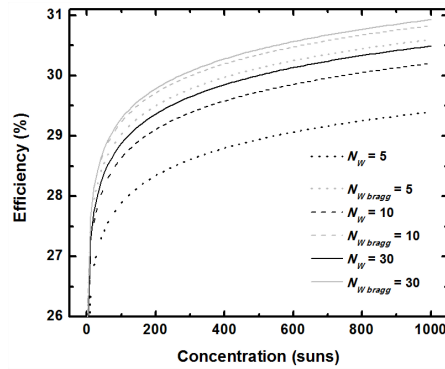


Fig. 7 Conversion efficiency as a function of solar concentration for several $\text{GaAs}_{0.96}\text{P}_{0.04}/\text{In}_{0.03}\text{Ga}_{0.97}\text{As}/\text{GaAs}$ SB-QWSC which differ in the number of QW embedded within the *i*-region with and without influence of the Bragg reflector.

5 Summary

We have studied the emission light polarized in the plane perpendicular to the quantum well, which is related to the light hole transition and, the emission polarized in the plane of the quantum wells. It was found that the spontaneous emission rates TM and TE increase when the quantum wells are deeper. We have demonstrated that biaxial compressive strain does not suppress a mode of radiative recombination in the plane of the QWs. The assumption that the photogenerated carriers can escape from the QWs with near unity efficiency, via a thermally-assisted tunneling process, is strongly supported by the several orders difference between gain and radiative recombination. For the modeled SB-QWSC with deeper QWs, both conversion efficiency and open-circuit voltage always fall because the radiative recombination increases more than the gain in photocurrent.

We have also demonstrated that photon recycling effect has a substantial impact on the overall performance of a SB-QWSC. DBR reflectivity values required are dependent on the number of quantum wells in the i-region. We have optimized SB-QWSC design to achieve single junction efficiencies above 30%. These results on DBR SB-QWSCs show that they hold much promise for use in both single junction and multi-junction space solar cells or terrestrial concentrator solar cells.

Acknowledgment

The authors wish to thank the support of CONACYT and COZCYT through project Fomix ZAC-2011-C01-172470.

References

1. D.C. Johnson, I. Ballard, K.W.J. Barnham, M. Mazzer, T.N.D. Tibbits, J. Roberts, G. Hill, and C. Calder: Proceedings of the 4th World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, Hawaii, 712 May 2006, pp. 2631 (IEEE, 2006).
2. N.J. Ekins-Daukes, J.M. Barnes, K.W.J. Barnham, J.P. Connolly, M. Mazzer, J.C. Clark, R. Grey, G. Hill, M.A. Pate, and J.S. Roberts: Sol. Energy Mater. Sol. Cells Vol. 68, p.71 (2001).
3. C.I. Cabrera, J.C. Rimada, J.P. Connolly and L. Hernández: J. Appl. Phys. 113, 024512 (2013).

4. J. G. J. Adams, B. C. Browne, I. M. Ballard, J. P. Connolly, N. L. A. Chan, A. Ioannides, W. Elder, P. N. Stavrinou, K. W. J. Barnham, and N. J. Ekins-Daukes, *Prog. Photovolt: Res. Appl.*, 19: 865877, (2011).
5. J. G. J. Adams, W. Elder, P. N. Stavrinou, J. S. Roberts, M. Gonzalez, J. G. Tischler, R. J. Walters, J. Abell, I. Vurgaftman, J. Meyer, P. Jenkins, K. W. J. Barnham, N. J. Ekins-Daukes: *Proceedings of the 35th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, pp. 1-5 (2010).
6. James P. Connolly, "Analytical Models of Bulk and Quantum Well Solar Cells and Relevance of the Radiative Limit." *Advanced Solar Cell Materials, Technology, Modeling, and Simulation*. IGI Global, 59-77 (2013).
7. D. C. Johnson, I. M. Ballard, K. W. J. Barnham, J. P. Connolly, and M. Mazzer, *Appl. Phys. Lett.* 90, 213505 (2007).
8. G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Wiley Series in Monographs of Physics: New York, 1990).
9. J. Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures* (Cambridge University Press, 2003).
10. ASTM G173-03: Standard Tables for Reference Solar Spectral Irradiances: Direct Normal and Hemispherical on 37 C Tilted Surface, ASTM International. For referenced ASTM standards, visit the ASTM website www.astm.org, or contact ASTM Customer Service at service@astm.org.
11. E. Tsui, J. Nelson, K.W.J. Barnham, C. Button, and J.S. Roberts: *J. Appl. Phys.* 80, 4599 (1996).
12. H. J. Hovel, *Semiconductors and Semimetals, Solar Cells*, edited by R. K. Willardson (Academic, 1975), Vol. 11.
13. J. C. Rimada, L. Hernandez, K. W. J. Barnham, and J. P. Connolly, *Phys. Status Solidi B* 242, 18421845 (2005).
14. H. Mathieu, P. Lefebvre, P. Christol, Simple analytical method for calculating exciton binding energies in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. B* 46, 40924101 (1992).
15. M. Courel, J.C. Rimada, L. Hernandez, *J. Appl. Phys.* 112, 054511 (2012).
16. D. C. Johnson, I. Ballard, K. W. J. Barnham, D. B. Bishnell, J. P. Connolly, M. C. Lynch, T. N. D. Tibbits, N. J. Ekins-Daukes, M. Mazzer, R. Airey, G. Hill, J. S. Roberts, *Solar Energy Materials & Solar Cells* 87, 169179 (2005).

Acoplamiento Rashba para huecos pesados en heteroestructuras semiconductoras

A. Mendoza-Álvarez, R. Cuan y L. Diago-Cisneros

Resumen

Se estudian las propiedades del acoplamiento Rashba de huecos pesados en una heteroestructura semiconductoras a partir de la construcción de un modelo adecuado que tiene en cuenta tanto modelos anteriores como datos experimentales. El hamiltoniano efectivo se deriva a partir del modelo de Pidgeon y Brown, utilizando el esquema de particionamiento de Löwdin.

The properties of the heavy hole Rashba coupling in a semiconductor heterostructure are studied. A suitable model is presented, taking into account both previously published models and available experimental data. The effective Hamiltonian is derived from the Pidgeon-Brown model, using the Löwdin partitioning scheme.

1 Introducción

La Mecánica Cuántica y la Teoría de la Relatividad revolucionaron la Física y la Ciencia en general a principios del Siglo XX. Mientras la primera se ocupa de los fenómenos que ocurren a escalas muy pequeñas, la segunda involucra velocidades cercanas a la de la luz.

A. Mendoza-Álvarez
Universidad Iberoamericana, México DF, México

R. Cuan
Departamento de Física Aplicada. Facultad de Física. Universidad de la Habana, La Habana, Cuba

L. Diago-Cisneros
Departamento de Física Aplicada. Facultad de Física. Universidad de la Habana, La Habana, Cuba
e-mail: ldiago@fisica.uh.cu

Uno de los fenómenos que se origina de la interacción entre los efectos cuánticos y relativistas es el acoplamiento entre los grados de libertad intrínseco (espín) y orbital (momento angular) de los portadores de carga (electrones y huecos). En los últimos años este fenómeno ha ganado un marcado interés, dado que constituye una de las claves para manipular el espín de los portadores de carga, en vista a desarrollar una nueva electrónica denominada *Magnetoeléctrica*, y posteriormente *Espintrónica*¹[1-4].

1.1 Nacimiento de la Espintrónica

A diferencia de la electrónica convencional, en la naciente Espintrónica se codificarían los datos basándose en la orientación del espín de los electrones. Dado que las operaciones de cambio de espín consumen poca energía, se presume que estos dispositivos requerirán baterías muy livianas. Además, los chips espintrónicos podrían permanecer desconectados entre una y otra operación. Al cambiar el espín, la energía cinética de los portadores aumenta muy poco, por lo que los circuitos generan mínimo calor. Incorporar el grado de libertad del espín en la microelectrónica y optoelectrónica daría lugar a toda una nueva generación de dispositivos [1,2]: transistores de efecto campo de espín (SFET: *spin field effect transistor*, en inglés), diodos de espín (spin-LED: *spin light emitting diode*, en inglés) o (spin-RTD: *spin resonant tunneling device*, en inglés), filtros de espín, memorias no volátiles de alta capacidad de almacenamiento, interruptores ópticos de alta frecuencia, moduladores, codificadores, decodificadores, *bits* cuánticos para implementar la computación y comunicación cuántica, etc.

Entre las primeras aplicaciones de la Espintrónica llevadas al mercado, se encuentran las cabezas lectoras de discos duros (componente fundamental de cualquier computadora), introducidas al mercado por *IBM* en 1997. Estas utilizan el fenómeno de la magnetorresistencia gigante (GMR: *giant magnetoresistance*, en inglés) reportado por Baibich *et al.* en 1988 [5] e independientemente por Binasch en 1989 [6], grupos a cargo de A. Fert y P. Grünberg respectivamente (estos últimos galardonados con el Premio Nobel de Física en 2007). La

¹ El término *Espintrónica* fue introducido por S. A. Wolf en 1996, quien en aquellos momentos estaba al frente de un proyecto sobre materiales magnéticos novedosos.

utilización de GMR garantizó un aumento en la sensibilidad a campos magnéticos más débiles y, consecuentemente, en las capacidades de lectura de información. Esto trajo consigo un incremento de tres órdenes de magnitud en el almacenamiento de datos (de ~ 0.1 a 100 Gbitsin^2) entre 1991 y 2003 [7].

Tradicionalmente, las operaciones de procesamiento de grandes volúmenes de datos y las comunicaciones se basan en dispositivos semiconductores. Asimismo, las operaciones de almacenamiento de información se basan en dispositivos de metales magnéticos y aislantes. La relevancia de los dispositivos espintrónicos está en la posibilidad de aglutinar las tres operaciones básicas (almacenamiento-comunicaciones-lógicas) en un sólo sistema híbrido.

1.2 Modelo de Rashba

Uno de los mecanismos físicos que han sido propuestos para lograr una eficiente manipulación del espín de los electrones es el acoplamiento espín-órbita tipo Rashba (SOI-R: *Rashba spin-orbit interaction*, en inglés) ampliamente conocida como *acoplamiento Rashba*. Presentaremos una breve introducción a los modelos teóricos y resultados experimentales más relevantes relacionados con el acoplamiento Rashba

Comencemos discutiendo una idea intuitiva sugerida por algunos autores [8-10]. Como consecuencia de la asimetría en el potencial de confinamiento de los sistemas cuasi-bidimensionales (Q2D: *quasi-two-dimensional*, en inglés) en la interfaz de heteroestructuras, referida en la literatura como asimetría de inversión estructural (SIA: *structure inversion asymmetry*, en inglés), los electrones “sienten” un gradiente de potencial distinto de cero ($\nabla V(\mathbf{r}) \neq 0$), *i. e.* un campo eléctrico perpendicular al plano donde se encuentran confinados (plano xy a partir de ahora) $\mathbf{F} = (0, 0, F_z)$. Los electrones se mueven con velocidad $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m^*$ en dicho plano. Sin embargo, en un sistema de referencia fijo al electrón, este campo eléctrico —por efecto relativista— se Lorentz-transforma en un campo magnético efectivo $B_{eff} = (v/c^2)F_z$ que en principio interactúa con el espín del portador.

Ahora, para valores típicos de F_z y v se tiene que $B_{eff} \sim 10^{-7} \text{ T}$, que es extremadamente pequeño en comparación con lo que se ob-

serva en los experimentos. Esta discrepancia se debe a que las transformaciones de Lorentz no contienen las contribuciones de los núcleos atómicos a la interacción espín-órbita que experimentan los electrones de Bloch en el sólido [11].

Este tipo de interacción espín-órbita fue introducida por Rashba en 1960 [12,13] para describir la absorción de ondas de radio en semiconductores tipo wurzita. Él demostró que la presencia de esta interacción introducía transiciones que involucraban cambios en los espines debido a la fuerza de Lorentz. Sin embargo, no fue hasta los 80 del siglo pasado que este fenómeno despertó un nuevo interés en la comunidad científica. Un conjunto de datos experimentales de resonancia combinada y resonancia ciclotrónica en gases de electrones Q2D (Q2DEG: *quasi-two-dimensional electron gas*, en inglés) confinados en heteroestructuras semiconductoras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, reportados por Stein *et al.* [14] and Stormer [15], mostraron que la degeneración por el espín se rompía cuando el confinamiento era debido a un potencial asimétrico. La teoría desarrollada por Rashba en el 60 le permitió, junto a Bychkov [16,17], describir apropiadamente estos resultados en términos de la interacción espín-órbita. Su modelo se basa en el hamiltoniano:

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{SOI-R}} = \alpha_R (\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{k}}) \cdot \mathbf{e}_z, \quad (1)$$

donde α_R es el parámetro de la intensidad del acoplamiento espín-órbita (parámetro de Rashba) y \mathbf{e}_z es un vector unitario en la dirección perpendicular al plano donde se encuentra el Q2DEG. El hamiltoniano $\hat{\mathbf{H}}_{\text{SOI-R}}$ (1) es invariante ante reversión temporal (TRI: *time reversal invariance*, en inglés). Por tal motivo, la SOI-R no produce polarización espontánea de un flujo de portadores de espín. No obstante, sí provoca un desdoblamiento de los estados del Q2DEG, para valores finitos del *cuasi*-vector de onda [18].

El acoplamiento Rashba produce dos ramas en la relación de dispersión de los electrones (ver Fig. 1) dadas por

$$E_+(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + \alpha_R k \quad \text{y} \quad E_-(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 - \alpha_R k, \quad (2)$$

donde $k = |\mathbf{k}_{\parallel}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ es el módulo del *cuasi*-vector de onda paralelo al plano xy del Q2DEG confinado en la dirección z . La forma apropiada del campo magnético efectivo debido a la SOI-R es [19,20]

$$B_{eff} = \frac{1}{\mu_B} \alpha_R (-k_y, k_x, 0), \quad (3)$$

donde μ_B es el magnetón de Bohr.

Como se observa en la Fig. 1, el efecto Rashba rompe la degeneración en k de los eigenestados de espín $|+\rangle$ y $|-\rangle$ ² del Q2DEG, de manera que $E_{\pm}(k) \neq E_{\pm}(-k)$, o lo que es lo mismo, existe una ruptura de la simetría de inversión espacial. La degeneración de Kramer persiste [3,11] de manera que $E_{\pm}(k) = E_{\mp}(-k)$; o sea, se conserva la simetría de inversión temporal. Lo anterior se debe a que el hamiltoniano de Rashba (1) posee TRI.

El desdoblamiento de los estados de espín puede ser detectado experimentalmente a través de las oscilaciones de Shubnikov-de Haas³ (SdH), los efectos de la antilocalización débil en la magnetoconductancia [24] y por mediciones directas de la resonancia de espín [25]. Las primeras observaciones experimentales del desdoblamiento de espín en la banda de conducción fueron reportadas en 1988 por Luo *et al.* [26] en pozos cuánticos de GaSb/InAs, e independientemente en 1989 por Das *et al.* [27] en heteroestructuras semiconductoras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}$, ambos resultados a partir de un análisis del patrón de oscilaciones SdH.

1.2.1 Acoplamiento Rashba en la banda de valencia

La interacción espín-órbita debido a la SIA en la banda de valencia es diferente a lo que ocurre en la banda de conducción. Los estados de huecos tienen *momentum* angular total $j = 3/2$. En este caso, el confinamiento a un gas de huecos Q2D (Q2DHG: *quasi-two-dimensional*

² Para un *cuasi*-vector de onda \mathbf{k} dado, siempre se puede encontrar un eje respecto al cual tengamos eigenestados de espín *up* y *down*; sin embargo no llamamos a $E_{\pm}(k)$ ramas de espín *up* o *down* puesto que la orientación de dicho eje cambia con \mathbf{k} [11].

³ En 1930 fue reportada una dependencia de la resistencia eléctrica con campos magnéticos del bismuto (efecto Shubnikov-de Haas [21]) y en su magnetización (el efecto de Haasvan Alphen [22]). Estos fenómenos adquirieron gran interés cuando Onsager en 1952 [23] demostró que podían ser utilizados para analizar las superficies de Fermi así como medir densidades de carga en sistemas bidimensionales.

La forma del término de Rashba para huecos fue confirmada posteriormente por Winkler *et al.* [32-34] a través de la teoría de los invariantes.

En el orden experimental, Stormer *et al.* [15], en 1983, fueron los primeros en observar el patrón de oscilaciones SdH dadas por el desdoblamiento de espín de la banda de valencia en heterojunturas asimétricas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Los resultados anteriores fueron confirmados al año siguiente por Eisenstein *et al.* [9], demostrándose que dicho patrón ocurría solamente en pozos cuánticos asimétricos, o sea estaban relacionados con la SIA. En ese mismo año, Wieck *et al.* [35] observaron desdoblamientos de los estados de espín en transiciones ópticas intersubbanda de huecos en capas de silicio con alta concentración de portadores en ausencia de campos magnéticos. En 2005, Minkov *et al.* [36] mostraron, a través de mediciones de magnetoconductancia en pozos asimétricos de $\text{GaAs}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, la dependencia cúbica en el vector de onda del término de Rashba.

Cabe mencionar que en semiconductores con estructura cristalina tipo blanda de zinc, o sea semiconductores III-V y II-VI, existe otra contribución al desdoblamiento de los estados de espín que es ocasionada por la asimetría de inversión volúmica (BIA: *bulk inversion asymmetry*, en inglés) del cristal subyacente, tal y como fue mostrado por Dresselhaus en 1955 [37]. Las evidencias experimentales de este desdoblamiento fueron mostradas por medio de las oscilaciones SdH en cristales de InSb [38] y, posteriormente, mediante la detección de la precesión en la polarización del espín de electrones foto-excitados en el GaAs [39].

1.2.2 Efectos del acoplamiento Rashba en las propiedades electrónicas de los huecos

La Fig. 2 muestra los efectos de la SOI-R sobre los estados energéticos de los huecos en un hilo cuántico (paneles (a) y (b) [40]), y en la interfaz de una heteroestructura (panel (d) [32]). El panel (a) corresponde a un caso en el que no se ha considerado SOI-R. Si se tiene en cuenta la SOI-R, tanto para el caso de los hilos (panel (b)) como para las heteroestructuras (panel (d)), se observa degeneración en todas las subbandas sólo para $k = 0$. Tal como sucedía en el caso electrónico (ver Exp. (2) y Fig. 1), tan pronto como nos alejamos de $k_z = 0$, la

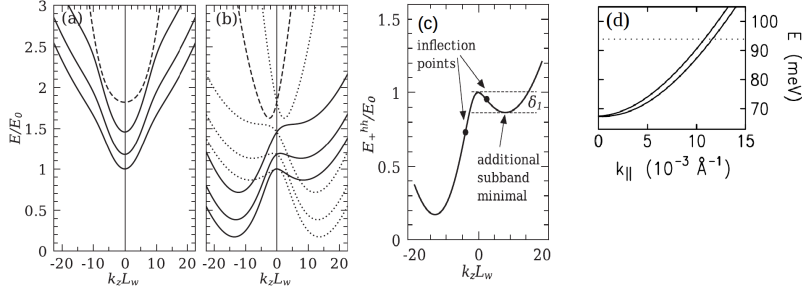


Fig. 2 (a) y (b) Leyes de dispersión de las primeras tres subbandas de huecos pesados (líneas continuas) y la primera de huecos ligeros (líneas discontinuas), para un Q1DHG confinado en un hilo cuántico, considerando nula la SOI-R (a), y para un valor distinto de cero (b)[40]. (c) Ley de dispersión correspondientes a las condiciones representadas en el panel (b), se muestra únicamente la región de los extremos múltiples en la primera subbanda de huecos pesados. (c) Ley de dispersión de la primera subbanda de huecos pesados para un Q2DHG confinado en una heteroestructura [32].

SOI-R rompe la degeneración en el vector de onda k , introduciendo un desdoblamiento de las subbandas en dos ramas, una para cada polarización del espín.

En el caso de los hilos cuánticos, las dos subbandas de huecos pesados más bajas exhiben una región donde la energía disminuye con el aumento de k (ver panel (c) de la Fig. 2), o sea existe un intervalo de energía donde los huecos tienen velocidad de grupo negativa $v_z = \hbar^{-1}(\partial E_+^{hh}/\partial k_z) < 0$ para k_z positivo [40]. La rama negativa de las dos primeras subbandas exhiben un comportamiento similar, o sea en cierto intervalo la velocidad de grupo es positiva $v_z = \hbar^{-1}(\partial E_-^{hh}/\partial k_z) > 0$ para k_z negativo. Esto significa además que existe un punto de inflexión en las leyes de dispersión donde diverge la masa efectiva de los huecos pesados. Este resultado había sido reportado anteriormente para electrones en sistemas Q1D bajo acoplamiento Rashba fuerte [41].

La presencia de extremos múltiples en el espectro de huecos en un hilo cuántico bajo acoplamiento Rashba (2 (b)), tiene consecuencias sobre la conductancia de doble electrodo de Landauer [42,43] en régimen balístico $G(E_F)$, que escrita convenientemente toma la forma [41]

$$G(E_F) = \frac{e^2}{h} M(E_F), \quad (5)$$

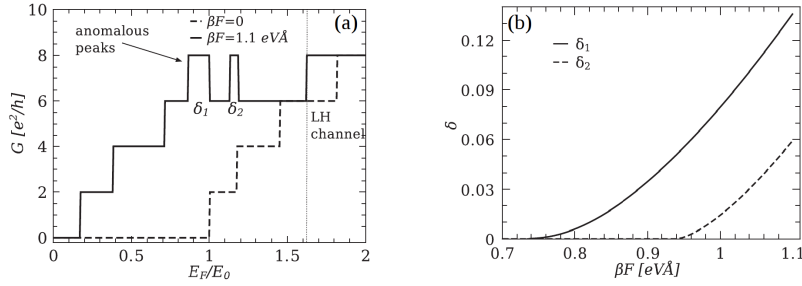


Fig. 3 (a) Conductancia de doble electrodo de Landauer, en régimen balístico, para huecos pesados sin considerar (líneas discontinuas) y considerando (líneas continuas) acoplamiento Rashba en un hilo cuántico de GaAs [40]. (b) Ancho de los picos anómalos de la conductancia en función de la fortaleza del parámetro de acoplamiento Rashba.

donde E_F es la energía de Fermi, y $M(E_F)$ es el número de subbandas ocupadas a través de las cuales los huecos se propagan en la misma dirección

$$M(E_F) = \sum_n \sum_i \sum_{s=+,-} \theta[E_F - E_{min}^s(n, i)]. \quad (6)$$

Aquí $E_{min}^s(n, i)$ es la energía del n -ésimo mínimo en la n -ésima subbanda de huecos correspondiente a la rama s . $\theta(x)$ es la función de paso unitario de Heaviside. Puesto que $E_{min}^s(n, i)$ puede encontrarse directamente a partir de las leyes de dispersión (representadas en la Fig. 2, paneles (a) y (b)), la conductancia, en este caso, queda completamente determinada por el espectro energético. Esto es, moviendo la línea horizontal $E = E_F$ desde cero hacia arriba, y contando el número de puntos en que corta las líneas espectrales. Este número coincide con el número M de modos propagantes a través del hilo.

Cuando no se toma en cuenta el acoplamiento Rashba, el espectro correspondiente (Fig. 2, panel (a)) es dos veces degenerado. La conductancia correspondiente a este caso —representada en líneas discontinuas en el panel (a) de la Fig. 3— recupera la forma cuantizada en pasos de $2e^2/h$ esperada [44].

Sin embargo, cuando el espectro es calculado tomando en cuenta el acoplamiento Rashba (Fig. 2, panel (b)), la conductancia correspondiente —representada en líneas continuas en el panel (a) de la Fig. 3— aparece a menor energía, desplazándose rígidamente respecto al caso anterior y exhibiendo picos anómalos [40]. La presencia de estos últimos es consecuencia de los mínimos adicionales de las dos primeras subbandas (Fig. 2, panel (c)), que dan lugar a modos propa-

gantes adicionales. La altura de los mínimos coincide con el cuanto de conductancia $2e^2/h$. No obstante, el ancho está determinado por profundidad del mínimo adicional con respecto al máximo local (Fig. 2, panel (c)). En el panel (b) de la Fig. 3, se ha representado la variación del ancho de los picos respecto a la fortaleza del acoplamiento Rashba β en el hilo. Estos picos dejan de observarse para ciertos valores de β , lo cual está asociado a la desaparición de tales mínimos adicionales.

2 Acoplamiento Rashba para huecos pesados en heteroestructuras semiconductoras

El propósito esencial de la presente sección es construir un modelo que describa apropiadamente el acoplamiento Rashba en el caso de huecos pesados confinados en una heteroestructura, a partir de desarrollos previos [34] y un conjunto importante de datos experimentales [33,45-47]. Para ello se comenzará con una descripción breve de la formación de un sistema de huecos Q2D en la interfaz de una heteroestructura, haciendo énfasis en el origen de la SIA, que es la responsable de que aparezca el acoplamiento Rashba, tal como se discutió en la Sec. 1.2. El modelo para el caso de huecos pesados se extraerá de un hamiltoniano efectivo, obtenido a partir del modelo de Pidgeon-Brown [48], utilizando el esquema de particionamiento de Löwdin [49]. Esto último también permitirá estudiar las propiedades de la masa efectiva de los huecos pesados en el plano transversal a la dirección de crecimiento.

2.1 Heteroestructuras con dopaje tipo p

El acoplamiento Rashba es una consecuencia directa de la asimetría del potencial de confinamiento de heteroestructuras. Con el propósito de seleccionar un modelo apropiado para describir este confinamiento, a continuación se discuten algunas de sus propiedades generales.

Podemos considerar a modo de ejemplo una heteroestructura del tipo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Esta es ampliamente discutida en la literatura dadas sus cualidades superiores en comparación con otros materiales debido al acoplamiento casi perfecto de la red cristalina del GaAs y la

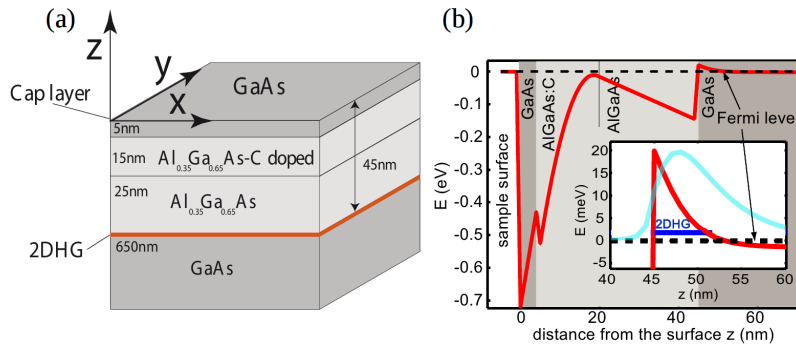


Fig. 4 (a) Esquema de una heteroestructura tipo $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (dopada con Carbono) con un Q2DHG 45 nm bajo la superficie. (b) Perfil de la banda de valencia a lo largo de la dirección de crecimiento (línea roja), calculado a partir de la ecuación de Poisson-Schrödinger, con el nivel de Fermi correspondiente (línea discontinua). Recuadro: Magnificación del potencial de confinamiento (línea roja) con el nivel energético del Q2DHG (línea azul oscuro) y el nivel de Fermi (línea discontinua), así como un perfil espacial de la densidad de carga (línea azul claro) [46].

del $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Un esquema de la estructura a capas de la misma, con dopaje tipo p usando carbono, así como un cálculo numérico del correspondiente perfil de la banda de valencia, se muestra en la Fig. 4. Debido a la diferencia entre la energía de los *gaps* del GaAs y el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, el pozo de potencial se forma en la interfaz del $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (ver recuadro de la Fig. 4 (b)). El dopaje en la heteroestructura se ajusta de tal suerte que haya un solo estado confinado en la dirección z por debajo de la energía de Fermi. Por tanto, los estados de huecos estarían confinados en la dirección z (el ancho del confinamiento es del orden de los 10 nm) y libres en el plano (xy), comportándose efectivamente como un Q2DHG.

Con el propósito de lograr altas movilidades se utiliza una técnica llamada *dopaje modulado*. Empleando esta técnica se logra separar espacialmente los dopantes de los portadores (Fig. 4 (a)). Debido a esta separación, la dispersión por impurezas es suprimida y la movilidad de los portadores alcanza altos valores. En sistemas de electrones Q2D de GaAs la movilidad excede los $10^7 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [50]. El silicio se elige como donador estándar en estas heteroestructuras de alta movilidad, típicamente crecidas en la dirección [100].

El dopaje modulado tipo p en heteroestructuras $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ crecidas en la dirección [100], fue realizado por primera vez con berilio [51]. En estos casos la movilidad solo alcanzaba los $10^4 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [52]. Un progreso en este sentido fue utilizar silicio como

ceptor. El silicio, cuya constante de difusión es 100 veces menor que la del berilio, podía incorporarse en los sitios del arsénico en el plano (311)A del GaAs. Los Q2DHG obtenidos de esta manera alcanzaban movilidades más allá de los $1.2 \times 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [53]. Sin embargo, los (311)A Q2DHG dopados con silicio tenían varios inconvenientes relacionados con la pérdida de simetría, lo cual llevaba a una estructura de bandas muy compleja y a la aparición de fuentes de dispersión que limitaba la movilidad en la mayoría de los casos. La solución a estos problemas vino dada por la posibilidad de dopar el GaAs con carbono actuando como aceptor en sustratos (100) [54]. El carbono, al igual que el silicio, tiene una constante de difusión dos órdenes de magnitud menor que la del berilio. La ventaja del carbono con respecto al silicio es su actuación como aceptor en el tecnológicamente más importante plano (100), produciendo Q2DHG más isotrópicos y con una estructura de bandas más simple [11].

Para describir con exactitud un Q2DHG confinado en la interfaz de una heteroestructura, en principio hay que resolver autoconsistentemente las ecuaciones de Schrödinger y Poisson (ver Fig. 4 (b)). Considerando en lo adelante la energía de los huecos positiva por comodidad, se modelará el perfil de potencial de la heteroestructura —la región donde queda confinado el Q2DHG (ver recuadro de la Fig. 4 (b))— como un pozo triangular de la forma [33]

$$U(z) = eFz, \quad \text{con: } F = \frac{eN_s}{2\epsilon\epsilon_0}, \quad (7)$$

donde N_s es la concentración superficial de huecos en el Q2DHG, ϵ_0 la permitividad del vacío y ϵ la permitividad relativa del semiconductor que se esté considerando. Esta aproximación ha sido utilizada exitosamente en el estudio de propiedades espectrales de electrones [55] y huecos [40].

2.2 Hamiltoniano de Pidgeon-Brown para heteroestructuras

Desde la creación del primer transistor de estado sólido en 1947, los compuestos semiconductores han sido la base de la mayoría de las tecnologías comerciales más importantes, así como de toda una nueva generación de dispositivos de frontera. Las características op-

eracionales de tales dispositivos dependen críticamente de las propiedades de los materiales que los constituyen. Para estudiar las propiedades opto-electrónicas y magneto-electrónicas de un semiconductor, es preciso conocer en detalle no sólo su estructura de bandas y las correspondientes funciones de onda, sino también un conjunto de parámetros como las masas efectivas, la energía de los *gaps*, la energía de los desdoblamientos por el espín, el factor de Landé, entre otros [56,57].

Existe una gran cantidad de métodos y teorías para obtener la estructura de bandas y sus parámetros asociados en semiconductores. Podemos citar, por ejemplo, el método de las funciones de Green, el método de amarre fuerte (*tight binding*, en inglés), el método de los pseudopotenciales parametrizados, el desarrollo por ondas planas ortogonalizadas, el desarrollo por combinaciones lineales de orbitales atómicos, la teoría WKB, y el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Cada uno de ellos puede brindar una descripción amplia en mayor o menor medida, de la estructura de bandas (y las funciones de onda) a lo largo de diferentes direcciones en el espacio recíproco. Estas metodologías, pueden incorporar explícitamente los efectos de muchos cuerpos tales como intercambio y correlación electrón-electrón o campos externos; sin embargo, algunos requieren de gran consumo de tiempo computacional, lo que limita en gran medida el número de átomos a simular en una red cristalina. Aunque todos ellos involucran cálculos muy complejos y proporcionan resultados relativamente precisos, en algunos casos es difícil (y a veces imposible) obtener una idea clara de la física involucrada en el problema.

Cuando se utiliza la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ toda la información de la acción sobre una partícula simple, de parte del resto de las partículas (potencial efectivo) del cristal, queda contenida en el tensor de masa efectiva, lo que lo hace uno de los métodos más simples y poderosos para el cálculo del espectro de bandas de los portadores de carga (y su correspondiente función de onda) alrededor de un punto de alta simetría en el espacio recíproco. El hecho de que muchos semiconductores posean *gap* directo y de que las propiedades físicas de mayor interés ocurren cerca de los bordes de banda y de los puntos de alta simetría del espacio recíproco, vuelve al modelo muy apropiado, particularmente para el estudio de propiedades electrónicas y ópticas. Una de las cualidades más importantes de este método es que permite la obtención de expresiones analíticas, por ejemplo, para las masas efectivas, los

factores g de Landé y las relaciones de dispersión cerca de los puntos críticos (máximos o mínimos) del esquema de bandas. La teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ puede incorporar y tratar de forma relativamente sencilla los efectos de acoplamiento espín-órbita, interacciones de intercambio, estados de impurezas, esfuerzos, campos magnéticos y eléctricos, etc.

La teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ fue desarrollada por Bardeen y Seitz entre 1938 y 1940. Entre los modelos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ que involucran la banda de valencia, resaltan dos por su amplia aceptación y efectividad para describir adecuadamente las excitaciones elementales en sistemas multibandas. Estos son el modelo de Kane [58] y el modelo de Kohn-Luttinger [59]. Una versión de este último —que incorpora la banda de conducción— (modelo de Pidgeon-Brown [48]) será discutido en la presente sección.

2.2.1 Modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de Pidgeon-Brown

Es posible hacer un tratamiento en el que se tomen en cuenta varias bandas de interés, por ejemplo las banda de conducción y las de valencia (huecos pesados, huecos ligeros y *split-off*), que normalmente determinan las propiedades fundamentales de un material, e incorporar el resto de las bandas de forma perturbativa. Cada una de estas bandas presenta doble degeneración debido al espín, de manera que son necesarias ocho ecuaciones, siendo la matriz correspondiente de dimensiones (8×8) . Cuando sólo se toman en cuenta las tres bandas de valencia, el modelo se conoce como modelo de Kohn-Luttinger extendido [59]. Este modelo (6×6) de tres bandas —las tres de valencia, cada una doblemente degenerada— no toma en cuenta el acoplamiento de estas con la banda de conducción, considera que los estados de huecos son independientes de los estados electrónicos, lo cual es una muy buena aproximación para semiconductores de *gap* ancho como el CdSe y el CdS. No obstante, en los casos en que se pretende tener en cuenta el acoplamiento con la banda de conducción hay que incorporarla en el modelo. Si esto último se hace siguiendo un esquema tipo Kohn-Luttinger el modelo se le conoce como Pidgeon-Brown [48,60,61]. La selección de este último está dada por el hecho de que la SOI-R en la banda de valencia es un efecto de segundo orden, por lo que intuitivamente parece sensato considerar los posibles efectos de la banda de conducción. Además, algunos resultados sug-

ieren que el acoplamiento Rashba es más fuerte en semiconductores de *gap* estrecho [11].

Comencemos por escribir la ecuación de Schrödinger, dentro de la aproximación del electrón independiente, incluyendo el término de interacción espín-órbita (término de Pauli)

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}) \times \boldsymbol{\sigma} \right] \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (8)$$

Del teorema de Bloch, la función de onda $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de dicho sistema debe ser de la forma $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \times \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función que tiene la periodicidad del potencial cristalino $V(\mathbf{r})$. Sustituyéndola en (8) se tiene

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \times \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}) \times \boldsymbol{\sigma} \right. \\ \left. + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\nabla V \times \mathbf{k}) \times \boldsymbol{\sigma} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[E_n(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (9)$$

El último término del miembro izquierdo de (9) no se tendrá en cuenta dado que es una interacción espín-órbita dependiente de \mathbf{k} , que resulta ser despreciable comparada con el resto de los términos debido a que el *momentum* $\hbar\mathbf{k}$ del cristal es muy pequeño comparado con el *momentum* \mathbf{p} en el interior del átomo, donde la mayoría de las interacciones espín-órbita ocurren.

En adición al *momentum* canónico $\hat{\mathbf{p}}$ se suele definir el *momentum* mecánico [62]

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} \equiv \frac{m_0}{i\hbar} [x, \hat{\mathbf{H}}] = \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V). \quad (10)$$

la expresión (9) que escrita de manera compacta

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \times \hat{\boldsymbol{\pi}} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[E_n(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (11)$$

El esquema de particionamiento de Löwdin [11,49] parte de un desarrollo de la función $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en dos subconjuntos de la forma

$$u_{nk}(\mathbf{r}) = \sum_{j \in A} a_j u_{j0}(\mathbf{r}) + \sum_{i \in B} a_i u_{i0}(\mathbf{r}), \quad (12)$$

donde j corre solo por las bandas de interés —la de conducción y las tres de valencia— (conjunto A) y i por el resto de las bandas que serán incorporadas perturbativamente (conjunto B). En principio, para estudiar la estructura de bandas del conjunto A sería preciso resolver el problema característico

$$\sum_n (H_{jn} - E_j \delta_{jn}) a_n = 0, \quad (13)$$

donde n corre sobre todas las bandas. Desarrollando la suma en dos términos —una para cada conjunto— y dividiendo por $(E_j - H_{jj})$ se tiene

$$a_j = \sum_{j' \neq j}^A \frac{H_{jj'}}{E_j - H_{jj}} a_{j'} + \sum_i^B \frac{H_{ji}}{E_j - H_{jj}} a_i. \quad (14)$$

El primer término incluye la interacción de la banda j -ésima con otras de conjunto A , mientras que el segundo corresponde a la interacción con el resto de las bandas que se encuentran en el conjunto B . Haciendo un procedimiento similar para las a_i se tiene

$$a_i = \sum_j^A \frac{H_{ij}}{E_j - H_{ii}} a_j + \sum_{i' \neq i}^B \frac{H_{ii'}}{E_j - H_{ii}} a_{i'}. \quad (15)$$

El término $H_{ii'}$ de (15), que representa las interacciones entre las bandas del conjunto B que no son de interés, pueden ser no considerado. Con esta aproximación, sustituyendo (15) en (14) se tiene

$$a_j = \sum_{j'}^A \frac{U_{jj'} - H_{jj'} \delta_{jj'}}{E_j - H_{jj}} a_{j'}, \quad (16)$$

donde

$$U_{jj'} = H_{jj'} + \sum_i^B \frac{H_{ji} H_{ij'}}{E_j - H_{ii}}. \quad (17)$$

Ahora el problema característico (13) se reduce a

$$\sum_{j'}^A (U_{jj'} - E_j \delta_{jj'}) a_{j'} = 0. \quad (18)$$

Nótese que, si bien la expresión (18) está referida a las bandas contenidas en el conjunto A , cada elemento $U_{jj'}$ contiene la contribución de las bandas remotas agrupadas en el conjunto B . Los pasos tomados de (12) a (18) constituyen un desarrollo relativamente sencillo —un caso particular— de la teoría Löwdin, esta última será descrita en detalle en la Sec. 2.3. En la expresión (17) se tiene

$$\begin{aligned} H_{jj'} &= \langle u_{j0} | \hat{\mathbf{H}} | u_{j'0} \rangle = \left[E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \langle u_{j0} | u_{j'0} \rangle = \\ &= \left[E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'}, \quad j, j' \in A, \end{aligned} \quad (19)$$

mientras que

$$\begin{aligned} H_{ji} &= \langle u_{j0} | \hat{\mathbf{H}} | u_{i0} \rangle = \langle u_{j0} | \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \times \hat{\boldsymbol{\pi}} | u_{i0} \rangle = \sum_{\alpha} \frac{\hbar k_{\alpha}}{m_0} \pi_{ji}^{\alpha}, \\ & \quad j \in A, i \in B, \alpha \in \{x, y, z\}. \end{aligned} \quad (20)$$

Sustituyendo (19) y (20) en (17), y dado que $H_{ii} = E_i$, se tiene

$$U_{jj'} = \left[E_j(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_i^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_{\alpha} k_{\beta} \pi_{ji}^{\alpha} \pi_{i'j'}^{\beta}}{E_j - E_i}, \quad (21)$$

donde el último término corresponde a una sumatoria doble por α y β , con $\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$. Nótese además que E_i corresponde a la energía de las bandas del conjunto B , luego la diferencia $E_j - E_i$ nunca es cero. Si se introduce la definición $D_{jj'} \equiv U_{jj'}$, la expresión (21) se transforma en

$$D_{jj'} = E_j(0) \delta_{jj'} + \sum_{\alpha, \beta} D_{jj'}^{\alpha\beta} k_{\alpha} k_{\beta}, \quad (22)$$

donde

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta} + \sum_i^B \frac{\pi_{ji}^{\alpha} \pi_{i'j'}^{\beta} + \pi_{ji}^{\beta} \pi_{i'j'}^{\alpha}}{m_0(E_j - E_i)} \right]. \quad (23)$$

En la literatura especializada a $D_{jj'}$ se le conoce como tensor de masa efectiva.

El paso siguiente es escoger un conjunto de funciones base apropiado. En nuestro caso, resultó ser más conveniente la base de Bir y Pikus [60,63]

$$\begin{aligned}
u_{1,0}^C &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = |S \uparrow\rangle \\
u_{2,0}^C &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = |S \downarrow\rangle \\
u_{3,0}^{HH} &= \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\
u_{4,0}^{LH} &= \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow\rangle \\
u_{5,0}^{LH} &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow\rangle \\
u_{6,0}^{HH} &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\
u_{7,0}^{SO} &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow + Z \uparrow\rangle \\
u_{8,0}^{SO} &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{3}} |-(X + iY) \uparrow + Z \downarrow\rangle
\end{aligned} \tag{24}$$

la banda de conducción se ha etiquetado como C , y las de valencia: huecos pesados HH , huecos ligeros LH y split-off SO . Se ha incluido además la notación $|j, m\rangle$. Estas funciones, en los bordes de las bandas ($\mathbf{k} = 0$), satisfacen

$$H(\mathbf{k} = 0)u_{j,0}(\mathbf{r}) = E_j(0)u_{j,0}(\mathbf{r}), \tag{25}$$

donde

$$E_j(0) = \begin{cases} E_g & j = 1, 2 \\ 0 & j = 3, 4, 5, 6 \\ -\Delta & j = 7, 8 \end{cases} \tag{26}$$

Para llegar a la forma explícita del tensor de masa efectiva (22), definamos los siguientes parámetros

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_i^B \frac{\pi_{Xi}^x \pi_{iX}^x}{E_j - E_i} \\
\mathcal{B} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_i^B \frac{\pi_{Yi}^y \pi_{iY}^y}{E_j - E_i} \\
\mathcal{C} &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_i^B \frac{\pi_{Xi}^x \pi_{iY}^y + \pi_{Yi}^y \pi_{iX}^x}{E_j - E_i}.
\end{aligned} \tag{27}$$

A partir de estos se pueden definir —y se determinan experimentalmente— los parámetros de Luttinger $\gamma_1^L, \gamma_2^L, \gamma_3^L$ de la siguiente manera

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1^L &= \frac{1}{3} (\mathcal{A} + 2\mathcal{B}) \\
-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2^L &= \frac{1}{6} (\mathcal{A} - \mathcal{B}) \\
-\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3^L &= \frac{\mathcal{C}}{6}.
\end{aligned} \tag{28}$$

En la literatura existen dos variantes habituales respecto de la selección de los parámetros de Luttinger [64]

- Aproximación esférica: considera $\gamma_2^L, \gamma_3^L \rightarrow \gamma_s^L$, donde $\gamma_s^L = (2\gamma_2^L + 3\gamma_3^L)/5$. Es válida para semiconductores III-V cuando γ_2^L y γ_3^L están muy próximos en magnitud.
- Aproximación axial: $\gamma_1^L \neq \gamma_2^L \neq \gamma_3^L$, tal como fueron definidas en (28).

La aproximación esférica ha sido seleccionada en tanto no se está interesado en los efectos de la anisotropía. Los parámetros de Luttinger (28), en sus dos aproximaciones, son utilizados para construir el tensor de masa efectiva en los modelos Kohn-Luttinger a cuatro y seis bandas. Para el modelo de Pidgeon-Brown en aproximación esférica, que incluye además la banda de conducción, estos se redefinen como [60]

$$\gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{E_p}{3E_g} \quad \gamma_s = \gamma_s^L - \frac{E_p}{6E_g}, \tag{29}$$

donde E_p es también un parámetro experimental, ligado con el parámetro de Kane $V = \frac{-i\hbar}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle$ a través de $E_p = \frac{2m_0}{\hbar^2} V^2$.

Teniendo en cuenta las propiedades de la base escogida (24), y los parámetros de Luttinger apropiados (29), el hamiltoniano del modelo Pidgeon-Brown \hat{H}_{PB} en aproximación esférica toma la forma

$$\hat{H}_{PB} = \begin{bmatrix} E_g + \frac{\alpha}{2m_0} p^2 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} V p_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} V p_z & \frac{i}{\sqrt{6}} V p_- & 0 & \frac{i}{\sqrt{3}} V p_z & \frac{1}{\sqrt{3}} V p_- \\ 0 & E_g + \frac{\alpha}{2m_0} p^2 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} V p_+ & i\sqrt{\frac{2}{3}} V p_z & -\frac{1}{\sqrt{2}} V p_- & \frac{i}{\sqrt{3}} V p_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} V p_z \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} V p_- & 0 & -(P+Q) & -L & -M & 0 & -i\sqrt{\frac{1}{2}} L & i\sqrt{2} M \\ \sqrt{\frac{2}{3}} V p_z & -\frac{1}{\sqrt{6}} V p_- & -L^* & -(P-Q) & 0 & -M & i\sqrt{2} Q & -i\sqrt{\frac{3}{2}} L \\ -\frac{i}{\sqrt{6}} V p_+ & -i\sqrt{\frac{2}{3}} V p_z & -M^* & 0 & -(P-Q) & L & i\sqrt{\frac{3}{2}} L^* & i\sqrt{2} Q \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} V p_+ & 0 & -M^* & L^* & -(P+Q) & i\sqrt{2} M^* & i\sqrt{\frac{1}{2}} L^* \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} V p_z & -\frac{i}{\sqrt{3}} V p_- & i\sqrt{\frac{1}{2}} L^* & -i\sqrt{2} Q & -i\sqrt{\frac{3}{2}} L & -i\sqrt{2} M & -\Delta - P & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} V p_+ & -\frac{1}{\sqrt{3}} V p_z & -i\sqrt{2} M^* & i\sqrt{\frac{3}{2}} L^* & -i\sqrt{2} Q & -i\sqrt{\frac{1}{2}} L & 0 & -\Delta - P \end{bmatrix}, \quad (30)$$

donde $p_{\pm} = p_x \pm i p_y$ y $p_{\perp}^2 = p_x^2 + p_y^2$, y las definiciones

$$\begin{aligned} P &= \frac{\gamma_1}{2m_0} p^2 & Q &= \frac{\gamma_s}{2m_0} (p_{\perp}^2 - 2p_z^2) \\ L &= \frac{-i\sqrt{3}\gamma_s}{m_0} p_z p_- & M &= \frac{\sqrt{3}\gamma_s}{2m_0} p_-^2 \end{aligned} \quad (31)$$

2.2.2 Aproximación de la Función Envolvente

En la sección anterior se mostró el desarrollo de las ideas fundamentales para construir el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de Pidgeon-Brown, que describe apropiadamente la banda de conducción y las tres bandas de valencia (HH , LH y SO) en un entorno del punto Γ de la Zona de Brillouin para el caso *bulk* (tridimensional). Sin embargo, los sistemas físicos de interés en el presente trabajo son tipo Q2D (Sec. 2.1), por lo que es preciso introducir algunas consideraciones, así como el correspondiente potencial de confinamiento (7) en el modelo. Lo anterior se hará utilizando el formalismo de la Aproximación de la Función Envolvente [65].

Considérese una heteroestructura conformada por los materiales I y II (ver Sec. 2.1), con iguales constantes de red y la misma estructura

cristalográfica. Esto se cumple con bastante buena aproximación para heteroestructuras tipo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ o $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}/\text{InP}$ [65]. En el modelo de la función envolvente se toman en cuenta las siguientes consideraciones:

- Dentro de cada capa, la función de onda es expandida en términos de la parte periódica de la función de Bloch de la capa que corresponda

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \sum_j F_j^I(\mathbf{r}) u_{j,0}^I(\mathbf{r}), & \text{si } \mathbf{r} \text{ pertenece a la capa I} \\ \sum_j F_j^{II}(\mathbf{r}) u_{j,0}^{II}(\mathbf{r}), & \text{si } \mathbf{r} \text{ pertenece a la capa II} \end{cases} \quad (32)$$

- Se supone que las partes periódicas de las función de Bloch son iguales en cada capa que constituye la heteroestructura, lo cual constituye una buena aproximación para los semiconductores III-V y II-VI [?], esto es

$$u_{j,0}^I(\mathbf{r}) \equiv u_{j,0}^{II}(\mathbf{r}), \quad (33)$$

de manera que la función de onda de la heteroestructura puede escribirse como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_j F_j^{I,II}(\mathbf{r}) u_{j,0}(\mathbf{r}). \quad (34)$$

El problema se reduce a encontrar la forma explícita de las *funciones envolventes* $F_j^{I,II}(\mathbf{r})$.

Considérese ahora que el plano $z = z_0$ corresponde a la frontera entre las capas I y II. Dado que las funciones $u_{j,0}(\mathbf{r})$ son linealmente independientes, y que $\Psi(\mathbf{r})$ debe ser continua en z_0 , se tiene

$$F_j^I(\mathbf{r}_\perp, z_0) = F_j^{II}(\mathbf{r}_\perp, z_0) \quad (35)$$

donde \mathbf{r}_\perp es un vector de posición bidimensional ubicado en el plano xy . Debido a que se consideró que las constantes de red de los materiales I y II son muy similares —o iguales—, la heteroestructura se vuelve traslacionalmente invariante en el plano xy . Luego, las funciones $F_j^{I,II}$ pueden escribirse como

$$F_j^{I,II}(\mathbf{r}_\perp, z) = e^{i\mathbf{k}_\perp \times \mathbf{r}_\perp} f_j^{I,II}(z), \quad (36)$$

donde $k_{\perp} = (k_x, k_y)$ es un vector de onda bidimensional, que no cambia en ambas capas con el fin de obedecer la invarianza traslacional en el plano xy .

El hamiltoniano que describe los estados para las heteroestructuras se obtiene incluyendo convenientemente el potencial de confinamiento $U(z)$ (7) en el problema característico obtenido para el *bulk* (18)

$$\sum_{j'}^A (U_{jj'} - [E_j + U(z) + W(x)] \delta_{jj'}) f_{j'} = 0, \quad (37)$$

donde se incluyeron ambos potenciales para describir el caso más general.

Un desarrollo similar a lo descrito en la sección anterior (Sec. 2.2.1), permite obtener el modelo de Pidgeon-Brown en aproximación esférica para el caso Q2D \hat{H}_{PB}^{Q2D}

$$\hat{H}_{PB}^{Q2D} = \hat{H}_{PB} + U(z), \quad (38)$$

donde es preciso redefinir los parámetros (31) de \hat{H}_{PB} (30) como

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2 \gamma_1}{2m_0} \left(k_{\perp}^2 - \frac{d^2}{dz^2} \right), \quad Q = \frac{\hbar^2 \gamma_s}{2m_0} \left(k_{\perp}^2 + 2 \frac{d^2}{dz^2} \right), \\ L &= \frac{-\sqrt{3} \hbar^2 \gamma_s}{m_0} k_{\perp} \frac{d}{dz}, \quad M = \frac{\sqrt{3} \hbar^2 \gamma_s}{2m_0} k_{\perp}^2, \end{aligned} \quad (39)$$

teniendo en cuenta que el *cuasimomentum* ahora sería un vector-operador de la forma $\hat{\mathbf{k}} = (k_x, k_y, -i \frac{\partial}{\partial z})$.

2.3 Esquema de particionamiento de Löwdin

La teoría de perturbaciones para estados degenerados de Löwdin (particionamiento de Löwdin) [11,49] es un método general y eficaz para la diagonalización aproximada de hamiltonianos independientes del tiempo, en particular los hamiltonianos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ multibandas. Supongamos que tenemos cierto hamiltoniano \hat{H} que se puede separar en dos partes: (i) un hamiltoniano \hat{H}_0 con autovalores E_n y autofunciones $|\psi_n\rangle$ conocidos, y (ii) un hamiltoniano \hat{H}' que será tratado como una

perturbación

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'. \quad (40)$$

Supóngase que el conjunto $\{|\psi_n\rangle\}$ puede dividirse en dos subconjuntos A y B débilmente interactuantes. Este caso particular de la teoría de perturbaciones se basa en que es posible construir un operador unitario e^{-S} tal que para el hamiltoniano transformado

$$\hat{\mathcal{H}} = e^{-S}\hat{H}e^{-S}, \quad (41)$$

se cumpla que los elementos matriciales $\langle\psi_m|\hat{\mathcal{H}}|\psi_l\rangle$ —entre los estados $|\psi_m\rangle$ del conjunto A y los estados $|\psi_l\rangle$ del conjunto B — decaigan a cero a partir de cierto orden de \hat{H}' . Un esquema de este proceso se muestra en la Fig. 5.

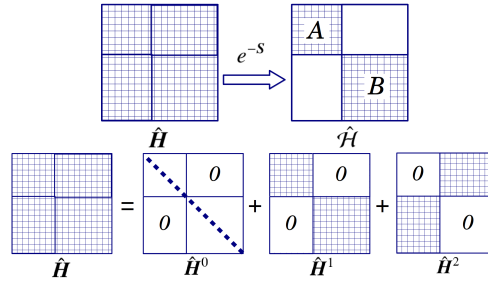


Fig. 5 Arriba: esquema del desacople entre los estados del conjunto A y los del conjunto B . Debajo: representación del hamiltoniano en una suma de términos.

Comencemos por escribir \hat{H} como

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' = \hat{H}^0 + \hat{H}^1 + \hat{H}^2, \quad (42)$$

donde \hat{H}^1 tiene elementos matriciales distintos de cero solo para las autofunciones $|\psi_n\rangle$ en los conjuntos A y B , mientras que \hat{H}^2 tiene elementos matriciales distintos de cero entre los conjuntos A y B , como se muestra en la Fig. 5. La tarea consiste entonces en construir S tal que la transformación (41) convierta \hat{H}^2 en una matriz diagonal por bloques, similar a \hat{H}^1 , a la vez que deje invariable $\hat{H}^0 + \hat{H}^1$.

Con el propósito de determinar el operador S , es necesario expandir e^S en la serie

$$e^S = 1 + S + \frac{1}{2!}S^2 + \frac{1}{3!}S^3 \dots \quad (43)$$

y construir \mathbf{S} por aproximaciones sucesivas.

Sustituyendo (43) en (41), y teniendo en cuenta que \mathbf{S} debe ser no hermítica ($\mathbf{S}^\dagger = -\mathbf{S}$), es posible derivar ecuaciones para las aproximaciones sucesivas $\mathbf{S}^{(j)}$ a \mathbf{S}

$$\begin{aligned} [\hat{H}^0, \mathbf{S}^{(1)}] &= -\hat{H}^2 \\ [\hat{H}^0, \mathbf{S}^{(2)}] &= -[\hat{H}^1, \mathbf{S}^{(1)}] \\ [\hat{H}^0, \mathbf{S}^{(3)}] &= -[\hat{H}^1, \mathbf{S}^{(2)}] - \frac{1}{3} [[\hat{H}^2, \mathbf{S}^{(1)}], \mathbf{S}^{(1)}] \\ &\dots = \dots \end{aligned} \quad (44)$$

y, finalmente, las ecuaciones deseadas para las aproximaciones sucesivas a $\hat{\mathcal{H}}$

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(2)} + \dots, \quad (45)$$

donde las $\hat{H}^{(j)}$ vienen dadas por

$$H_{mm'}^{(0)} = H_{mm'}^0, \quad (46)$$

$$H_{mm'}^{(1)} = H'_{mm'}, \quad (47)$$

$$H_{mm'}^{(2)} = \frac{1}{2} \sum_l H'_{ml} H'_{lm'} \left[\frac{1}{E_m - E_l} + \frac{1}{E'_m - E_l} \right], \quad (48)$$

$$\begin{aligned} H_{mm'}^{(3)} &= -\frac{1}{2} \sum_{l, m''} \left[\frac{H'_{ml} H'_{lm''} H'_{m''m'}}{(E'_m - E_l)(E''_m - E_l)} + \frac{H'_{mm''} H'_{m''l} H'_{lm'}}{(E_m - E_l)(E''_m - E_l)} \right], \quad (49) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{l, l'} H'_{ml} H'_{ll'} H'_{l'm'} \left[\frac{1}{(E_m - E_l)(E_m - E'_l)} + \frac{1}{(E'_m - E_l)(E'_m - E'_l)} \right], \quad (50) \\ &\dots = \dots \end{aligned}$$

Nótese que todos los denominadores de (46)-(50)..., corresponden a pares de estados que están en conjuntos diferentes. Por tanto, a diferencia de la teoría de perturbaciones estacionaria convencional, el desarrollo (45)-(46)-(50)..., puede aplicarse a sistemas donde los

estados de interés —conjunto A — pueden ser degenerados exacta o aproximadamente.

2.4 Hamiltoniano efectivo para huecos pesados en el caso quasi-bi-dimensional

Con el propósito de extraer del hamiltoniano (38) un hamiltoniano efectivo solo para huecos pesados, que incorpore los efectos del resto de las bandas (electrones, huecos ligeros y *split-off*) perturbativamente, se hará uso nuevamente del esquema de particionamiento de Löwdin [11,49] hasta el segundo orden, cuyas propiedades generales se discutieron en la sección anterior (Sec. 2.3)

El primer paso es resolver exactamente la parte diagonal $\hat{H}_{PB}^{Q2D(0)}$, que contiene los términos de energía cinética y los potenciales de confinamiento, esto es

$$\hat{H}_{PB}^{Q2D(0)} \varphi_n(z) = E_n \varphi_n(z), \quad (51)$$

que corresponde a ocho ecuaciones desacopladas —dos iguales para cada banda considerada— de la forma

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} - eFz + E \right] \varphi_n(z) = 0, \quad (52)$$

donde m^* cambia en dependencia de la banda que se esté considerando. Esto es

$$\begin{array}{l} \text{Banda de conducción} \\ \text{Banda de huecos pesados} \\ \text{Banda de huecos ligeros} \\ \text{Banda } split\text{-off} \end{array} \left| \begin{array}{l} m^* = m_e^*, \\ m^* = m_{hh}^* = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_s), \\ m^* = m_{lh}^* = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma_s), \\ m^* = m_{so}^* = m_0/(\gamma_1). \end{array} \right. \quad (53)$$

El procedimiento para resolver (52) es conocido [66]. Corresponde al problema unidimensional de Schrödinger en presencia de un potencial triangular. Las soluciones para cada subbanda son de la forma [40]

$$\varphi_n^e(z) = \sqrt{\left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\mathcal{A}_i'^2(-c_n)}} \mathcal{A}_i \left(\left(\frac{2m_e^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \left(z - c_n \left(\frac{\hbar^2 eF}{2m_e^*}\right)^{\frac{1}{3}}\right) \right), \quad (54)$$

$$\varphi_n^{hh}(z) = \sqrt{\left(\frac{2m_{hh}^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\mathcal{A}_i'^2(-c_n)}} \mathcal{A}_i \left(\left(\frac{2m_{hh}^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \left(z - c_n \left(\frac{\hbar^2 eF}{2m_{hh}^*}\right)^{\frac{1}{3}}\right) \right), \quad (55)$$

$$\varphi_n^{lh}(z) = \sqrt{\left(\frac{2m_{lh}^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\mathcal{A}_i'^2(-c_n)}} \mathcal{A}_i \left(\left(\frac{2m_{lh}^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \left(z - c_n \left(\frac{\hbar^2 eF}{2m_{lh}^*}\right)^{\frac{1}{3}}\right) \right), \quad (56)$$

$$\varphi_n^{so}(z) = \sqrt{\left(\frac{2m_{so}^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{1}{\mathcal{A}_i'^2(-c_n)}} \mathcal{A}_i \left(\left(\frac{2m_{so}^*}{\hbar^2 eF}\right)^{\frac{1}{3}} \left(z - c_n \left(\frac{\hbar^2 eF}{2m_{so}^*}\right)^{\frac{1}{3}}\right) \right), \quad (57)$$

debidamente normalizadas. \mathcal{A}_i es una de las funciones de Airy (la otra \mathcal{B}_i diverge en el ∞), siendo $c_n = 2.338, 4.088, 5.521, \dots$ sus ceros.

Asimismo, para las autoenergías correspondientes a las autofunciones (54)-(57) se tiene

$$E_n^e = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} k_{\perp}^2 - c_n \left(\frac{(\hbar eF)^2}{2m_e^*}\right)^{\frac{1}{3}} - E_g, \quad (58)$$

$$E_n^{hh} = \frac{\hbar^2}{2m_{hh}^*} k_{\perp}^2 + c_n \left(\frac{(\hbar eF)^2}{2m_{hh}^*}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (59)$$

$$E_n^{lh} = \frac{\hbar^2}{2m_{lh}^*} k_{\perp}^2 + c_n \left(\frac{(\hbar eF)^2}{2m_{lh}^*}\right)^{\frac{1}{3}}, \quad (60)$$

$$E_n^{so} = \frac{\hbar^2}{2m_{so}^*} k_{\perp}^2 + c_n \left(\frac{(\hbar eF)^2}{2m_{so}^*}\right)^{\frac{1}{3}} + \Delta. \quad (61)$$

Nótese que energía de los huecos se ha tomado positiva por comodidad.

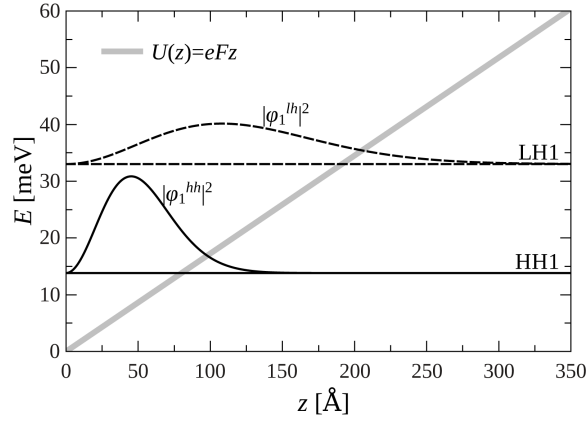


Fig. 6 Primera subbanda de huecos pesados E_1^{hh} (HH1 en línea continua) y primera subbanda de huecos ligeros E_1^{lh} (LH1 en línea discontinua) para el GaAs. Se incluye además la correspondiente densidad de probabilidad en cada caso: $|\varphi_n^{hh}|^2$ en línea continua, y $|\varphi_n^{lh}|^2$ en línea discontinua. Las líneas gruesas representan el pozo triangular infinito (7), que modela el potencial de confinamiento, para una $N_s = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

En la Fig. 6 se ha representado la primera subbanda de huecos pesados E_1^{hh} (HH1 en línea continua) y la primera subbanda de huecos ligeros E_1^{lh} (LH1 en línea discontinua) para el GaAs. Se incluye además la correspondiente densidad de probabilidad en cada caso: $|\varphi_n^{hh}|^2$ en línea continua, y $|\varphi_n^{lh}|^2$ en línea discontinua, ambas escaladas arbitrariamente en la dirección vertical. Asimismo, en líneas gruesas se representó el pozo triangular infinito (7), que modela el potencial de confinamiento, para una densidad superficial de carga $N_s = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. La longitud de confinamiento del primer estado de huecos pesados es ≈ 15 nm, lo cual coincide con resultados obtenidos a partir de cálculos autoconsistentes en la aproximación de Hartree para el mismo valor de N_s en GaAs [30]. Luego, al menos para la primera subbanda de huecos pesados, la aproximación de pozo triangular infinito (7) resulta bastante buena.

La perturbación de primer orden (47) es nula, lo que se puede notar por simple inspección del hamiltoniano (30): los términos que acoplan los huecos pesados con diferente espín son nulos, o sea existe degeneración por el espín. Por otro lado, la parte diagonal fue resuelta exactamente (54)-(61), incluyendo el campo eléctrico. Lo anterior constituye una de las diferencias fundamentales respecto a modelos anteriores [34], donde el campo eléctrico —que es el ingrediente

fundamental en el acoplamiento Rashba— se considera perturbativamente.

La perturbación de segundo orden (48), sin embargo, resulta

$$\hat{H}_{PB}^{Q2D(2)} = \begin{bmatrix} H_{33}^{Q2D(2)} & H_{36}^{Q2D(2)} \\ H_{63}^{Q2D(2)} & H_{66}^{Q2D(2)} \end{bmatrix}, \quad (62)$$

donde los elementos matriciales —luego de un álgebra laboriosa pero relativamente sencilla— tienen la forma

$$\begin{aligned} H_{33}^{Q2D(2)} = H_{66}^{Q2D(2)} &= \frac{\hbar^2 V^2 k_{\perp}^2}{2(E_n^{hh} - E_n^e)} \langle \varphi_n^{hh} | \varphi_n^e \rangle \langle \varphi_n^e | \varphi_n^{hh} \rangle \\ &+ \frac{\langle \varphi_n^{hh} | L | \varphi_n^{lh} \rangle \langle \varphi_n^{lh} | L^* | \varphi_n^{hh} \rangle + \langle \varphi_n^{hh} | M | \varphi_n^{lh} \rangle \langle \varphi_n^{lh} | M^* | \varphi_n^{hh} \rangle}{E_n^{hh} - E_n^{lh}} \\ &+ \frac{\langle \varphi_n^{hh} | L | \varphi_n^{so} \rangle \langle \varphi_n^{so} | L^* | \varphi_n^{hh} \rangle + 4 \langle \varphi_n^{hh} | M | \varphi_n^{so} \rangle \langle \varphi_n^{so} | M^* | \varphi_n^{hh} \rangle}{2(E_n^{hh} - E_n^{so})}, \end{aligned} \quad (63)$$

$$\begin{aligned} H_{36}^{Q2D(2)} &= \frac{\langle \varphi_n^{hh} | L | \varphi_n^{lh} \rangle \langle \varphi_n^{lh} | M | \varphi_n^{hh} \rangle - \langle \varphi_n^{hh} | M | \varphi_n^{lh} \rangle \langle \varphi_n^{lh} | L | \varphi_n^{hh} \rangle}{E_n^{hh} - E_n^{lh}} \\ &+ \frac{\langle \varphi_n^{hh} | M | \varphi_n^{so} \rangle \langle \varphi_n^{so} | L | \varphi_n^{hh} \rangle - \langle \varphi_n^{hh} | L | \varphi_n^{so} \rangle \langle \varphi_n^{so} | M | \varphi_n^{hh} \rangle}{E_n^{hh} - E_n^{so}}, \end{aligned} \quad (64)$$

$$\begin{aligned} H_{63}^{Q2D(2)} &= \frac{\langle \varphi_n^{hh} | L^* | \varphi_n^{lh} \rangle \langle \varphi_n^{lh} | M^* | \varphi_n^{hh} \rangle - \langle \varphi_n^{hh} | M^* | \varphi_n^{lh} \rangle \langle \varphi_n^{lh} | L^* | \varphi_n^{hh} \rangle}{E_n^{hh} - E_n^{lh}} \\ &+ \frac{\langle \varphi_n^{hh} | M^* | \varphi_n^{so} \rangle \langle \varphi_n^{so} | L^* | \varphi_n^{hh} \rangle - \langle \varphi_n^{hh} | L^* | \varphi_n^{so} \rangle \langle \varphi_n^{so} | M^* | \varphi_n^{hh} \rangle}{E_n^{hh} - E_n^{so}}. \end{aligned} \quad (65)$$

Nótese que los elementos (64) y (65) no son cero dado que $\langle \varphi^1 | \hat{k}_z | \varphi^2 \rangle = -\langle \varphi^2 | \hat{k}_z | \varphi^1 \rangle$.

El hamiltoniano efectivo que describe los estados de huecos pesados en un sistema Q2D, construido hasta el segundo orden de perturbación

$$\hat{H}^{hh-Q2D} = \hat{H}_{PB}^{Q2D(0)} + \hat{H}_{PB}^{Q2D(1)} + \hat{H}_{PB}^{Q2D(2)}, \quad (66)$$

teniendo en cuenta la forma de los parámetros L y M para el caso Q2D (39) e incluyendo las definiciones⁴ $I_n^{hl/hs/he} = \langle \varphi_n^{hh} | \varphi_n^{lh/so/e} \rangle$ y $Z_n^{hl/hs/he} = \langle \varphi_n^{hh} | \hat{k}_z | \varphi_n^{lh/so/e} \rangle$, tiene la forma

$$\begin{aligned} \hat{H}_n^{hh-Q2D} &= \hat{H}_0^{hh-Q2D} + \hat{H}_{SOI-R}^{hh-Q2D} = \\ &= \left[\frac{\hbar^2 \hat{k}_\perp^2}{2m_n^{*hh-Q2D}} + E_n^{hh} \right] \mathbf{I}_2 + \beta_n^{hh-Q2D} (\sigma_+ \hat{k}_-^3 + \sigma_- \hat{k}_+^3). \end{aligned} \quad (67)$$

Hay que destacar que se ha incluido el subíndice n en \hat{H}_n^{hh-Q2D} , dado que los dos términos cambian según la subbanda E_n^{hh} que se esté considerando.

El primer término \hat{H}_0^{hh-Q2D} corresponde a la energía cinética. Los efectos del resto de las bandas se encuentran contenidos en la masa efectiva $m_n^{*hh-Q2D}$ obtenida —que es diferente al caso *bulk*—

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_n^{*hh-Q2D}} &= \\ \frac{1}{m_0} &\left[\gamma_1 + \gamma_s + \frac{3\hbar^2 \gamma_s^2}{m_0} \left(\frac{2(Z_n^{hl})^2}{E_n^{hh} - E_n^{lh}} + \frac{(Z_n^{hs})^2}{E_n^{hh} - E_n^{so}} \right) - \frac{m_0 V^2 (I_n^{he})^2}{E_n^{hh} - E_n^e} \right], \end{aligned} \quad (68)$$

donde se han despreciado términos no lineales, de orden superior que k_\perp^2 .

Debe notarse que: (i) si no se considera la banda de valencia ($E^e \rightarrow \infty$), y (ii) el potencial de confinamiento fuese simétrico ($Z_n^{hh/hl/hs} = 0$), o sea un pozo cuadrado, se recupera el resultado conocido de Hensel y Feher [67] para la masa efectiva transversal⁵ —perpendicular a la dirección de crecimiento— $\frac{1}{m_{hh}^*} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 + \gamma_s)$. Este resultado se utiliza en ocasiones [68], cuando se estudian las propiedades de transporte transversal de huecos en heteroestructuras. Esto último puede ser contraproducente, o sea considerando la aproximación de pozo

⁴ Integrales de las autofunciones (54)-(57)

⁵ El resultado original de Hensel y Feher es a partir de un modelo Kohn-Luttinger (4×4) en aproximación axial, esto es $\frac{1}{m_{hh}^*} = \frac{1}{m_0} (\gamma_1 + \gamma_2)$.

triangular (7) para el potencial de confinamiento de una heteroestructura, la forma obtenida para la masa efectiva (68) predice un valor mucho menor para varios de los semiconductores analizados, cerca de un 50% respecto la aproximación de Hensel y Feher, tal como se muestra en la Tabla 1.

	$\frac{m_{hh}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_l^l + \gamma_s^l}$ según Ref. [67]	$\frac{m_{hh}^*}{m_0}$ a partir de la Exp. (68)
GaAs	0.1046	0.0469
InP	0.1433	0.0615
GaSb	0.0530	0.0241
InAs	0.0346	0.0150
InSb	0.0196	0.0081

Table 1 Comparación entre la masa efectiva transversal de los huecos pesados confinados en un pozo rectangular $\frac{m_{hh}^*}{m_0} = \frac{1}{\gamma_l^l + \gamma_s^l}$ [67], y la masa efectiva transversal para la primera subbanda de huecos pesados confinados en una heteroestructura a partir de la Exp. (68), para varios semiconductores. En este último caso se escogió la densidad de carga superficial $N_s = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. No obstante, los cambios para otros valores de N_s no son considerables; apenas un 2% para el GaAs cuando N_s va de 10^{10} cm^{-2} a 10^{12} cm^{-2} .

2.4.1 Modelo de Rashba para el caso *quasi*-bidimensional

El segundo término de (67)

$$\hat{H}_{SOI-R}^{hh-Q2D} = \beta_n^{hh-Q2D} (\sigma_+ \hat{k}_-^3 + \sigma_- \hat{k}_+^3), \quad (69)$$

que acopla los huecos pesados con diferente polarización del espín, se identifica con el término de Rashba. De hecho tiene la misma forma que los modelos reportados en la literatura (Exp. (4)) [11,31,33,34], obtenidos a partir de consideraciones de simetría.

Sin embargo, uno de los aportes fundamentales del presente trabajo resulta ser la forma del parámetro de acoplamiento

$$\beta_n^{hh-QD2} = \frac{-3i\hbar^4 \gamma_s^2}{m_0^2} \left(\frac{I_n^{hl} Z_n^{hl}}{E_n^{hh} - E_n^{lh}} - \frac{I_n^{hs} Z_n^{hs}}{E_n^{hh} - E_n^{so}} \right). \quad (70)$$

Este es el factor que pre-multiplica la parte k -dependiente de (69), luego de ser extraída de los elementos matriciales (64) y (65).

A pesar de que aparece explícitamente la unidad imaginaria i , β_n^{hh-Q2D} es real dado que $Z_n^{hl/hs} \in \mathbb{C}$, lo cual garantiza las propiedades de hermiticidad del hamiltoniano (69). Por otro lado, las propiedades de la banda de conducción no figuran en la forma de β_n^{hh-Q2D} —al menos hasta el segundo orden de perturbaciones—, sólo implícitamente a través de γ_s (29). Lo anterior no ocurre en el parámetro de acoplamiento en el caso electrónico [55], que sí depende explícitamente de las propiedades de la banda de valencia.

Las correcciones del tercer orden de perturbaciones, estudiadas en un sistema de huecos pesados Q2D confinado en la interfaz p-Al_xGa_{1-x}As/GaAs, sólo contribuyen en un 0.2 %. En este caso, además de la dependencia de las propiedades de la banda de conducción, aparecen otros términos de orden superior diferentes de (69), también predichos por argumentos de simetría [11].

En la expresión (70) se puede observar que β_n^{hh-Q2D} depende inversamente de la separación entre las subbandas de huecos pesados (E_n^{hh}) y las de huecos ligeros (E_n^{lh}) o split-off (E_n^{so}). Esta separación aumenta con la fortaleza del campo eléctrico F que confina a los portadores, o con la concentración N_s en nuestra aproximación (7). Por otro lado, si se analiza el término de acoplamiento espín-órbita de Pauli (tercer término del miembro izquierdo en la Exp. (8)), la fortaleza aumenta con el gradiente de potencial. Lo anterior ha llevado a etiquetar el comportamiento del acoplamiento Rashba para huecos pesados como “desdoblamiento anómalo del espín” [11,33] y más recientemente, como “efecto Rashba con diferencial negativo” [34]. La expresión obtenida para β_n^{hh-Q2D} permite entender por qué sucede esto⁶.

Con el propósito de validar nuestro modelo, en la Fig. 7 mostramos una comparación de varias mediciones experimentales con distintos modelos teóricos, incluido el nuestro. Con línea continua se muestra un cálculo del parámetro de acoplamiento Rashba para la primera subbanda de huecos pesados β_1^{hh-Q2D} —dividido por $\mu = \hbar^2/2m_{hh-Q2D}^*$ que en realidad es lo que se puede medir— como función de la densidad de portadores N_s , a partir de la expresión (70).

⁶ Más adelante se mostrará que el comportamiento “anómalo” aparece sólo en el rango de las densidades bajas, en dependencia de las propiedades de la capa semiconductor que contiene al gas Q2D.

Se incluyen resultados experimentales reportados por diferentes autores (■ Ref. [33], ▲ Ref. [45], ○ Ref. [46], y ▽ Ref. [47] en la Fig. 7), de muestras del tipo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, con diferentes valores de x e impurezas aceptoras. Proponer una comparación con el modelo obtenido es válido, en tanto la expresión (70) es “transparente” a todo lo que ocurra fuera de la región donde se forma el gas Q2D, o sea sólo depende de los parámetros de la capa de GaAs. En los casos de las referencias [45-47], fueron tomados los reportes de las mediciones de concentración de portadores con diferente polarización del espín (N_s^+, N_s^-), y se utilizó una expresión que las relaciona con β_1 [11,33]

$$\frac{\beta_1}{\mu} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{N_s(\tilde{N}_s^+ - \tilde{N}_s^-) + \Delta N(\tilde{N}_s^+ + \tilde{N}_s^-)}{6N_s^2 + 2\Delta N_s^2}, \quad (71)$$

con $\tilde{N}_s^\pm = \sqrt{N_s \pm \Delta N_s}$. El modelo presentado (ver Exp. (70)) reproduce muy bien el comportamiento experimental. Nótese que, en el rango de densidades entre 10^{10} cm^{-2} y $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, la curva obtenida pasa por las zonas de incertidumbre de prácticamente todos los puntos experimentales. Por otro lado, en el rango entre $20 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $40 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, se reproduce mejor el orden de magnitud de las medidas experimentales que la tendencia de estas.

Se incluye además, en líneas discontinuas, el resultado de un modelo analítico reportado por Habib y Winkler en 2009 [34]

$$\beta_1^{HW} = \frac{64}{9\pi^2} \gamma_3(\gamma_2 + \gamma_3) \frac{e\hbar^4 F}{m_0^2} \left(\frac{1}{E_1^{hh} - E_1^{lh}} \left(\frac{1}{E_1^{hh} - E_2^{lh}} - \frac{1}{E_1^{hh} - E_2^{hh}} \right) + \frac{1}{(E_1^{hh} - E_2^{lh})(E_1^{hh} - E_2^{hh})} \right). \quad (72)$$

Ambos modelos —(70) y (72)— fueron obtenidos a partir del esquema de particionamiento de Löwdin (Sec. 2.3). Las diferencias fundamentales entre ellos se han recogido en la Tabla 2. Tales diferencias, son las que llevan a la poca coincidencia de las curvas teóricas en la Fig. 7.

Finalmente, en círculos unidos (-●- en la Fig. 7), se ha representado un resultado numérico [33], obtenido a partir de un esquema realista de cálculo autoconsistente de subbandas en heteroestructuras basado en el método de las cuadraturas [69]. Este caso, representa

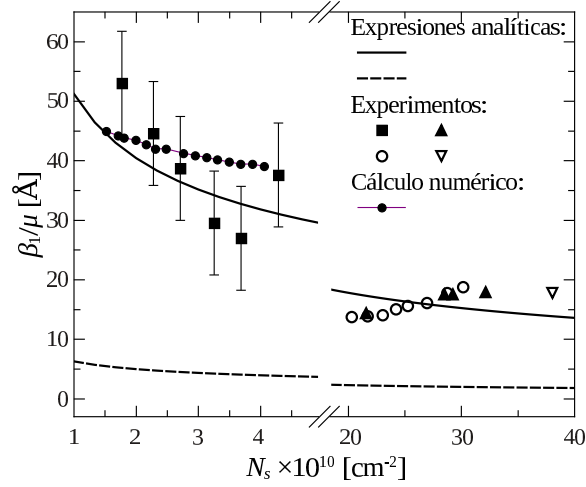


Fig. 7 En líneas continuas se muestra un cálculo del parámetro de acoplamiento Rashba β_n^{hh-QD2}/μ , donde $\mu = \hbar^2/2m_{hh-QD2}^*$, a partir de las expresiones obtenidas (68) y (70). En líneas discontinuas se muestra el resultado de una expresión analítica obtenida en la Ref. [34]. En símbolos \bullet se ha representado un resultado numérico [33], obtenido a partir de un esquema realista de cálculo autoconsistente de subbandas en heteroestructuras basado en el método de las cuadraturas. Se incluyen además, resultados experimentales de varios autores: \blacksquare Ref. [33], \blacktriangle Ref. [45], \circ Ref. [46], y ∇ Ref. [47].

un ajuste muy satisfactorio parcial a escala local, como se observa en la región entre $2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Por el contrario, en la región entre $3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $4 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, la predicción numérica se separa sensiblemente del experimento. Globalmente, esta simulación numérica no reproduce de manera satisfactoria la tendencia de los puntos experimentales en el rango entre $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ y $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Lo anterior contrasta con la curva (70), la cual local y globalmente, replica mucho mejor el experimento en el mencionado rango.

En la Fig. 8 se muestran cálculos de β_1^{hh-QD2} en el rango típico de densidades superficiales de carga ($N_s \in (10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-2})$) reportadas en la literatura, donde por lo general sólo está ocupada la primera subbanda de huecos pesados [30,33,68]. Dada la flexibilidad del modelo de Pidgeon-Brown, es posible incluir cálculos para semiconductores de *gap* estrecho InSb (0.235 eV), InAs (0.417 eV), medio GaSb (0.812 eV) y ancho InP (1.4236 eV), GaAs (1.519 eV). Nótese que en todos los casos, incluso para altas densidades, es persistente la dependencia anómala de β_1^{hh-QD2} con N_s . Los resultados obtenidos

β^{hh-QD2} (Exp. (70))	β^{HW} (Ref. [34])
Se utiliza un esquema de particionamiento de Löwdin a partir del modelo de Pidgeon-Brown (8×8) (30), que considera directamente las tres bandas de valencia y la de conducción, e incluye los efectos de las bandas más alejadas a través de los parámetros semi-empíricos de Luttinger.	Se utiliza un esquema de particionamiento de Löwdin hasta el tercer orden a partir del modelo de Kane [58] (8×8), que sólo considera las tres bandas de valencia y la de conducción.
El hamiltoniano no perturbado —la parte diagonal de (38)— fue resuelta exactamente (54)-(61), incluyendo el campo eléctrico.	Para resolver el hamiltoniano no perturbado se consideró un potencial de confinamiento rectangular de ancho arbitrario, lo cual introduce la constante $\frac{64}{9\pi^2}$ (ver Exp. (72)), y el campo eléctrico —que es el ingrediente fundamental en el acoplamiento Rashba, ya que introduce la SIA— se considera perturbativamente.
Dado que el campo eléctrico se incluye en el hamiltoniano no perturbado, sólo se requiere ir hasta el segundo orden de perturbaciones para obtener términos no diagonales distintos de cero, que se identifiquen con el acoplamiento Rashba.	Dado que el campo eléctrico se introduce como una perturbación, se requiere ir hasta el tercer orden para obtener términos no diagonales distintos de cero, que se identifiquen con el acoplamiento Rashba.
Se tomó en cuenta el valor numérico exacto de las integrales $I_n^{hl/hs/he} = \langle \varphi_n^{hh} \varphi_n^{lh/so/e} \rangle$. Esto es importante en tanto modifica el “peso” de la contribución del resto de las subbandas.	Todos los términos de la forma $I_n^{hl/hs/he} = \langle \varphi_n^{hh} \varphi_n^{lh/so/e} \rangle$ se tomaron $\simeq 1$, a pesar de que nuestros cálculos arrojaron que algunos de ellos resultaban ~ 0.5 .

Table 2 Diferencias fundamentales entre los desarrollos para llegar a la forma del parámetro de acoplamiento β^{hh-QD2} (Exp. (70)) y β^{HW} (Ref. [34]).

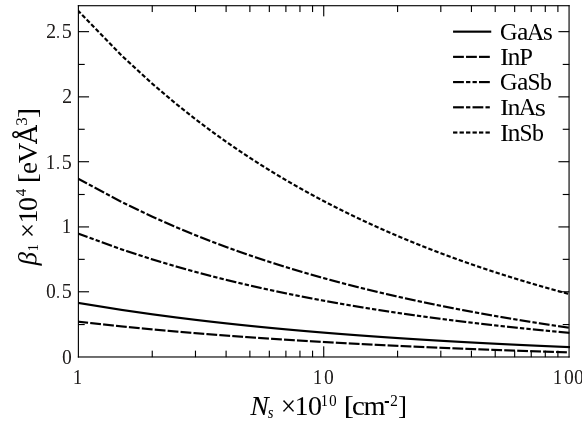


Fig. 8 Parámetro de acoplamiento para la primera subbanda de huecos pesados β_1^{hh-QD2} en el rango típico de densidades superficiales de carga ($N_s \in (10^{10} - 10^{12} \text{ cm}^{-2})$) reportadas en la literatura, para varios semiconductores.

muestran que el acoplamiento Rashba es más fuerte en semiconductores de *gap* estrecho, tal como sugieren algunos autores [11], sin embargo tal regularidad no se cumple en el caso del InP, donde es más débil que en el GaAs. Por otro lado, a partir de la Tabla 1 puede notarse que la fortaleza del parámetro de acoplamiento, en el rango de densidades estudiado, parece ordenarse de acuerdo al valor de la masa efectiva.

3 Propiedades de transporte de huecos bajo acoplamiento Rashba

El propósito de la presente sección es utilizar el modelo del acoplamiento Rashba obtenido para estudiar las propiedades del transporte cuántico de huecos pesados. Los sistemas físicos que se estudiarán corresponden a dos dispositivos espintrónicos: un conmutador de espín y un transistor de efecto campo de espín. Respecto a este último, se ha demostrado que la eficiencia mejora considerablemente cuando se utilizan los huecos como portadores [70], y que los tiempos de relajación de espín de los huecos son suficientemente largos como para que tales dispositivos sean plausibles [71]. Los cálculos de conductancia espín dependiente en función de parámetros de interés se obtendrán siguiendo el formalismo de la aproximación dispersiva multicomponente [72,73], luego de haber discutido cómo tratar adecuadamente la dependencia \hat{k}^3 en el hamiltoniano obtenido (69).

3.1 Sistema físico y modelo teórico

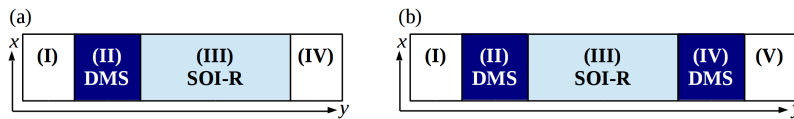


Fig. 9 Configuraciones para el sistema físico de interés. (a) “fuente/canal”: en las regiones I y IV no se ha considerado acoplamiento Rashba, la región II corresponde a un DMS y la región III corresponde a un canal de transporte donde existe acoplamiento Rashba. (b) “fuente/canal/colector”: similar al anterior, pero agregando un segundo DMS en la región IV.

Con el objetivo de estudiar fenomenologías de interés se han escogido dos configuraciones para el sistema físico. En un primer caso, que se denominará “fuente/canal” y que se ha representado en la Fig. 9 (a), se considerarán cuatro regiones de un sistema Q2D, confinado en una heteroestructura tipo $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. En las regiones I y IV no se ha considerado acoplamiento Rashba. La región II corresponde a un semiconductor magnético diluido (DMS: *diluted magnetic semiconductor*, en inglés), *i. e.* una heteroestructura tipo $p\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Ga}_y\text{Mn}_{1-y}\text{As}$ [74,75], que funciona como “fuente”, o sea inyecta una corriente de huecos espín-polarizada en un canal de transporte, representado en la región III. En este último, se ha considerado acoplamiento Rashba, que es posible modular por medio de campos eléctricos externos [76,77].

En la segunda de las configuraciones, que vamos a denominar como “fuente/canal/colector” y que se ha representado en la Fig. 9 (b), se ha añadido otro DMS (región IV). Este último, funciona como “colector”, o sea solo deja salir la corriente espín polarizada en la dirección de su magnetización. Esta configuración —que coincide con la de un dispositivo transistor de efecto campo de espín [68,78]—, desde el punto de vista dispersivo, permite estudiar transporte espín-dependiente a través de doble barreras o doble pozos, en dependencia de la polarización.

En ambas configuraciones, el sistema de huecos Q2D se encuentra bajo acoplamiento Rashba en todas las regiones. Una posibilidad para tenerlo en cuenta sólo en la región III, sería suponer un potencial de confinamiento simétrico [79], e introducir la asimetría sólo en la región III *via* campo eléctrico transversal.

Existen varias formas de lograr una corriente de portadores espín polarizada, pero hasta el momento, ninguno cumple al 100% los requerimientos necesarios para utilizarlas en una producción de SFET a escala comercial. La selección de los DMS como fuente y colector de los sistemas físicos considerados se ha hecho por varios motivos:

- Son los más compatibles con la electrónica convencional, basada en materiales semiconductores.
- De los iones magnéticos típicamente utilizados, el Mn^{2+} es uno de los más prometedores, siendo el compuesto $\text{Ga}_y\text{Mn}_{1-y}\text{As}$ el más estudiado [75,80]. El Mn^{2+} actúa como aceptor por lo que los portadores de carga por excelencia son los huecos.

- Los DMS suelen tratarse en la literatura [68,81,82] a partir de un modelo semi-fenomenológico que contiene (i) un término que describe el semiconductor hospedero —que sería (67) en el presente estudio—, (ii) un término que describe la interacción de intercambio que acopla el espín de los huecos con el espín de los iones de Mn que, en la aproximación de campo medio, puede reemplazarse por un desdoblamiento Zeeman efectivo [83], (iii) y un término que acopla algún campo magnético externo con el espín del Mn.

Además de los DMS, existen otros mecanismos que permiten generar una corriente de portadores espín polarizada. Un fuerte competidor de los DMS es un ferromagnético *per se*. La desventaja fundamental de estos —además del complejo crecimiento sobre una capa semiconductor— está asociada a la diferencia entre las conductividades de un metal y la de un semiconductor [84]. Una solución a esto, consistente en colocar contactos óhmicos (barreras) en la interfaz ferromagneto/semiconductor, fue propuesta por el propio Rashba [85]. Sin embargo, la eficiencia sigue siendo más baja respecto a los DMS. Asimismo, se puede obtener polarización de espín a través de efectos espín-dependientes intrínsecos, como el acoplamiento Rashba o Dresselhaus, o ambos [86-91].

Teniendo las consideraciones hechas hasta el momento, y dado que típicamente sólo está ocupada la primera subbanda de huecos pesados [30,33,68], cada región del sistema físico se describirá por

$$\hat{H}_0 = \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m^*} \mathbf{I}_2 + E_1^{hh}, \quad (73)$$

$$\hat{H}_{DMS} = \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m^*} \mathbf{I}_2 + h_0 \sigma_z + E_1^{hh}, \quad (74)$$

$$\hat{H}_C = \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m^*} \mathbf{I}_2 + \beta_1 (\sigma_+ \hat{k}_-^3 + \sigma_- \hat{k}_+^3) + E_1^{hh}. \quad (75)$$

El hamiltoniano \hat{H}_0 (73) describe las regiones semiconductoras sin acoplamiento Rashba (regiones I y IV en la configuración fuente/canal, representada en la Fig. 9 (a), y regiones I y V en la configuración fuente/canal/colector, representada en la Fig. 9 (b)). Aquí m^* representa la masa efectiva de los huecos pesados en la primera subbanda, calculada a partir de 68. Nótese que se han eliminado los sub- y super-

índices. I_2 representa la matriz identidad (2×2) y E_1^{hh} corresponde a la energía de la primera subbanda calculada a partir de (59).

El hamiltoniano \hat{H}_{DMS} (74), describe los DMS (región II en la configuración fuente/canal, representada en la Fig. 9 (a), y regiones II y IV en la configuración fuente/canal/colector, representada en la Fig. 9 (b)). Contiene dos términos, el primero —que corresponde a la energía cinética— se ha tomado igual que \hat{H}_0 . El segundo término describe el desdoblamiento Zeeman efectivo que los huecos experimentan, considerando la dirección de magnetización a lo largo de la dirección z , perpendicular al plano de movimiento xy . La energía del desdoblamiento h_0 depende de la fortaleza del acoplamiento antiferromagnético J_{pd} entre los huecos y los iones Mn^{2+} y de la concentración de Mn N_{Mn} . A parámetros típicos — $J_{pd} \approx 60 \text{ meVnm}^3$ y $N_{Mn} \approx 1 \text{ nm}^{-3}$ — se tiene $h_0 \approx 150 \text{ meV}$ [82].

El tercer hamiltoniano \hat{H}_C (75) describe el canal de transporte Q2D bajo acoplamiento Rashba (región III en ambas configuraciones representadas en la Fig. 9 (a) y (b)). El primer término es común en todas las regiones. El segundo corresponde al modelo obtenido en la Sec. 2.4.1, donde β_1 representa el parámetro de acoplamiento para la primera subbanda de huecos pesados obtenido a partir de (70).

3.2 Tratamiento de la dependencia cúbica en k en el término de acoplamiento Rashba

La mayoría de los problemas de transporte cuántico en semiconductores —y de transporte en general—, se describen por medio de ecuaciones o sistemas de ecuaciones diferenciales de segundo orden. Es posible identificar las dos soluciones resultantes como ondas que se propagan en direcciones contrarias. Lo anterior no es trivial cuando existe acoplamiento Rashba, ya que el hamiltoniano correspondiente para el caso de huecos pesados en sistemas Q2D contiene términos cúbicos en el vector de onda, tal como se mostró en la Sec. 2.4.1.

Algunos autores [68] han considerado el término de acoplamiento como una perturbación lineal en el vector de onda. Lo anterior, si bien simplifica el análisis, implica pérdida de física relevante, como mostraremos más adelante. Otro punto débil de esta aproximación es la elección necesariamente arbitraria del parámetro de acoplamiento.

Con el propósito de abordar este problema, considérese un sistema Q2D infinito de huecos pesados bajo acoplamiento Rashba. En este caso, la ecuación de Schrödinger correspondiente, tomando la referencia de la energía como la primera subbanda, tiene la forma

$$\left[\frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m^*} \mathbf{I}_2 + \beta_1 (\sigma_+ \hat{k}_-^3 + \sigma_- \hat{k}_+^3) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (76)$$

Utilizando un *ansatz* de la forma $\Psi(\mathbf{r}) = \chi e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, donde $\chi = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$ es un espinor de dos componentes mientras que $\mathbf{k} = (k \cos \theta, k \sin \theta)$ y $\mathbf{r} = (x, y)$ corresponden al vector de onda y vector de posición respectivamente —ambos sobre el plano xy —, el problema de autovalores resultante es

$$\begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - E & \beta_1 k^3 e^{-i3\theta} \\ \beta_1 k^3 e^{i3\theta} & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = 0. \quad (77)$$

Siguiendo el procedimiento estándar [18,68], es necesario que se anule el determinante del sistema (77) con el propósito de obtener soluciones no triviales. Lo anterior lleva a las relaciones de dispersión

$$E_{1,2}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \mp \beta_1 k^3 \quad (78)$$

con los autovectores (autoespinores) normalizados

$$\chi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i e^{i3\theta} \end{pmatrix} \quad (79)$$

uno para cada polarización del espín.

En la Fig. 10 se muestran las relaciones de dispersión (78) teniendo en cuenta el acoplamiento Rashba. Tal como se discutió en la Sec. 1.2.2, se observa claramente como dicha interacción introduce un desdoblamiento de la subbanda de huecos pesados en dos ramas, una para cada polarización del espín χ_1 (línea discontinua) y χ_2 (línea continua), rompiendo la degeneración en k con respecto al caso en que no se toma en cuenta $\beta = 0$ (línea punteada). Nótese además, que para una energía fija, la dirección de polarización del espín depende de la

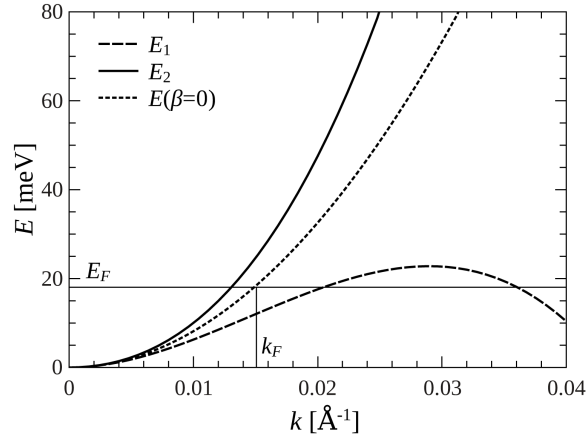


Fig. 10 Relaciones de dispersión para los estados de huecos pesados bajo acoplamiento Rashba para una densidad superficial de $N_s = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

dirección del vector de onda a través del parámetro $\theta = \arctan(ky/kx)$ en la expresión (79), que es la esencia de un acoplamiento espín-órbita.

La solución $\Psi(\mathbf{r})$ de la ecuación (76) se puede escribir de la forma

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_j a_j e^{ik_{1,j}r} \chi_1 + b_j e^{ik_{2,j}r} \chi_2, \quad (80)$$

donde a_j y b_j son constantes mientras que $k_{1,j}$ y $k_{2,j}$, con $j = 1, 2, 3$, son las tres soluciones de las ecuaciones y los $k_{1(2),j}$ son las soluciones de las ecuaciones $E_1(k_1) = 0$ y $E_2(k_2) = 0$, respectivamente.

En principio, la solución (80) debería describir ondas planas, una para cada polarización del espín, viajando con diferente velocidad de grupo ($k_1 \neq k_2$) en direcciones opuestas. Lo anterior no ocurre exactamente así en tanto las relaciones de dispersión (78) son cúbicas en el vector de onda, o sea para cada polarización del espín se tienen tres ondas planas con tres vectores de onda diferentes.

Las ecuaciones $E_1(k_1) = 0$ y $E_2(k_2) = 0$, sin embargo, tienen solución analítica

$$k_{1,1}(E) = \frac{1}{6m^*\beta_1} \left(\hbar^2 + \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} + \Gamma(E) \right), \quad (81)$$

$$k_{2,1}(E) = -\frac{1}{6m^*\beta_1} \left(\hbar^2 + \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} + \Gamma(E) \right), \quad (82)$$

$$k_{1,2}(E) = \frac{1}{12m^*\beta_1} \left(\hbar^2 - \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} - \Gamma(E) + i \left(-\sqrt{3} \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} + \sqrt{3}\Gamma(E) \right) \right), \quad (83)$$

$$k_{2,2}(E) = -\frac{1}{12m^*\beta_1} \left(\hbar^2 - \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} - \Gamma(E) + i \left(-\sqrt{3} \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} + \sqrt{3}\Gamma(E) \right) \right), \quad (84)$$

$$k_{1,3}(E) = \frac{1}{12m^*\beta_1} \left(\hbar^2 - \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} - \Gamma(E) + i \left(\sqrt{3} \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} - \sqrt{3}\Gamma(E) \right) \right), \quad (85)$$

$$k_{2,3}(E) = -\frac{1}{12m^*\beta_1} \left(\hbar^2 - \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} - \Gamma(E) + i \left(\sqrt{3} \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} - \sqrt{3}\Gamma(E) \right) \right), \quad (86)$$

donde $\Gamma(E)$ es

$$\Gamma(E) = \left(\hbar^6 - 108m^*E(\beta_1)^2 + 6\sqrt{6}\sqrt{m^{*3}E(\beta_1)^2(-\hbar^6 + 54m^{*3}E(\beta_1)^2)} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (87)$$

Es relativamente sencillo notar que las dos primeras soluciones (Exp. (81) y (82)) son tales que para $E(0) = 0$, $k_{1,1}(0) \neq 0$ y $k_{2,1}(0) \neq 0$, de manera que son las más alejadas del centro de la Zona de Brillouin. La aproximación que se ha seleccionado consiste en construir las soluciones con los vectores de onda restantes —los que se encuentran alrededor del vector de onda de Fermi k_F — (83)-(86), correspondiendo estos últimos a la región de mayor validez de los modelos **kp**.

Considérese que los huecos se están moviendo en la dirección positiva del eje y en el sistema Q2D, la función de onda correspondiente tiene la forma

$$\Psi(y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} e^{iq_1 y} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} e^{iq_2 y}, \quad (88)$$

donde —de los cuatro vectores de onda que se considerarán, $q_1 = k_{1,3}$ y $q_2 = k_{2,2}$ son los que apuntan en la dirección en que se está considerando el movimiento. Son reales de diferente magnitud. Considérese además que se es capaz de medir la polarización del espín de los huecos luego de que han recorrido cierta distancia L . Consecuente-

mente, la probabilidad de detectar un hueco pesado con polarización del espín *up* o *down* se calcula como [18,68,92]

$$P_{up} = |\langle(10)|\Psi(L)\rangle|^2 = \cos^2 \left[\frac{L}{2}(q_2 - q_1) \right], \quad (89)$$

$$P_{down} = |\langle(01)|\Psi(L)\rangle|^2 = \sin^2 \left[\frac{L}{2}(q_2 - q_1) \right] \quad (90)$$

respectivamente.

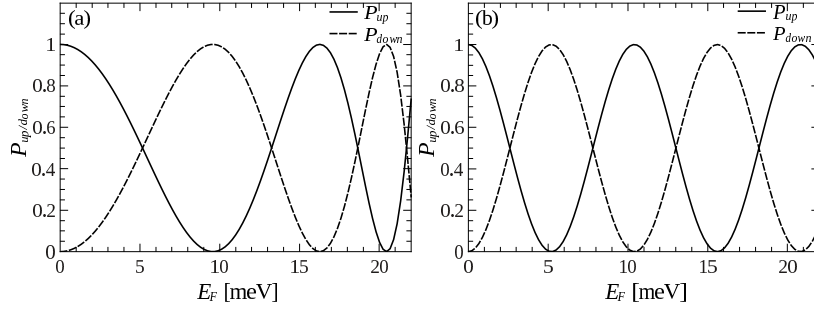


Fig. 11 Probabilidad de detectar un hueco pesado con espín *up* P_{up} (líneas continuas) o *down* P_{down} (líneas discontinuas) en una heteroestructura tipo p- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. (a) a partir de las definiciones de $q_1 = k_{1,3}$ y $q_2 = k_{2,2}$ (Exps. (85) y (84)). (b) Utilizando las consideraciones de la Ref. [?] (“linealizando” el término cúbico en las relaciones de dispersión (78)). $N_s = 10^{11} \text{ cm}^{-1}$, $L = 100 \text{ nm}$, $\beta = 1872.41 \text{ eV}\text{\AA}^3$ calculado a partir de (70) en el panel (a), $\beta = 4000 \text{ eV}\text{\AA}$ tomado arbitrariamente para el panel (b).

En la Fig. 11 se han representado los cálculos (89)-(90) de las probabilidades de detectar huecos pesados con espín *up* P_{up} (líneas continuas) y *down* P_{down} (líneas discontinuas) en una heteroestructura tipo p- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. En el panel (a) se han tomado $q_1 = k_{1,3}$ y $q_2 = k_{2,2}$ (Exps. (85) y (84) respectivamente), de manera que

$$q_2 - q_1 = \frac{1}{6m^*\beta_1} \left(2\hbar^2 - \frac{\hbar^4}{\Gamma(E)} - \Gamma(E) \right), \quad (91)$$

mientras que el panel (b) corresponde al modelo simplificado de la Ref. [68] donde

$$q_2 - q_1 = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^2 \beta_1 E. \quad (92)$$

Las oscilaciones observadas en ambos casos están ligadas —de forma no trivial— a la presencia del acoplamiento Rashba. La diferencia de la aproximación elegida, donde las oscilaciones son cada vez más rápidas (panel (a) de la Fig. 11), respecto a una aproximación como la tomada en la Ref. [68] —y al caso electrónico [18]—, donde se mantienen constantes (panel (b) de la Fig. 11), está asociada a la dependencia no lineal en la energía de la magnitud $q_2 - q_1$, (91) respecto a (92), que aparece explícitamente en las expresiones de las probabilidades de transmisión espín-dependientes (89)-(90).

De hecho, la selección del parámetro de acoplamiento en la Ref. [68] fue $\beta_1 = 0.5 \text{ eV\AA}$ el cual es cuatro órdenes de magnitud menor que el que se requiere para que aparezcan las oscilaciones mostradas en la Fig. 11 (b). Las oscilaciones —que aparecen naturalmente cuando se considera el término cúbico— sólo tienen un precedente en la literatura consultada para el caso electrónico cuando el acoplamiento Rashba es muy fuerte [18], como el observado en el InSb. En la dependencia con L también aparecen oscilaciones [18,68,78], que son más evidentes en tanto se espera que el espín de los huecos precese a medida que avanza.

Los resultados discutidos hasta el momento se utilizarán en el estudio de los sistemas físicos representados en la Fig. 9, particularmente en el tratamiento de la región del canal de transporte bajo acoplamiento Rashba (región III en ambas configuraciones), descrito por el hamiltoniano (75).

3.3 Aproximación Dispersiva Multicomponente

Puesto que se han elegido sistemas físicos (ver Fig. 9) separados en regiones de parámetros constantes descritas por los hamiltonianos (73)-(75), se ha considerado conveniente abordar el problema por medio de la aproximación dispersiva multicomponente [72,73] (MSA: *Multicomponent Scattering Approach*, en inglés), que combina el formalismo de la matriz de transferencia (TM: *Transfer Matrix*, en inglés) con la teoría de la dispersión, y que ha sido exitosamente empleada en el estudio del transporte de huecos a través de heteroestructuras semiconductoras cuánticas [72,93]. A continuación describimos el formalismo de la MSA.

3.3.1 Matrices de transferencia

Considerando los coeficientes seccionalmente constantes en cada región, las soluciones se pueden proponer como

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{j=1}^{2N} \alpha_j \Gamma_j e^{iq_j z}, \quad (93)$$

donde α_j contiene los coeficientes de la combinación lineal y las correspondientes constantes de normalización de las $\mathbf{F}_j(z)$ en el espacio de configuración, q_j puede ser real o complejo y Γ_j es un espinor ($N \times 1$).

Definamos el vector

$$\Psi(z) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}(z) \\ \mathbf{F}'(z) \end{pmatrix}, \quad (94)$$

que incluye la función de onda y su derivada. Definamos además el vector de estado

$$\Phi(z) = \begin{pmatrix} \mathbf{a} & 0 \\ 0 & \mathbf{b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\varphi}(z) \\ \overleftarrow{\varphi}(z) \end{pmatrix}, \quad (95)$$

donde \mathbf{a} y \mathbf{b} son coeficientes matriciales ($N \times N$), $\vec{\varphi}(z)$ y $\overleftarrow{\varphi}(z)$ son vectores bidimensionales, cuyas componentes describen los modos propagantes o evanescentes, en dependencia de la energía.

Basados en las definiciones anteriores, es posible establecer la relación [72]

$$\Psi(z) = \mathcal{N} \Phi(z), \quad (96)$$

donde \mathcal{N} depende del hamiltoniano de N -componentes en cuestión.

Se define la matriz de transferencia de primer tipo \mathbf{M}_{fd} (df: *function and derivative*, en inglés) como aquella que relaciona las soluciones (93) y sus derivadas, o sea el vector $\Psi(z)$ entre dos puntos de la heteroestructura

$$\Psi(z_R) = \mathbf{M}_{fd}(z_R, z_L) \Psi(z_L). \quad (97)$$

Similarmente, se define la matriz de transferencia de segundo tipo \mathbf{M}_{sv} (sv: *state vector*, en inglés) como aquella que relaciona los vectores de estado (95) entre dos puntos de la heteroestructura

$$\Phi(z_R) = \mathbf{M}_{sv}(z_R, z_L) \Phi(z_L). \quad (98)$$

Luego de simples sustituciones entre (96)-(98), se obtiene la transformación crucial [72]

$$\mathbf{M}_{sv}(z_R, z_L) = \mathcal{N}^{-1} \mathbf{M}_{fd}(z_R, z_L) \mathcal{N}, \quad (99)$$

que relaciona las dos matrices de transferencia utilizadas anteriormente.

3.3.2 Amplitudes de dispersión

A partir de las definiciones de la matriz de transferencia \mathbf{M}_{sv} y la matriz de dispersión \mathbf{S}

$$\begin{pmatrix} \overrightarrow{\varphi}(z_R) \\ \overleftarrow{\varphi}(z_R) \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{sv} \begin{pmatrix} \overrightarrow{\varphi}(z_L) \\ \overleftarrow{\varphi}(z_L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overrightarrow{\varphi}(z_L) \\ \overleftarrow{\varphi}(z_L) \end{pmatrix} \quad (100)$$

y

$$\begin{pmatrix} \overleftarrow{\varphi}(z_L) \\ \overrightarrow{\varphi}(z_R) \end{pmatrix}_{\text{out}} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \overleftarrow{\varphi}(z_L) \\ \overrightarrow{\varphi}(z_R) \end{pmatrix}_{\text{in}} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overleftarrow{\varphi}(z_L) \\ \overrightarrow{\varphi}(z_R) \end{pmatrix}_{\text{in}}, \quad (101)$$

donde t y r (t' y r') son las amplitudes de transmisión y reflexión para las partículas incidentes desde la izquierda (derecha), se pueden deducir las relaciones para las amplitudes de dispersión [72,93,94]

$$\begin{aligned} t &= \alpha - \beta\delta^{-1}\gamma & t' &= \delta^{-1} \\ r &= -\delta^{-1}\gamma & r' &= \beta\delta^{-1} \end{aligned} \quad (102)$$

A partir de las relaciones (102), pueden ser obtenidas diferentes magnitudes físicas relevantes. Considerando que las partículas inciden por la izquierda, la probabilidad de transmisión desde el canal de entrada j hacia el canal de salida i , tiene la forma:

$$T_{ij} = t_{ij}^* t_{ij}. \quad (103)$$

Asimismo, se define la conductancia por el canal i

$$G_i = \frac{e^2}{h} \sum_{j=1}^N t_{ij}^* t_{ij}, \quad (104)$$

como la probabilidad total de transmisión multiplicada por el factor $\frac{e^2}{h}$ (cuanto de flujo), al igual que la conductancia de doble electrodo de Landauer [42,43] de todo el sistema

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N T_{ij}. \quad (105)$$

Se pueden obtener además otras magnitudes relacionadas con los tiempos de fase [72,93,95] que no serán estudiadas en el presente trabajo.

3.4 Transporte cuántico dependiente del espín

El propósito de la presente sección es mostrar cálculos de la conductancia espín-dependiente para las configuraciones fuente/canal y fuente/canal/colector —descritas en la Sec. 3.1— en función de magnitudes de interés, a saber: la energía, la longitud del canal de transporte y el parámetro de acoplamiento Rashba. Para ello se hará uso del formalismo de la MSA.

Las regiones más externas en ambas configuraciones —siguiendo el formalismo de Landauer [42,43]— se asumen conectadas a reservorios infinitos de carga, que se encuentran a diferente potencial químico. De esta manera, no es preciso introducir un campo eléctrico para estudiar el movimiento de los huecos a lo largo de los sistemas considerados.

El movimiento se considerará a lo largo de la dirección y ($k_x = 0$). Las propiedades de los DMS, descritos por el hamiltoniano (74), serán comunes: 40 nm de longitud y $h_0 = 150$ meV [82]. El resto de los parámetros serán especificados oportunamente.

3.4.1 Conductancia en la configuración fuente/canal: Conmutador de espín

En la Fig. 12 se muestra la conductancia espín-dependiente G , en unidades de e^2/h , en función de la energía de Fermi, para la configuración fuente/canal (Fig. 9 (a)). Son accesibles cuatro canales de transporte. G_{11} y G_{21} , representadas en el panel (a), corresponden a

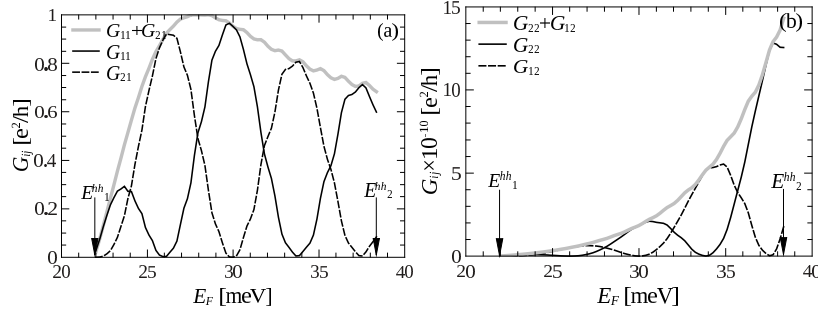


Fig. 12 Conductancia espín-dependiente G , en unidades de e^2/h , en función de la energía de Fermi E_F . (a) G_{11} y G_{21} corresponden a los canales de transporte de huecos pesados entrantes con espín up y salientes con espín up (G_{11}) y espín $down$ (G_{21}). (b) G_{22} y G_{12} corresponden a los canales de transporte de huecos pesados entrantes con espín $down$ y salientes con espín $down$ (G_{22}) y espín up (G_{12}). $L = 500$ nm y $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³.

los canales de transporte de huecos pesados entrantes con espín up y salientes con espín up (G_{11}) y espín $down$ (G_{21}), transición directa e indirecta, respectivamente. Asimismo, G_{22} y G_{12} , representadas en el panel (b), corresponden a los canales de transporte de huecos pesados entrantes con espín $down$ y salientes con espín $down$ (G_{22}) y espín up (G_{12}), transición directa e indirecta, respectivamente. El rango de energía estudiado se encuentra entre la primera $E_1^{hh} = 21.94$ meV y segunda subbanda $E_2^{hh} = 38.35$ meV de huecos pesados. La longitud del canal de transporte (región III) se ha fijado en $L = 500$ nm, mientras que el parámetro de acoplamiento es $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³ que corresponde a una densidad $N_s = 5 \times 10^{-11}$ cm⁻².

En la Fig. 12 se observan oscilaciones de la conductancia respecto a la energía —que no tienen precedentes en la literatura especializada consultada—, cuyo origen fue discutido en la Sec. 3.2 (ver Fig. 11). Estas oscilaciones ahora están moduladas por los fenómenos dispersivos que ocurren en las regiones donde se encuentran los DMS. Nótese a partir de (74), que estos últimos se comportan como pozos para los huecos que llegan con espín up (G_{11} y G_{21}), y como barreras para los huecos que llegan con espín $down$ (G_{22} y G_{12}). Esto último explica por qué la conductancia por los canales 22 y 12 está fuertemente atenuada ($G_{22,12} \sim 10^{-10} e^2/h$): el DMS filtra solo los huecos con espín up . En el panel (b) de esta figura, lo mostramos para que se puedan apreciar las oscilaciones de G , referidas y explicadas anteriormente. No obstante, por la amplitud de G_{12} y G_{22} en el rango de E_F considerado, estos canales se considerarán cerrados.

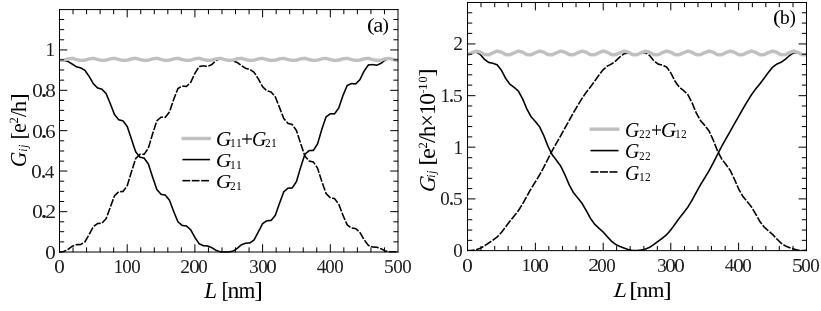


Fig. 13 Conductancia espín-dependiente G , en unidades de e^2/h , en función de la longitud del canal de transporte L . (a) G_{11} y G_{21} corresponden a los canales de transporte de huecos pesados entrantes con espín up y salientes con espín up (G_{11}) y espín $down$ (G_{21}). (b) G_{22} y G_{12} corresponden a los canales de transporte de huecos pesados entrantes con espín $down$ y salientes con espín $down$ (G_{22}) y espín up (G_{12}). $E_F = 30$ meV y $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³.

En la Fig. 13 se muestra la conductancia —etiquetada de la misma forma que en la Fig. 12—, ahora en función de la longitud L del canal de transporte (región III). En este caso, las oscilaciones son similares a las reportadas en la literatura [18,68], pero también moduladas por los fenómenos dispersivos en el DMS. El comportamiento está asociando a la precesión del espín de los huecos en su travesía por la región donde existe acoplamiento Rashba [92,96], esto es, el DMS fuente garantiza que sólo penetren huecos con espín up . Una vez recorridos 250 nm es máxima la probabilidad de que la polarización haya cambiado a $down$. La energía de Fermi se ha tomado $E_F = 30$ meV, que se encuentra cerca de la mitad entre la primera y segunda subbanda de huecos pesados. El parámetro de acoplamiento, por su parte, se tomó $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³ que corresponde a una densidad $N_s = 5 \times 10^{-11}$ cm⁻², igual que los cálculos en función de la energía.

La existencia de transiciones cruzadas, o sea mezcla entre canales de diferente polarización de espín ($G_{21,12} \neq 0$) —tanto en la dependencia con la energía (Fig. 12) cómo en la dependencia con la longitud del canal (Fig. 13)—, se debe a la presencia del término de Rashba ($\beta_1 \neq 0$) en el hamiltoniano (75). Incluso, en un modelo que involucre explícitamente más bandas de huecos para estudiar el transporte, podrían esperarse transiciones cruzadas entre huecos de diferente polarización de espín y masa efectiva.

En los gráficos mostrados en las Figs. 12 y 13 se ha incluido —en línea gruesa gris— la conductancia total para los huecos que entran en el canal de transporte con alguna polarización particular. Esta es una

medida de como es afectado el flujo de partículas por los mecanismos dispersivos en la región del DMS (región II) sin tener en cuenta el acoplamiento Rashba.

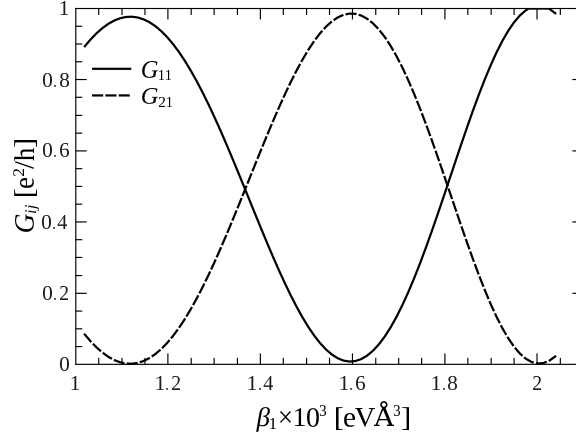


Fig. 14 Conductancia espín-dependiente G , en unidades de e^2/h , en función del parámetro de acoplamiento Rashba β_1 . G_{11} y G_{21} corresponden a los canales de transporte de huecos pesados entrantes con espín up y salientes con espín up (G_{11}) y espín $down$ (G_{21}). $L = 500$ nm y $E_F = 30$ meV.

En la Fig. 14 se muestra la conductancia respecto al parámetro de acoplamiento β_1 , sólo para los canales de transporte en los que los huecos inciden con polarización up (G_{11} y G_{21}). Los otros dos están fuertemente atenuados ($G_{22,12} \sim 10^{-10} e^2/h$) tal como muestran las Figs. 12 (b) y 13 (b). Este sistema físico correspondiente a la configuración fuente/canal, se comporta como un “conmutador de espín” [4,97] eléctricamente controlable. Esto es, dada una corriente espín polarizada, es posible obtener una u otra polarización de espín a la salida del dispositivo modificando el parámetro de acoplamiento Rashba. No obstante, este mecanismo es bastante susceptible a los cambios en la energía de Fermi, tal como se muestra en la Fig. 12. La longitud del canal de transporte (región III) se ha fijado en $L = 500$ nm, mientras que la energía de Fermi se ha tomado $E_F = 30$ meV.

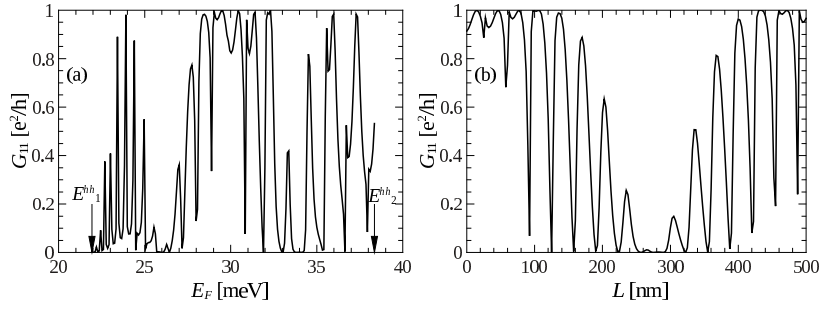


Fig. 15 Conductancia espín-dependiente G , en unidades de e^2/h , (a) en función de la energía de Fermi E_F con $L = 500$ nm y $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³, y (b) en función de la longitud del canal de transporte L con $E_F = 30$ meV y $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³. Sólo se consideró G_{11} que corresponde a huecos pesados entrantes con espín up y salientes con espín up .

3.4.2 Conductancia en la configuración fuente/canal/colector: Transistor de efecto campo de espín

En la Fig. 15 (a) se muestra la conductancia espín-dependiente G , en unidades de e^2/h , en función de la energía de Fermi, para la configuración fuente/canal/colector (Fig. 9 (b)). Si bien son accesibles los cuatro canales considerados en la sección anterior —dedicada a la configuración fuente/canal—, solo se ha representado G_{11} . Esta última corresponde a los huecos entrando con polarización up y saliendo con polarización up . El resto de los canales de transporte están fuertemente atenuados ($G_{21,22,12} \sim 10^{-10} e^2/h$). Esto se debe a que el DMS fuente atenúa la corriente de huecos que entra con espín $down$ ($G_{22,12} \rightarrow 0$) mientras que el DMS colector atenúa la corriente de huecos que pretenda salir con polarización $down$ ($G_{21} \rightarrow 0$). Al igual que en el caso anterior, el rango de energía estudiado se encuentra entre la primera $E_1^{hh} = 21.94$ meV y segunda subbanda $E_2^{hh} = 38.35$ meV de huecos pesados. La longitud del canal de transporte (región III) se ha fijado en $L = 500$ nm, mientras que el parámetro de acoplamiento es $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³ que corresponde a una densidad $N_s = 5 \times 10^{-11}$ cm⁻².

Las oscilaciones que se observaban en el caso fuente/canal (Fig. 12 (a)) ahora son más complicadas —sin una periodicidad evidente— en tanto los mecanismos dispersivos son más importantes. Los huecos pesados que llegan con espín up “ven” una estructura de doble pozo de potencial. De ahí la presencia de picos resonantes.

La dependencia de la conductancia con la longitud del canal de transporte se muestra en la Fig. 15 (b). Al igual que sucedía en la dependencia con la energía, las oscilaciones de G son menos evidentes debido a los fenómenos dispersivos. La energía de Fermi se ha tomado $E_F = 30$ meV, mientras que el parámetro de acoplamiento se tomó $\beta_1 = 1019.61$ eVÅ³ que corresponde a una densidad $N_s = 5 \times 10^{-11}$ cm⁻²

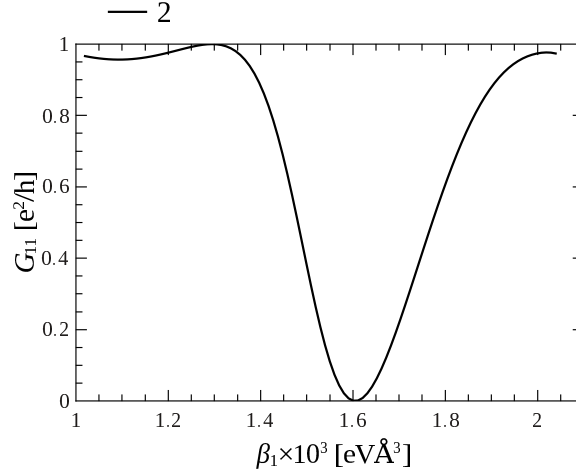


Fig. 16 Conductancia espín-dependiente G , en unidades de e^2/h , en función del parámetro de acoplamiento Rashba β_1 . Sólo se consideró G_{11} que corresponde a huecos pesados entrantes con espín up y salientes con espín up . $L = 500$ nm y $E_F = 30$ meV.

La Fig. 16 muestra la conductancia por el único canal de interés respecto al parámetro de acoplamiento β_1 . La longitud del canal de transporte (región III) se ha fijado en $L = 500$ nm, mientras que la energía de Fermi se ha tomado $E_F = 30$ meV. Este resultado sería el equivalente a un gráfico I - V de un transistor de efecto campo de espín, en tanto G está asociada a la corriente, mientras que β_1 se puede modificar con campos eléctricos externos (electrodo compuerta) [76,77]. Nótese que un cambio de β_1 de 1.4×10^3 eVÅ³ a 1.6×10^3 eVÅ³ “cierra” el dispositivo. Esto permitiría codificar los estados lógicos “0” y “1” tal como se hace hoy con transistores de efecto campo convencionales.

Estos resultados muestran una cuestión importante, que no fue tomada en cuenta en la concepción original del SFET de Datta y Das [78], ni en prototipos similares para huecos [68]. No basta con garan-

tizar la presencia de una fuente de portadores espín polarizados, hay que tener en cuenta que la energía de Fermi también determina —de forma no trivial como se observa en la Fig. 15 (a)—, la polarización de espín que tienen los portadores al llegar al colector, incluso sin variar la fortaleza del acoplamiento Rashba. Esto último fue reportado para el caso electrónico cuando el acoplamiento es fuerte [18], como el que se observa en el InSb.

4 Conclusiones

En el presente trabajo se construyó un modelo para describir apropiadamente el acoplamiento espín-órbita tipo Rashba de los huecos pesados en heteroestructuras semiconductoras y se estudiaron los efectos de tal acoplamiento en las propiedades de transporte a través de sistemas físicos de interés en la Espintrónica.

Se seleccionó el modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de Pidgeon-Brown (8×8) a cuatro bandas dado que:

- Es una generalización del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de Kohn-Luttinger (6×6) a tres bandas, cuyo éxito en la descripción de los estados de valencia de semiconductores es ampliamente reconocido.
- Incluye la banda de conducción, lo que permite describir con mayor exactitud semiconductores de *gap* estrecho, donde se ha reportado que el acoplamiento Rashba es más fuerte.
- Incluye los efectos de las bandas no consideradas explícitamente a través de los parámetros semi-empíricos de Luttinger.

La modelación del potencial de confinamiento de las heteroestructuras como un pozo triangular infinito resultó buena, al menos para describir la primera subbanda de huecos pesados confinados en la intercara del $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, dado que las longitudes de confinamiento transversal estimadas fueron similares a las obtenidas mediante soluciones autoconsistentes de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger reportadas en la literatura especializada.

La utilización del esquema de particionamiento de Löwdin hasta el segundo orden de perturbaciones, permitió extraer con éxito un hamiltoniano efectivo para huecos pesados confinados en heteroestructuras, a partir del modelo de Pidgeon-Brown y la aproximación de la función envolvente.

El modelo obtenido para describir el acoplamiento Rashba tiene la misma forma predicha en la literatura especializada, a partir de consideraciones de simetría. La contribución fundamental, por su parte, es la forma del parámetro que caracteriza la fortaleza del acoplamiento:

- La expresión analítica obtenida esclarece la física detrás de la dependencia anómala del parámetro de acoplamiento con la densidad superficial de huecos observada en mediciones experimentales en $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.
- Los cálculos del parámetro de acoplamiento para otros de los semiconductores más estudiados, a saber, InSb, InAs, GaSb, InP, también exhibieron tal anomalía.
- Los cálculos para el GaAs ajustan muy bien los valores experimentales y cálculos numéricos autoconsistentes detectados en la literatura especializada en un amplio rango de densidades, respecto a modelos teóricos previos.
- El InSb exhibió valores del parámetro de acoplamiento marcadamente mayores respecto al resto de los materiales considerados, lo que lo hace sin dudas uno de los mejores candidatos para las aplicaciones espintrónicas.

Por otro lado, el desarrollo que condujo al presente modelo de Rashba también permitió estudiar las implicaciones de la asimetría del potencial de confinamiento de la heteroestructura sobre la masa efectiva transversal de los huecos pesados. Los valores obtenidos para varios semiconductores mostraron que disminuía cerca de un 50% respecto a la aproximación típicamente utilizada.

Dos sistemas físicos fueron seleccionados para describir las propiedades generales de conmutadores de espín y transistores de efecto campo de espín. La selección de semiconductores magnéticos diluidos como electrodos “fuente” y “colector” fue argumentada esencialmente en términos de compatibilidad con la electrónica convencional. Sin embargo, no se esperaría cambios muy significativos en los resultados si se hubieran seleccionado materiales ferromagnéticos, dado que se suelen modelar con hamiltonianos similares en la literatura especializada.

La discusión sobre el tratamiento del término cúbico en el hamiltoniano de Rashba obtuvo la selección de una aproximación sin ambigüedades para construir las soluciones que describen la propagación transversal de los huecos pesados en la heteroestructura.

Ambos sistemas físicos se caracterizaron por regiones de parámetros contantes, por lo que fue posible calcular la conductancia resuelta por el espín extendiendo el formalismo de la aproximación dispersiva multicomponente, que ha sido exitosamente empleado en el estudio del transporte de huecos a través de heteroestructuras semiconductoras, sin acoplamiento espín-órbita. Los cálculos de conductancia espín dependiente para la configuración fuente/canal —que modela un conmutador de espín— mostraron que:

- La dependencia con la energía de Fermi exhibe un comportamiento oscilatorio -sin precedentes en la literatura especializada consultada-, modulado por los mecanismos dispersivos que ocurren en la región donde se encuentra la fuente. Una explicación intuitiva para este comportamiento periódico pudiera tener que ver con el tiempo que le toma a los huecos atravesar la región bajo acoplamiento Rashba. Es decir, si toma cierto tiempo a una partícula recorrer una región de cierta longitud para que el espín cambie de orientación, en principio, si esa región se recorre en el doble de tiempo -a una “velocidad” (energía) menor-, se esperaría que el espín cambiara dos veces. No cabe duda que hay que indagar más en esta dirección con el propósito de esclarecer la física subyacente.
- La dependencia con las dimensiones del canal de transporte preserva las propiedades periódicas esperadas -asociadas al fenómeno de precesión del espín-, igualmente moduladas por los mecanismos dispersivos.
- Se demostró la eficiencia de los semiconductores magnéticos diluidos -seleccionados como fuente de portadores espín polarizados-, reflejada en la atenuación perfecta de la conductancia $G \sim 10^{-10} e^2/h$ para los huecos con espín orientado en dirección contraria a su dirección de magnetización.
- La dependencia con el parámetro de acoplamiento caracteriza el comportamiento tipo conmutador de espín. Esto es, dada una corriente espín polarizada, es posible obtener una u otra polarización de espín a la salida del dispositivo modificando el acoplamiento Rashba. No obstante, los cambios esperados son bastante susceptibles a los cambios en la energía de Fermi.

Por otro lado, los cálculos de la conductancia espín dependiente para la configuración fuente/canal/colector -que modela un transistor de efecto campo de espín- mostraron que:

- La dependencia con la energía de Fermi exhibió oscilaciones más complicadas -sin periodicidad evidente- en tanto los fenómenos dispersivos son más significativos. Los huecos pesados que llegan con espín *up* “ven” una estructura de doble pozo de potencial, apareciendo consecuentemente de picos resonantes.
- Las oscilaciones que exhibe la dependencia con las dimensiones del canal de transporte también se modificaron drásticamente respecto a la configuración fuente/canal. No obstante, la periodicidad de las mismas es un poco más clara.
- La selección de semiconductores magnéticos diluidos como fuente y colector garantizó que el sistema sólo fuera atravesado por huecos espín-polarizados en la dirección de magnetización de estos.
- La dependencia con el parámetro de acoplamiento -equivalente a la curva *I-V*- mostró la viabilidad de los transistores de efecto campo de espín como dispositivos lógicos.

Bibliografía

1. G. A. Prinz. *Science* **282**, 1660 (1998).
2. S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger. *Science* **294**, 1488 (2001).
3. I. Žutić, J. Fabian, S. D. Sarma. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 2 (2004).
4. D. D. Awschalom, M. E. Flatté. *Nature Phys.* **3**, 153 (2007).
5. M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. van Dau, F. Petroff. *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
6. G. Binasch, P. Grumberg, F. Saurenbach, W. Zinn. *Phys. Rev. B* **39**, 4828 (1989).
7. C. Chappert. *Nature Materials* **6**, 813 (2007).
8. J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, T. Enoki. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
9. J. P. Eisenstein, H. L. Stormer, V. Narayanamurti, A. C. Gossard, W. Wiegmann. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 2579 (1984).
10. J. P. Heida, B. J. van Wees, J. J. Kuipers, T. M. Klapwijk, G. Borghs. *Phys. Rev. B* **57**, 11911 (1998).
11. R. Winkler. *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems* (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2003).

12. E. I. Rashba. *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)* **2**, 1224 (1960).
13. E. I. Rashba. *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960).
14. D. Stain, Klitzing, K. von Klitzing, G. Weimann. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 130 (1983).
15. H. L. Stormer, Z. Schlesinger, A. Chang, D. C. Tsui, A. C. Gos-sard, W. Wiegmann. *Phys. Rev. Lett.* **51**, 126 (1983).
16. Y. A. Bychkov, E. I. Rashba. *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17**, 6039 (1984).
17. Y. A. Bychkov, E. I. Rashba. *JETP Lett.* **39**, 2 (1984).
18. F. Mireles, G. Kirczenow. *Phys. Rev. B* **64**, 024426 (2001).
19. S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov, L. E. Golub, E. L. Ivchenko, P. Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 256601 (2004).
20. S. Giglberger, L. E. Golub, V. V. Bel'kov, S. N. Danilov, D. Schuh, C. Gerl, F. Rohlfing, J. Stahl, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl, S. D. Ganichev. *Phys. Rev. B* **75**, 035327 (2007).
21. W. Shubnikov, W. J. de Haas. *Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci.* **33**, 130 (1930).
22. W. J. de Haas, P. M. van Alphen. *Proc. Netherlands Roy. Acad. Sci.* **33**, 1106 (1930).
23. L. Onsager. *Philos. Mag.* **43**, 1006 (1952).
24. P. D. Dresselhaus, C. M. A. Papavassiliou, R. G. Wheeler, R. N. Sacks. *Phys. Rev. Lett.* **68**, 106 (1992).
25. G. A. Khodaparast, R. E. Doezema, S. J. Chung, K. J. Goldammer, M. B. Santos. *Proc. 10th Int. Conf. on Narrow Gap Semiconduc-tors*. IPAP Conf. Series 2 (Ishikawa, 2001). P 245.
26. J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang, P. J. Stiles. *Phys. Rev. B* **38**, 10142 (1988).
27. B. Das, D. C. Miller, S. Datta, R. Reifenberger, W. P. Hong, P. K. Bhattacharya, J. Singh, M. Jaffe. *Phys. Rev. B* **39**, 1411 (1989).
28. F. J. Ohkawa, Y. Uemura. *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **57**, 164 (1975).
29. E. Bangert, G. Landwehr. *Surf. Sci* **58**, 138 (1976).
30. T. Ando. *J. Japan Phys. Soc.* **54**, 1528 (1985).
31. L. G. Gerchikov, A. V. Subashiev. *Sov. Phys. Semicond* **26**, 73 (1992).
32. R. Winkler. *Phys. Rev. B* **62**, 4245 (2000).

33. R. Winkler, H. Noh, E. Tutuc, M. Shayegan. *Phys. Rev. B* **65**, 155303 (2002).
34. B. Habib, M. Shayegan, R. Winkler. *Semicond. Sci. Technol.* **23**, 064002 (2009).
35. A. D. Wieck, E. Batke, D. Heitmann, J. P. Kotthaus, E. Bangert. *Phys. Rev. Lett.* **53**, 493 (1984).
36. G. M. Minkov, A. A. Sherstobitov, A. V. Germanenko, O. E. Rut, V. A. Liratova, B. N. Zvonkov. *Phys. Rev. B* **71**, 165312 (2005).
37. G. Dresselhaus. *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
38. D. G. Seiler, B. D. Bajaj, A. E. Stephens. *Phys. Rev. B* **16**, 2822 (1977).
39. H. Riechert, S. F. Alvarado, A. N. Titkov, V. I. Safarov. *Phys. Rev. Lett.* **52**, 2297 (1984).
40. R. Cuan, L. Diago-Cisneros. *J. Appl. Phys* **110**, 113705 (2011).
41. A. V. Moroz, C. H. W. Barnes. *Phys. Rev. B* **60**, 14272 (1999).
42. R. Landauer. *Phys. Scr.* **T42**, 110 (1992).
43. Y. Imry, R. Landauer. *Rev. Mod. Phys.* **71**, S306 (1999).
44. R. Danneau, W. R. Clarke, O. Klochan, A. P. Micolich, A. R. Hamilton, M. Y. Simmons, M. Pepper, D. A. Ritchie. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 012107 (2006).
45. B. Grbić, C. Ellenberger, T. Ihn, K. Ensslin, D. Reuter, A. D. Wieck. *AIP Conf. Proc.* **772**, 407 (2005).
46. B. Grbić. *Hole transport and spin-orbit coupling in p-type GaAs nanostructures*. Ph.D. thesis, ETH Zurich (2007).
47. B. Grbić, R. Leturcq, T. Ihn, K. Ensslin, D. Reuter, A. D. Wieck. *Physica E* **40**, 2144 (2008).
48. C. R. Pidgeon, N. R. Brown. *Phys. Rev.* **146**, 575 (1966).
49. P. O. Löwdin. *J. Chem. Phys.* **19**, 1396 (1951).
50. M. A. Zudov, R. R. Du, L. N. Pfeffer, K. W. West. *Phys. Rev. Lett.* **90**, 046807 (2003).
51. H. L. Stormer, W. T. Tsang. *Appl. Phys. Lett.* **36**, 685 (1980).
52. H. L. Stormer, A. C. Gossard, W. Wiegmann, R. Blondel, K. Baldwin. *Appl. Phys. Lett.* **44**, 139 (1984).
53. J. J. Hermans, M. B. Santos, M. Shayegan. *Appl. Phys. Lett.* **61**, 1652 (1992).
54. D. Reuter, A. D. Wieck, A. Fisher. *Review of Scientific Instruments* **70**, 3435 (1999).
55. E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, F. Bassani. *Phys. Rev. B* **50**, 8523 (1994).

56. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, L. R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys* **89**, 5815 (2001).
57. I. Sadi, S. Ben Radhia, K. Boujdaria. *J. Appl. Phys* **107**, 043701 (2010).
58. E. O. Kane. *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 249 (1957).
59. J. M. Luttinger, W. Kohn. *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
60. A. L. Efros, M. Rosen. *Phys. Rev. B* **58**, 7120 (1998).
61. C. Pryor. *Phys. Rev. B* **57**, 7190 (1998).
62. V. D. Dymnikov. *Physics of the Solid State* **47**, 614 (2005).
63. G. L. Bir, G. E. Pikus (Wiley, New York, 1974).
64. A. Kadigrobov, Z. Zagoskin, R. I. Shekhter, M. Jonson. *Phys. Rev. B* **52**, R8662 (1995).
65. G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures* (Les éditions de physique, France, 1988).
66. M. de Dios Leyva. *Mecánica cuántica* (Félix Varela, La Habana, 2006).
67. J. C. Hensel, G. Feher. *Phys. Rev.* **129**, 1041 (1963).
68. M. G. Pala, M. Governale, J. König, U. Zülicke, G. Iannaccone. *Phys. Rev. B* **69**, 045304 (2004).
69. R. Winkler, U. Rössler. *Phys. Rev. B* **48**, 8918 (1993).
70. D. M. Gvozdić, U. Ekenberg. *Phys. Scr.* **T126**, 21 (2006).
71. B. A. Glavin, K. W. Kim. *Phys. Rev. B* **71**, 03532 (2005).
72. L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez, P. Pereyra. *Phys. Rev. B* **74**, 045308 (2006).
73. L. Diago-Cisneros, P. Pereyra, R. Pérez-Álvarez, H. Rodríguez-Coppola. *Phys. Stat. Sol. (b)* **1**, 125 (2002).
74. A. H. MacDonald, P. Schiffer, N. Samarth. *Nature Materials* **4**, 195 (2005).
75. T. Dietl, H. Ohno. *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187 (2014).
76. B. Habib, J. Shabani, E. P. De Poortere, M. Shayegan, R. Winkler. *Phys. Rev. B* **75**, 153304 (2007).
77. A. V. Larionov, L. E. Golub. *Phys. Rev. B* **78**, 033302 (2008).
78. S. Datta, B. Das. *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
79. D. M. Gvozdić, U. Ekenberg. *Physica E* **32**, 458 (2006).
80. H. Ohno. *Science* **281**, 951 (1998).
81. L. Brey, J. Fernández-Rossier, C. Tejedor. *Phys. Rev. B* **70**, 235334 (2004).
82. B. Lee, T. Jungwirth, A. H. MacDonald. *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 393 (2002).

83. T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand. *Science* **287**, 1019 (2000).
84. G. Schmidt, D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip, B. J. van Wees. *Phys. Rev. B* **62**, R4790 (2000).
85. E. I. Rashba. *Phys. Rev. B* **62**, R16267 (2000).
86. S. D. Ganichev, E. L. Ivchenko, S. N. Danilov, J. Eroms, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4358 (2001).
87. S. K. Joshi. *Phys. Rev. B* **64**, 075320 (2001).
88. J. A. Folk, R. M. Potok, C. M. Marcus, V. Umansky. *Science* **72**, 679 (2003).
89. A. W. Cummings, R. Akis, D. K. Ferry. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 1721115 (2006).
90. M. Governale, D. Boese, U. Zülicke, C. Scholl. *Phys. Rev. B* **65**, 140403(R) (2002).
91. T. Koga, J. Nitta, H. Takayanagi, S. Datta. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 126601 (2002).
92. R. Cuan, L. Diago-Cisneros. *Rev. Cub. Fis.* **27**, 212 (2010).
93. S. Arias-Laso, L. Diago-Cisneros. *Rev. Cub. Fis.* **26**, 197 (2009).
94. P. A. Mello, P. Pereyra, N. Kumar. *Ann. Phys.* **181**, 290 (1988).
95. L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez, P. Pereyra. *Rev. Mex. Fís* **53**, 7 (2007).
96. R. Cuan, L. Diago-Cisneros. *Nova Scientia* **5**, 76 (2012).
97. J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, I. Žutić. *acta physica slovacca* **57**, 565 (2007).

Espejos omnidireccionales para el rango visible a partir de multicapas dieléctricas de silicio poroso

Augusto David Ariza-Flores, Luis Manuel Gaggero-Sager,
Vivechana Agarwal

Resumen

In this chapter, the optical reflectivity response of porous silicon based omnidirectional multilayered mirrors, is presented. The reflectivity spectra were calculated for a periodic chirped multilayer, modulated with an enveloped function $f(x) = Cx^\alpha$. By varying the α value of the enveloped function, an interval of α values which generate an omnidirectional photonic band gap in the visible range. is shown. Taking into account the experimental fabrication, i. e., the total physical thickness and the mechanical stability of the multilayered structure, the optimal value of α was selected. The reflectivity spectrum of the fabricated sample was measured for the incident angles of 8 and 68°, and showed an omnidirectional photonic band gap of 409 nm, from 396 to 805 nm, with more than 95 % of reflectivity. The effective medium theory was used to explain the reduction in the absorption of the porous silicon oxidized sample which results in the high reflectivity of the visible omnidirectional mirror. This method is expected to be used to fabricate omnidirectional mirrors in the ultraviolet region, with an enhancement of the reflectivity response as compared to the aluminium and silver metallic mirrors, by using dielectric multilayers.

A. D. Ariza-Flores and L. M. Gaggero-Sager
Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Morelos, México.

A. D. Ariza-Flores and V. Agarwal
CIICAp. Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Morelos, México. e-mail: vagarwal@uaem.mx

Resumen

En este capítulo se presenta la respuesta óptica de reflectancia para espejos omnidireccionales multicapa fabricados con silicio poroso. Se calcularon los espectros de reflectividad para una multicapa de periodo variable, modulada por una función envolvente de la forma $f(x) = Cx^\alpha$. Variando la potencia de la función envolvente, se encontró un intervalo de valores de α que genera una banda omnidireccional en el rango visible. Se seleccionó un valor óptimo de α tomando en cuenta la fabricación experimental de la multicapa, el espesor físico total y la estabilidad mecánica de la estructura. Los espectros de reflectancia para la muestra fabricada fueron medidos para los ángulos de incidencia de 0 y 68°, mostrando una banda omnidireccional de 409 nm, desde 396 hasta 805 nm, por arriba del 95 % de reflectividad. Se utilizó la teoría del medio efectivo para explicar la baja absorción de la muestra de silicio poroso oxidado, lo cual resulta en una alta reflectividad del espejo omnidireccional en el rango visible. Se espera que este método pueda ser utilizado para la obtención de espejos omnidireccionales en la región ultravioleta y se estima una mejora los espectros de reflectancia, en comparación con los espejos metálicos fabricados con plata y aluminio, usando multicapas dieléctricas.

1 Introducción

En los últimos cincuenta años la tecnología de los semiconductores ha estado presente en cualquiera de los dispositivos electrónicos que usamos diariamente. El camino hacia la miniaturización y la alta velocidad de los circuitos integrados, ha estimulado mucha investigación en todo el mundo. Desafortunadamente, la miniaturización resulta en circuitos con alta resistencia, lo que implica un alto poder de disipación de energía y calor, mientras que el incremento en la velocidad está limitada por la cantidad y sincronización de las señales eléctricas. En un esfuerzo por mantener el progreso en la integración y mejora, se están desarrollando nuevos dispositivos que porten información con luz en lugar de señales eléctricas. La luz tiene muchas ventajas sobre el electrón, por ejemplo, puede viajar en un material dieléctrico con mucho mayor velocidad que el electrón en un alambre metálico,

y puede llevar una mayor cantidad de información por segundo. Por otro lado, el ancho de banda de los materiales dieléctricos es significativamente más grande que el de los metales: el ancho de banda de la fibra óptica en sistemas de comunicación es típicamente del orden de terahertz, mientras que para sistemas electrónicos (como el teléfono) es solo de cientos de kilohertz. Además las *partículas de luz* (o fotones) no interactúan tanto entre sí comparado con los electrones, lo que reduce pérdidas de energía.

Entre los materiales dieléctricos usados para fabricar estructuras en donde puede viajar la luz, está el silicio poroso (SP). A diferencia de otros sistemas, el silicio puede utilizarse para fabricar nanoestructuras dieléctricas, de manera fácil, rápida, económica y sin un sistema experimental muy sofisticado; en particular cuando este material es estructurado de tal forma que su función dieléctrica varíe periódicamente en el espacio, es llamado cristal fotónico [?]. Estas nanoestructuras artificiales permiten la manipulación y transporte de ondas de luz, en analogía con la movilidad y transporte de electrones en un cristal. Asimismo, presentan bandas fotónicas prohibidas dentro de la estructura (análogamente como los electrones en un cristal), en donde la luz no puede propagarse con ciertas energías y direcciones. La luz que no se propaga ni se absorbe es entonces reflejada. Sin embargo, en los cristales fotónicos la luz incidente cambia sus propiedades reflectivas dependiendo del ángulo de incidencia; esto genera un corrimiento de la banda prohibida hacia el azul conforme aumenta el ángulo de incidencia. Este es un efecto no deseado cuando se requiere una reflectancia omnidireccional (es decir que la reflectancia no depende del ángulo de incidencia, para un intervalo de longitudes de onda). Asimismo, las regiones de omnidireccionalidad para cristales fotónicos fabricados con silicio poroso, han sido principalmente en el infrarrojo medio y cercano, debido a la baja absorción de luz en este rango. En este capítulo presentamos el diseño y fabricación de una estructura dieléctrica con reflectancia omnidireccional, que cubre todo el rango visible, basada en multicapas de silicio poroso.

2 Fabricación de silicio poroso

2.1 Anodización electroquímica

En esta sección se describe el proceso de fabricación de multicapas del SP, por el método de anodización electroquímica de obleas de Si. Se detalla el arreglo experimental utilizado en la fabricación de muestras de SP y el proceso de oxidación de la estructura llevados a cabo para obtener las propiedades de omnidireccionalidad reflectiva.

La fabricación de SP consiste en una técnica simple y económica, basada en la anodización electroquímica de obleas de silicio cristalino en una solución de ácido fluorhídrico. Diversos estudios realizados acerca de la interfaz Si-HF muestran que los principales requerimientos para la formación de SP son [2]:

1. La oblea de Si debe estar polarizada anódicamente. Esta polarización corresponde al Si dopado tipo p, mientras que para el Si dopado tipo n corresponde la polarización inversa.
2. Se debe aplicar luz en el caso del Si dopado tipo n.
3. Se deben aplicar corrientes por debajo de un valor crítico j_c .

Las primeras dos condiciones son debidas al hecho de que los huecos son consumidos durante el proceso de anodizado. Cuando la tercera condición es violada, la reacción es limitada por transferencia de masa a la solución: los huecos son acumulados en la interfaz Si-HF y ocurre el electropulido. En la figura 1 se muestra un esquema de tres pasos llevados a cabo para la fabricación de SP. Se comienza cortando una obleas de Si cristalino en pedazos de aproximadamente $2 \times 2 \text{ cm}^2$. Las obleas están dopadas con boro y tienen una resistividad de 0.002 a 0.005 $\Omega \cdot \text{cm}$, con orientación (100). Enseguida se remueve la capa de óxido de la superficie de la oblea en una solución diluida de HF. Posteriormente se coloca en una celda de teflón con una solución de HF y etanol, y se procede al ataque electroquímico. Después de concluir la reacción, se retira la oblea de la celda y se enjuaga con etanol. Posteriormente se introduce en pentano al 99.6 % y se evaporan los residuos con nitrógeno gaseoso. Finalmente se puede oxidar térmicamente en un horno (paso opcional).

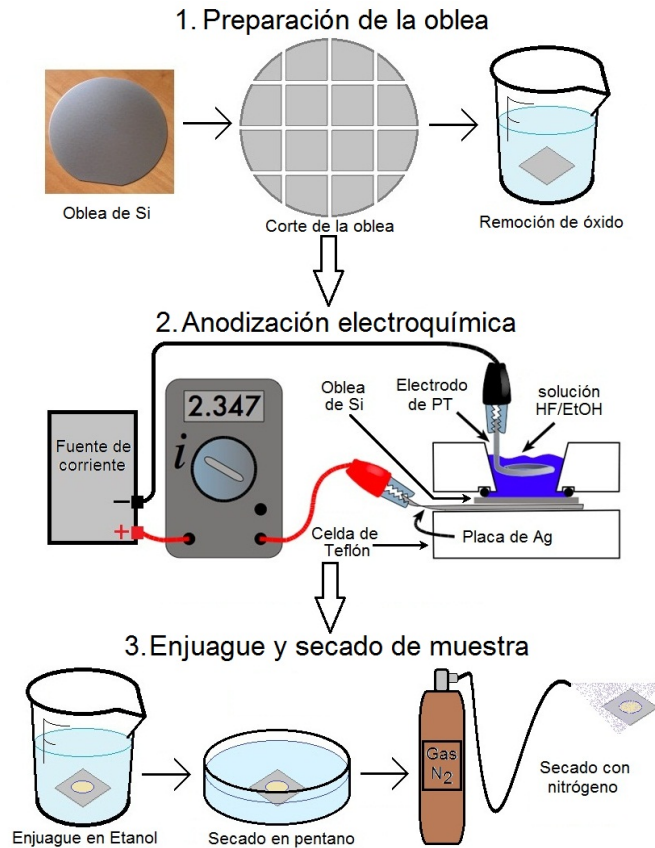


Fig. 1 Proceso de fabricación de muestras de silicio poroso. A partir de una oblea de Si (de orientación (100)), se procede a cortarla en pedazos de aproximadamente $2 \times 2 \text{ cm}^2$ y se introduce en una solución de HF al 2 % durante 20 minutos. Posteriormente se coloca en la celda de anodizado con una solución de HF/Etanol 1:1 y se procede al ataque electroquímico. Enseguida se enjuaga la muestra con etanol al 99.9 % y luego se seca con pentano al 99.6 %. Finalmente se evaporan los residuos de pentano con nitrógeno gaseoso.

2.2 Oxidación térmica

Al terminar la fabricación de la muestra de SP, se obtiene un estructura interconectada de Si, cuya superficie se encuentra hidrogenada. Las propiedades ópticas de la muestra resultante permanecen iguales por algunos días, pero eventualmente la muestra comienza a oxidarse ligeramente debido al oxígeno presente en el medio ambiente. A pesar de que no se observa un cambio muy drástico en las propiedades

ópticas de reflectividad conforme se oxida a temperatura ambiente, muchas veces es necesario recubrir intencionalmente la superficie con una capa de óxido que sirve para estabilizar, o funcionalizar la superficie. En algunos casos, el óxido de silicio sirve como un intermediario para unir químicamente alguna molécula [3]. Esta oxidación se lleva a cabo por medio de una reacción de O_2 con SP a una temperatura de entre 600 a 900°C y es en general de mayor espesor que el obtenido por oxidación al medio ambiente en varios días.

Al oxidar térmicamente el SP, se forma una capa de óxido de silicio amorfo (SiO_x) que recubre por completo la superficie porosa. El espesor de la capa de óxido varía dependiendo del tiempo de exposición de la muestra. El sistema para oxidar el silicio consta de un horno de inducción (cuya temperatura puede variar gradualmente desde 25 hasta 1000 °C) con una conexión sellada a un tanque de oxígeno. La oxidación del Si puede realizarse a cualquier temperatura por arriba de la temperatura ambiente; sin embargo, el proceso es demasiado lento cuando la temperatura está por abajo de los 600 °C (desde horas hasta días para lograr películas de SiO_x de 10 nm de espesor). Usualmente la oxidación del SP se lleva a cabo a 800 °C durante algunos minutos. Esto genera una capa de óxido de 20 a 50 nm que recubre la superficie del poro. Cuando la exposición se da en un tiempo prolongado, se obtiene la oxidación total de la muestra generando sílica porosa.

3 Cálculo de la reflectancia en un sistema de multicapas dieléctricas

En esta sección se describe la teoría para el cálculo de la reflectancia de un sistema de multicapas dieléctricas, por el método de la matriz de transferencia. Esta teoría es utilizada más adelante para simular los espectros de reflectividad de las estructuras fotónicas fabricadas con silicio poroso.

Supongamos un sistema unidimensional de capas dieléctricas de distintos índices de refracción y espesores, depositadas sobre un sustrato dieléctrico semi-infinito. Tal estructura se puede describir matemáticamente por

$$n(x) = \begin{cases} n_0, & x < x_0, \\ n_1, & x_0 < x < x_1, \\ n_2, & x_1 < x < x_2, \\ \vdots & \vdots \\ n_N, & x_{N-1} < x < x_N, \\ n_s, & x_N < x \end{cases} \quad (1)$$

donde n_l es el índice de refracción de la l -ésima capa, x_l es la posición de la interfase entre la l -ésima capa y la capa $l + 1$, n_s es el índice de refracción del sustrato y n_0 el índice de refracción del medio incidente. Los espesores de las capas estan dados por

$$d_1 = x_1 - x_0, \quad (2)$$

$$d_2 = x_2 - x_1, \quad (3)$$

$$\vdots$$

$$d_N = x_N - x_{N-1} \quad (4)$$

La solución para el campo eléctrico de una onda plana que viaja en el sistema de multicapas, se puede escribir como $E = E(x)e^{i(\omega t - k_z z)}$, donde

$$E(x) = \begin{cases} A_0 e^{-ik_{0x}(x-x_0)} + B_0 e^{ik_{0x}(x-x_0)}, & x < x_0, \\ A_l e^{-ik_{lx}(x-x_l)} + B_l e^{ik_{lx}(x-x_l)}, & x_{l-1} < x < x_l, \\ A_s e^{-ik_{sx}(x-x_N)} + B_s e^{ik_{sx}(x-x_N)}, & x_N < x \end{cases} \quad (5)$$

donde k_{lx} es la componente x del vector de onda de la l -ésima capa

$$k_{lx} = \sqrt{\left(n_l \frac{\omega}{c}\right)^2 - k_z^2} \quad (6)$$

y está relacionado con el ángulo de incidencia θ_l por

$$k_{lx} = n_l \frac{\omega}{c} \cos(\theta_l). \quad (7)$$

Asimismo, A_l y B_l representan las amplitudes de las ondas planas en cada interfase $x = x_l$. De forma matricial podemos relacionar las amplitudes del campo como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} D_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\begin{pmatrix} A_l \\ B_l \end{pmatrix} = P_l D_l^{-1} D_{l+1} \begin{pmatrix} A_{l+1} \\ B_{l+1} \end{pmatrix}, \quad l = 1, 2, \dots, N \quad (9)$$

donde $N + 1$ representa el sustrato (capa s), $A_{N+1} = A_s$, $B_{N+1} = B_s$ y las matrices pueden escribirse como

$$D_l = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ n_l \cos(\theta_l) & -n_l \cos(\theta_l) \end{pmatrix} \quad \text{onda TE} \quad (10)$$

y

$$D_l = \begin{pmatrix} \cos(\theta_l) & \cos(\theta_l) \\ n_l & -n_l \end{pmatrix} \quad \text{onda TM} \quad (11)$$

respectivamente, y

$$P_l = \begin{pmatrix} e^{i\phi_l} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi_l} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

con

$$\phi_l = k_{lx} d_l. \quad (13)$$

La relación entre A_0 , B_0 y A_s , B_s se puede escribir como

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_s \\ B_s \end{pmatrix} \quad (14)$$

en donde

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = D_0^{-1} [\prod_{l=1}^N D_l P_l D_l^{-1}] D_s \quad (15)$$

y donde N es el número de capas, A_0 y B_0 son las amplitudes del campo en el medio 0 en $x = x_0$, mientras que A_s y B_s son las amplitudes de las ondas planas en el medio s en $x = x_N$. La matriz \mathbf{M} es llamada matriz de transferencia.

La reflectancia de la estructura multicapa se calcula de los elementos la matriz de transferencia M_{11} y M_{21} como:

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2, \quad (16)$$

mientras que la transmitancia se calcula a partir del elemento M_{11} como

$$T = \frac{n_s \cos(\theta_s)}{n_0 \cos(\theta_0)} \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (17)$$

4 Espejos omnidireccionales en la región visible

En esta sección mostramos el diseño y fabricación de un espejo omnidireccional que cubre todo el rango visible, basado en una estructura dieléctrica multicapa de silicio poroso. El sistema consta en una estructura de periodo variable, en donde el espesor físico de cada periodo es incrementado por medio de una función envolvente de la forma $f(x) = Cx^\alpha$. Posteriormente se fabricó la muestra para comparar los resultados predichos teóricamente con la medición experimental de la banda fotónica a distintos ángulos. Asimismo se tomó una secuencia fotográfica de la muestra para confirmar la banda fotónica omnidireccional (BFO) para ángulos de incidencia mayores a los medidos por el espectrofotómetro.

Como se mencionó anteriormente los espejos omnidireccionales reflejan toda la luz incidente independiente del ángulo de incidencia dentro de un cierto rango de longitudes de onda [4]. Muchos grupos han diseñado teóricamente y fabricado espejos omnidireccionales a base de estructuras dieléctricas multicapa en diferentes regiones del espectro electromagnético (EM), debido a su alta reflectividad, versatilidad y la variedad de aplicaciones [5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13]. Sin embargo, los esfuerzos por realizar espejos dieléctricos omnidireccionales (EDO) han sido principalmente para el rango infrarrojo (IR) cercano y medio. Para la región visible, un EDO requiere de la fabricación de multicapas con espesores más delgados en comparación con el rango IR. Por ejemplo, Park *et al.*, fabricaron una estructura de cuatro pares de capas a base de GaAs/AlAs usando la técnica de crecimiento epitaxial y lograron obtener una banda omnidireccional de

aproximadamente 90 nm para la región visible (desde 710 hasta 800 nm) [14]. Lin *et al.*, fabricaron una estructura de 12 pares de capas a base de $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ crecidas por el método de evaporación con pistola de electrones y obtuvieron una BFO de 24 nm alrededor de los 532 nm [15]. Asimismo, la mayoría de las técnicas usadas para la fabricación de estructuras multicapa dieléctricas, requieren una instrumentación sofisticada y cara, además de un tiempo de crecimiento relativamente largo. Un método económico, fácil y rápido para producir estructuras dieléctricas multicapa ha sido la anodización electroquímica de obleas de silicio, lo cual resulta en la formación de silicio poroso.

Por otro lado, los espejos omnidireccionales de SP han sido fabricados principalmente en la región infrarroja [16, 17, 18, 19, 20] debido a que presentan muy poca absorción y dispersión, en comparación con los espejos metálicos. Sin embargo, en el rango visible, la fabricación de espejos omnidireccionales de SP se ha logrado solamente para pequeñas regiones del espectro. Por ejemplo, Estevez *et al.*, en 2008, mostraron una BFO desde 680 hasta 701 nm (al rededor de 21 nm) [16]. A pesar de su fácil diseño teórico del perfil de refracción, la fabricación del espejo omnidireccional visible en SP ha sido un reto debido a las siguientes dificultades:

a) La naturaleza del Si provoca que absorba y disperse luz desde el ultravioleta lejano hasta la región del azul [21] y por lo tanto dificulta la reflectancia del espejo en esta región. Para solucionar este obstáculo se requiere fabricar un mayor número de multicapas periódicas para incrementar la reflectividad [22], comparada con la fabricación de un espejo análogo en una región sin absorción. Sin embargo, conforme se incrementa el espesor físico y la porosidad de la estructura multicapa, ésta se vuelve más frágil y usualmente se fractura debido al incremento del estrés entre capas consecutivas [23, 24, 25].

b) Otra restricción experimental es la fabricación de las capas delgadas requeridas y el espesor total de la estructura. Como ejemplo, un espejo de Bragg de SP fabricado para 800 nm requiere capas de 100 y 133 nm, para índices de refracción de 2.0 y 1.5, respectivamente. Conforme el rango de reflectancia cambia hacia el azul, los espesores físicos requeridos de cada una de las capas decrece (aproximadamente a 50 nm). El diámetro promedio de los poros de una estructura típica mesoporosa es de alrededor de 20 nm, por lo tanto, el espesor requerido de cada capa está en el límite de resolución que define una capa porosa.

Por lo tanto, para estudiar y fabricar un espejo omnidireccional en la región visible es necesario resolver tanto teórica como experimentalmente los problemas anteriormente mencionados. En esta sección se extendió el trabajo teórico y experimental hecho por Bruyant *et al.*, [17] y Ali *et al.*, [26], de forma sistemática para hallar el conjunto de parámetros óptimos que permitan la obtención un espejo omnidireccional en toda la región visible, fabricado con SP.

En la figura 2(a) se muestra un esquema del perfil del índice de refracción para la estructura de silicio poroso, como función de la profundidad de la estructura (x). La estructura fotónica consiste en 501 capas tipo Bragg, con valores de índice de refracción de 2.1 y 1.4, los cuales corresponden a las porosidades de 51 y 76%, respectivamente. El espesor físico de cada capa fue modulado por una función envolvente mostrada en la Figura 2(b).

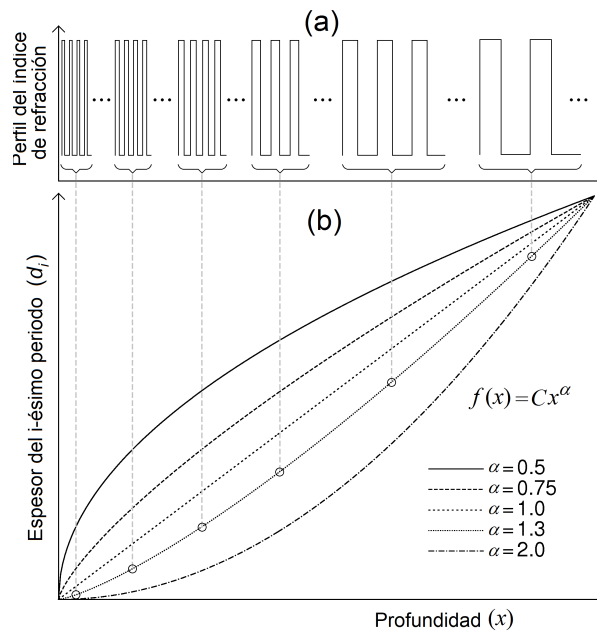


Fig. 2 (a) Esquema del perfil del índice de refracción como función de la profundidad del espejo. Los periodos tipo Bragg son alargados conforme se incrementa la profundidad y modulados por una función envolvente $f(x) = Cx^\alpha$. La Figura (b) muestra un conjunto de funciones moduladas por diferentes potencias. La longitud del primer y último periodos de la estructura fueron fijados.

Para hallar el valor de α , que genera la mayor BFO, se realizaron simulaciones para el espectro de reflectancia como función de la longitud de onda, para un intervalo continuo de valores de α . En dicho intervalo se analizó cual de ellos genera la mayor reflectancia posible. En la figura 3 se muestran las curvas de contorno para la reflectancia como función de la longitud de onda y el valor de α , en distintos ángulos de incidencia: (a) 0° , (b) 45° y (c) 85° . Se puede observar que conforme se incrementa el valor de α , el ancho de la banda va decreciendo; asimismo, conforme se incrementa el ángulo de incidencia, la reflectancia de la multicapa es cada vez más deficiente para valores cada vez más grandes de α (figuras 3(a), (b) y (c)). En la figura 3(c) se puede observar un pequeño intervalo de α que cubre por completo el rango visible con una reflectancia cercana al 100% y que a su vez se mantiene con una alta reflectancia en los otros dos ángulos de incidencia (0 y 45°). La figura 3(d) muestra un acercamiento de una zona de la imagen 3(c) en donde se puede observar un intervalo al rededor de $1.1 < \alpha < 1.4$ en donde la reflectancia está por arriba del 99.4% para la zona de longitudes de onda entre 400 y 800 nm (abarcando el rango visible). De esta forma si el valor de α está fuera del intervalo mencionado, la reflectancia de la multicapa es deficiente, para cualquier ángulo de incidencia.

Por otro lado, el espesor total de la muestra es un factor importante y determinante en el tiempo de crecimiento y la estabilidad mecánica de la estructura [27]. Por lo tanto, se analizó la dependencia entre el espesor de la multicapa y el valor de α . En la figura 4 se observa que conforme el valor de α se incrementa, el espesor físico decrece, lo que es bueno para aplicaciones en nanotecnología; sin embargo, la figura 3 muestra que la reflectancia decrece conforme el valor de α aumenta. De esta forma, es conveniente tomar valores de α que permitan el crecimiento de una multicapa con el menor espesor posible pero a la vez con una alta reflectividad. Asimismo, el tiempo de fabricación de la multicapa se incrementa conforme el espesor de la estructura es mayor, y entre más gruesa sea la estructura, es más frágil [27]. Por lo tanto, se seleccionó cualitativamente el valor de $\alpha = 1.3$ como la mejor opción para la fabricación de una muestra omnidireccional de SP con el menor espesor posible, menor tiempo de fabricación, buena estabilidad mecánica y una alta reflectancia omnidireccional en el rango visible.

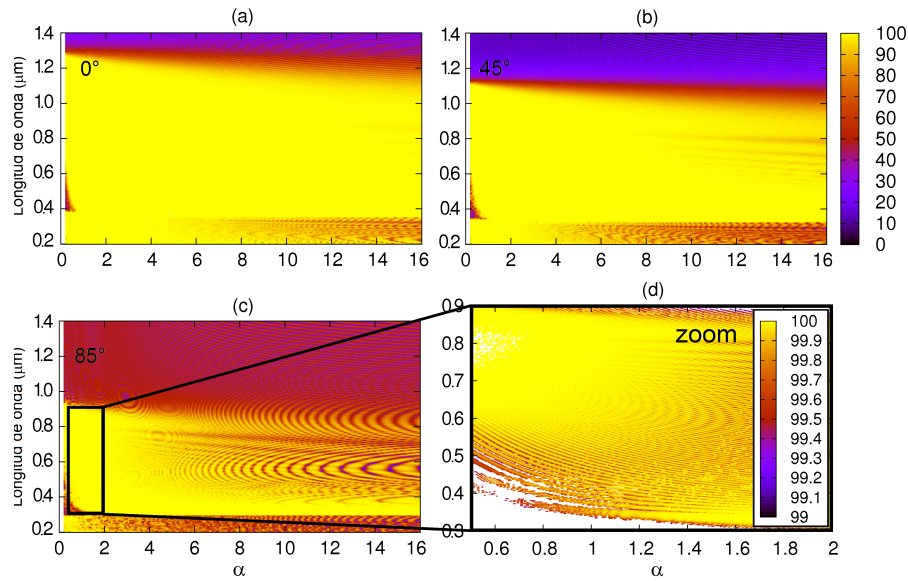


Fig. 3 Gráfico de contorno para la respuesta reflectiva de la multicapa dieléctrica, como función de la longitud de onda y el valor de α . Las simulaciones corresponden a los ángulos de incidencia de (a) 0°, (b) 45° y (c) de 85°, respectivamente. La figura (d) muestra un acercamiento (zoom) de una pequeña sección de la imagen (c), dentro del rango visible. La escala de colores en las imágenes (a), (b) y (c) indican el porcentaje de reflectividad desde 0 (negro) hasta 100% (amarillo), mientras que la imagen (d) indica otra escala desde 99 (negro) hasta 100% (amarillo). Las zonas blancas en (d) corresponden a datos con valores fuera de rango de su respectiva escala.

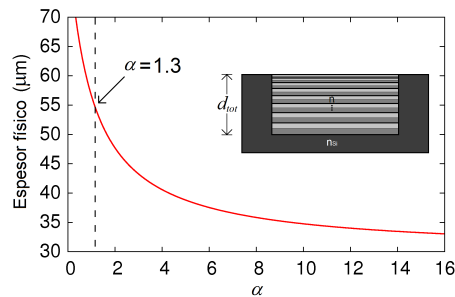


Fig. 4 Gráfico del espesor físico como función del valor de α para la estructura estudiada. La línea vertical discontinua muestra el valor de α seleccionado.

La figura 5 muestra la simulación para la curva de contorno de los modos electromagnéticos transversales eléctrico (TE ó s , figura 5(a)) y magnético (TM ó p , figura 5(b)), como función del ángulo de incidencia y la longitud de onda. Conforme el ángulo de incidencia se in-

crementa, la banda fotónica decrece, como ha sido reportado en [28]. En la figura 5(b) se puede observar que el modo EM p tiene la menor BFO comparado con el modo s (figura 5(a)), en concordancia con reportes anteriores [20]. Las simulaciones muestran una reflectancia prácticamente al 100% para cualquier ángulo de incidencia entre 0 y 90° abarcando toda la región del espectro visible y un poco más (desde los 360 hasta los 900 nm).

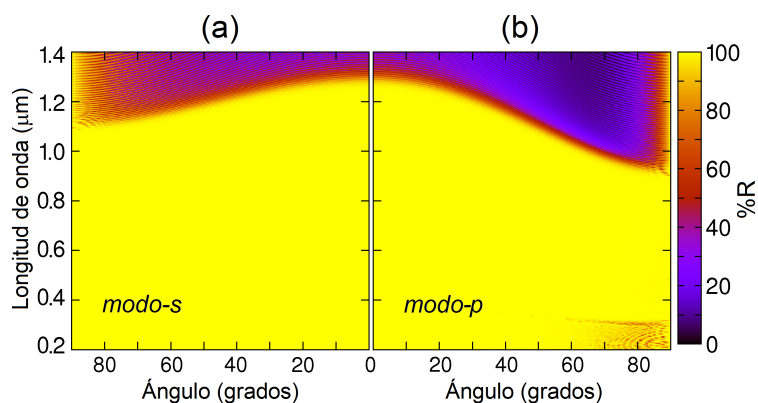


Fig. 5 Gráfico de contorno para el espectro de reflectancia como función del ángulo de incidencia y la longitud de onda. Las figuras (a) y (b) muestran los modos EM s y p , respectivamente.

Después de realizar las simulaciones para la reflectancia del espejo omnidireccional, se procedió a la fabricación de la muestra como se describió la sección de fabricación. En la figura 6 se muestra el espectro de reflectancia medido para los ángulos de incidencia de 8 y 68°. Se puede observar un decremento en el espectro de reflectancia acompañado de un corrimiento hacia el azul, conforme se incrementa el ángulo de incidencia, justo como fue predicho teóricamente en la figura 5 para ambos modos EM. A pesar del corrimiento mencionado, se midió una BFO dentro rango visible para 8 y 68° para las polarizaciones s y p , resultando en una banda omnidireccional de 409 nm de ancha, desde 396 hasta 805 nm con más del 95% de reflectancia. En la parte derecha de la figura 6 se muestra una secuencia fotográfica de la muestra para los ángulos de incidencia de: 15, 25, 35, 45, 60, 70 y 85° (de arriba hacia abajo, respectivamente; medidas con respecto a la normal de su superficie). Se puede observar una reflectancia tipo metal del centro de la oblea para los distintos ángulos de visión, lo

cual provee evidencia física de los espectros de reflectancia del espejo mostrado en la parte izquierda, así como evidencia para ángulos de incidencia mayores. Para el rango visible, el espejo fabricado mostró un incremento de la banda en un factor 4.4, 16.6 y 4.4 veces el reportado en multicapas dieléctricas por Park *et al.*, [14], Lin *et al.*, [15] y Depoura *et al.*, [29] en otros sistemas, respectivamente. En comparación con el último espejo omnidireccional reportado y fabricado en silicio poroso por Estevez *et al.*, nuestras mediciones mostraron un incremento de la banda omnidireccional de 19 veces [16].

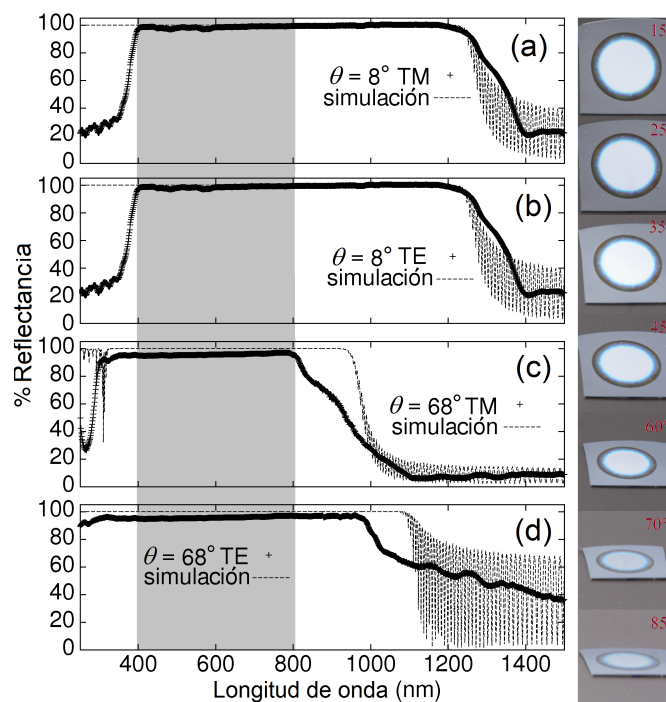


Fig. 6 Medición experimental (+++) y simulación (- -) del espectro de reflectancia, como función de la longitud de onda para (a) 8° TM, (b) 8° TE, (c) 68° TM y (d) 68° TE. La banda gris muestra la región omnidireccional (desde 396 hasta 805 nm), tomada por arriba del 95 % de reflectancia. Las imágenes de la derecha muestran una secuencia fotográfica del espejo de SP fabricado, tomadas para los ángulos de incidencia de 15, 25, 35, 45, 60, 70 y 85° medidos con respecto a la normal.

La oxidación de la muestra jugó un papel muy importante en la obtención del espejo blanco, aumentando la reflectividad y dismi-

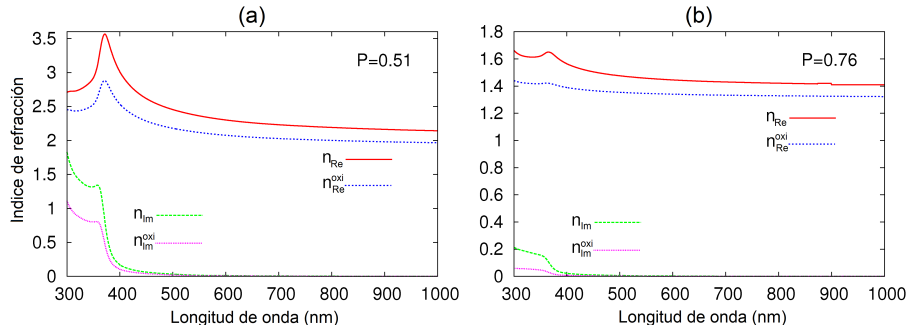


Fig. 7 Parte real (n_{Re}) e imaginaria (n_{Im}) del índice de refracción como función de la longitud de onda, simulados con la teoría de Bruggeman para el silicio poroso, con y sin oxidación parcial; los paneles (a) y (b) corresponden a las porosidades de 51 y 76 %, respectivamente.

uyendo la absorción del espejo. En la figura 7 se muestran las curvas de la parte real e imaginaria del índice de refracción del silicio poroso, antes y después de tener una capa de óxido. Se utilizó la teoría del medio efectivo para calcular los índices de refracción con las porosidades de 51 y 76 %. En la figura 7(a) se puede observar que la parte real del índice de refracción decrece a la vez que se hace más plana y constante. Para la parte imaginaria, se observa una disminución de aproximadamente el 30 % de la absorción que tenía antes de oxidarse. Este comportamiento se ve más marcado en la figura 7(b), en donde la parte real permanece casi constante y la parte imaginaria se reduce más del 50 % de su valor inicial después de la oxidación. Esto se debe a que el óxido de silicio genera una capa sobre la superficie del poro disminuyendo la cantidad de Si y aumentando la cantidad de SiOx. Por esta razón, la mezcla final de índices de refracción es el resultado de un medio efectivo, cuyas propiedades corresponden a un promedio de las propiedades de cada sustancia. En este sentido, el índice de refracción final será una mezcla de los índices de refracción del Si, el aire y el SiOx. Asimismo, el SiOx no absorbe como el Si cristalino y por lo tanto disminuye significativamente la absorción en la mezcla de medios dieléctricos. Por esta razón, el SP presenta una reducción significativa en la absorción y un comportamiento *semi-constante* para la parte real del índice de refracción. Esto implica que las multicapas parcialmente oxidadas tienen la capacidad de incre-

mentar su reflectancia en las zonas ultravioleta y azul, ensanchando la banda omnidireccional, lo cual no se había podido lograr previamente para estas zonas. Por otro lado, el ancho de la banda omnidireccional con multicapas de periodo variable, es mayor que el obtenido cuando se superponen espejos de Bragg (demostrado en [17]), diseñados para longitudes de onda cercanas como en el caso reportado por Xifré *et al.*, [18]. Esto se debe a que las multicapas de periodo variable permiten una interferencia constructiva *cuasicontinua* para un intervalo omnidireccional de longitudes de onda. Además, se demostró que esta variación está reforzada en las capas más delgadas, ya que el valor de α es mayor que 1 y le corresponde una función creciente como potencia. Esto es porque las longitudes de onda cercanas al azul, necesitan una mayor cantidad de capas reflectivas que para longitudes de onda cercanas al rojo, para generar el mismo ancho de banda fotónica.

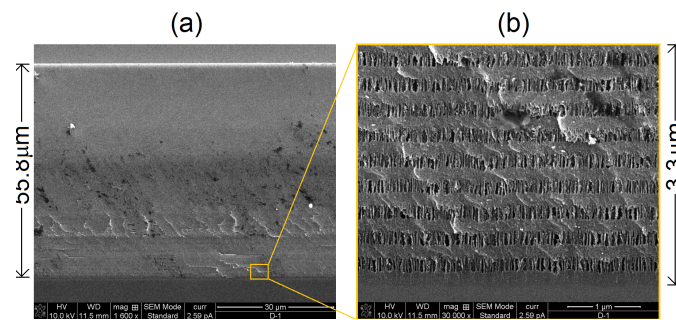


Fig. 8 (a) Microscopía electrónica de barrido de la sección transversal del espejo omnidireccional fabricado con espesor total de $55.8 \mu\text{m}$. La figura (b) muestra un acercamiento de una sección de $3.3 \mu\text{m}$ la base del espejo.

La figura 8 muestra una imagen de microscopía electrónica de barrido de la sección transversal de la muestra. Se observa una buena concordancia entre el valor obtenido para el espesor total de la muestra fabricada ($55.8 \mu\text{m}$) y el predicho teóricamente ($55.0 \mu\text{m}$). En el panel 8(a) se puede ver un ligero estriado horizontal que corresponde a cada una de las 501 capas que conforman la muestra. El panel 8(b) muestra un acercamiento de la base del espejo. Esta imagen revela la

estructura de las capas de alta y baja porosidad y la base de silicio cristalino.

Se mostró la fabricación de un espejo omnidireccional dieléctrico para la región completa del espectro visible, basado en una nanoestructura multicapa de silicio poroso. La estructura fotónica se diseñó usando un perfil refractivo de periodo variable, modulado con una función envolvente específica con la forma $f(x) = Cx^\alpha$. Se halló un intervalo de $1.1 < \alpha < 1.4$ que genera una banda fotónica omnidireccional con una alta reflectancia. Se seleccionó el valor de $\alpha = 1.3$ como la mejor opción para la fabricación de una muestra. Las simulaciones la BFO mostraron una reflectancia cercana al 100% para todo el rango visible, para los modos electromagnéticos TE y TM. La estructura multicapa fue fabricada mostrando buena estabilidad mecánica y una banda de reflectancia omnidireccional de 409 nm de ancho (desde 396 hasta 805 nm). La reflectancia fue medida para los ángulos de 8 y 68°, por arriba del 95 % de reflectividad, en los dos modos TE y TM. Se aplicó la teoría del medio efectivo para elucidar la baja absorción del espejo multicapa en la zona ultravioleta-azul, después de haberse oxidado parcialmente. La estructura fabricada tiene aplicaciones potenciales en la industria de los concentradores y celdas solares, como guía de ondas en telecomunicaciones y espejos para láseres en el visible, con bajo costo y fácil fabricación.

Bibliografía

1. cristal-fotonico Joannopoulos J D, Johnson S G, Winn J N, and Meade R D "Photonic Crystals Molding the flow of light" Edit. Princeton University Press 2008
2. Beale M I J, Benjamin J D, Uren M J, Chew N G, and Cullins A G 1985 J. of Crystal Growth **73** 622
3. King B H, Gramada A, Link J R, and Sailor M J 2007 Adv. Matter. **19** 4044
4. Xifré-Pérez E, Marsal L F, Pallarès J, and Ferré-Borrull J 2005 J. Appl. Phys. **97** 064503
5. Wang X, Hu X, Li Y, Jia W, Xu C, Liu X, and Zi J 2002 Appl. Phys. Lett. **80** 4291

6. Bria D, Djafari-Rouhani B, El Boudouti E H, Mir A, Akjouj A, and Nougaoui A 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 2569
7. Krumbholz N, Gerlach K, Rutz F, Koch M, Piesiewicz R, Kurner T, and Mittleman D 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 202905
8. Kim S-H and Hwangbo C K 2002 *Appl. Opt.* **41** 3187
9. Srivastava R, Shyam P, and Ojha S P 2008 *PIER B* **1** 197
10. Xi J-Q, Ojha M, Cho W, Plawsky J L, Gill W N, Gessmann T, and Schubert E F 2005 *Opt. Lett.* **30** 1518
11. Awasthi S K, Malaviya U, and Ojha S P 2006 *J. Opt. Soc. Am. B* **23** 2566
12. Kim J K, Gessmann T, Schubert E F, Xi J-Q, Luo H, Cho J, Sone C, and Park Y 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 013501
13. Temelkuran B, Thomas E L, Joannopoulos J D, and Fink Y 2001 *Opt. Lett.* **26** 1370
14. Park Y, Roh T-G, Cho C-O, Heonsu Jeon, Sung M G, and Woo J C 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 2770
15. Lin W, Wang G P, and Zhang S 2005 *J. Mod. Opt.* **52** 1155
16. Estevez J O, Arriaga J, Méndez Blas A, and Agarwal V 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 191915
17. Bruyant A, Lérondel G, Reece P J, and Gal M 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 3227
18. Xifré-Pérez E, Marsal L F, Ferré-Borrull J, and Pallarès J 2009 *Appl. Phys. B* **95** 169
19. Estevez J O, Arriaga J, Méndez Blas A, and Agarwal V 2009 *Appl. Phys. Lett.* **94** 061914
20. Ariza-Flores A D, Gaggero-Sager L M, and Agarwal V 2012 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **45** 015102
21. <http://refractiveindex.info/?group=CRYSTALS&material=Si>
22. Pavesi L, Mazzoleni C, Guardini R, Cazzanelli M, Pellegrini V, and Tredicucci A 1997 *La Revista del Nuevo Cimento* **20** 18
23. Ariza-Flores A D, Gaggero-Sager L M, and Agarwal V 2011 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **44** 155102
24. Manotas S, Agulló-Rueda F, Moreno J D, Ben-Hander F, and Martínez-Duart J M 2001 *Thin Solid Films* **401** 306
25. Manotas S, Agulló-Rueda F, Moreno J D, Martín-Palma R J, Guerrero-Lemus R, and Martínez-Duart J M 1999 *Appl. Phys. Lett.* **75** 977
26. Ali N B and Kanzari M 2010 *J. Mod. Opt.* **57** 287

27. Kim H-S, Zouzounis E C, and Xie Y-H 2002 Appl. Phys. Lett. **80** 2287
28. Fink Y, Winn J N, Fan S, Chen C, Michel J, Joannopoulos J D, and Thomas E L 1998 Science **282** 1679
29. Depoura M, Ullal C K, Temelkuran B, and Fink Y 2001 Opt. Lett. **26** 1197

Cristales fotónicos basados en silicio poroso: Panorama actual

J. Octavio Estevez, J. Arriaga, Vivechana Agarwal

Resumen

Porous-silicon-based photonic crystals. A current overview

A review of the periodic systems that have been fabricated using porous silicon (PS), in one, two and three-dimensional systems is presented. Through electrochemical anodization of silicon, different one dimensional structures have been obtained and shown to have various technological applications, such as optical biosensors. Additionally, such structures have been used to demonstrate some physical phenomena such as Bloch oscillations and Zener tunneling for photons. Two particular examples of such structures, based on PS with applications in optical biosensors, have been analyzed.

Resumen

Se presenta una revisión actualizada de los principales sistemas de multicapas periódicas que se han fabricado usando silicio poroso (SP) tanto en una, dos y tres dimensiones. La anodización electroquímica

J. Octavio Estevez and V. Agarwal
Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, UAEM, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, CP 62210, Cuernavaca, Morelos, México. e-mail: vagarwal@uaem.mx

J. Arriaga
Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla, A.P. J-48, Puebla 72570, Puebla, México

del silicio ha permitido la obtención de diversas estructuras en una dimensión, las cuales han servido para diferentes aplicaciones tecnológicas, principalmente como biosensores ópticos, y para mostrar algunos fenómenos de la física como es el caso de las oscilaciones de Bloch y el tunelamiento Zener para fotones. Se presentan dos ejemplos de estructuras 1D basadas en SP que se han usado como biosensores ópticos.

1 Introducción

Es bien sabido que los sólidos cristalinos que se caracterizan por presentar periodicidad atómica impiden la propagación de los electrones con energías situadas en la llamada brecha de energía prohibida [1]. La existencia de dichas bandas de energía permitidas y brechas de energía prohibidas determinan muchas de las propiedades de los materiales semiconductores [2]. Debido a la analogía que existe entre los cristales semiconductores y los llamados cristales fotónicos (CF, arreglos periódicos de materiales dieléctricos), Yablonovitch propuso inhibir la propagación de la luz en materiales dieléctricos [3], mientras que Sajeev John lo hizo al estudiar la localización fuerte de fotones en superredes dieléctricas desordenadas [4]. En el CF, el “potencial” periódico es debido a una red de medios dieléctricos macroscópicos en lugar de átomos. Si las constantes dieléctricas de los materiales en el cristal son muy diferentes y la absorción de la luz por el material es mínima, entonces las dispersiones en las interfases pueden producir muchos de los fenómenos para los fotones (modos de luz) como el potencial atómico lo hace para los electrones. Una solución al problema de manipulación y control óptico es por consiguiente un cristal fotónico, un medio periódico dieléctrico con baja absorción. En particular, podemos diseñar y construir CFs con bandas prohibidas fotónicas impidiendo que la luz se propague en ciertas direcciones con frecuencias específicas. Los cristales fotónicos no solo pueden imitar las propiedades de las guías de ondas y cavidades, sino que también pueden ser escalables y aplicables a un amplio rango de frecuencias. Podemos construir un CF de una geometría dada con dimensiones de milímetros para control de microondas o con dimensiones de micras para el control en el infrarrojo. El cristal fotónico más simple

es un espejo dieléctrico (arreglo de cuarto de onda) de capas alternantes de diferentes materiales dieléctricos. La luz con longitud de onda apropiada, cuando incide sobre tal material periódico, es completamente reflejada. La razón es que la onda de luz es dispersada en las interfases de las capas y si el espaciamiento es el correcto, las múltiples dispersiones de las ondas interfieren destructivamente dentro del material. Los CFs son materiales ópticos que poseen características que no se encuentran en los materiales convencionales. Son candidatos prometedores para realizar todas las funciones ópticas de circuitos ópticos integrados o componentes de fibras ópticas. A diferencia de los cristales naturales o cristales semiconductores, los CFs son estructuras periódicas artificiales, aunque existen algunos ejemplos en la naturaleza [5, 6]. Este tipo de arreglos periódicos también los encontramos en la naturaleza. Miles de años en la evolución de algunas especies ha generado este tipo de estructuras en muchos sistemas vivos tales como insectos, mariposas, conchas de abulón y algunas plantas. La figura (1) muestra algunas fotos con sus respectivas imágenes TEM (Microscopía Electrónica de Trasmisión) de CFs naturales, donde se mencionan algunos ejemplos que pueden ser desarrollados en una área de la biología llamada “biomimética” (ver tabla 1). La mayoría de estas estructuras tienen arreglos periódicos en dos dimensiones como se observa en las imágenes de TEM (figura 1) y como se describe en la tabla 1. En años recientes surgió un gran interés en el uso de cristales fotónicos como un nuevo material que puede ser usado para el control de ondas electromagnéticas. Varias aplicaciones han sido propuestas y demostradas para CFs unidimensionales (1D), bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D) (ver figura 2). Por ejemplo, la localización de la luz en sistemas con defectos fue investigada teórica y experimentalmente [7]. Un ejemplo del desarrollo actual de la tecnología y la investigación en cristales fotónicos es la observación experimental de la densidad local de estados (DLDE) de los modos de Bloch en un CF-2D, usando un microscopio óptico basado en la catodoluminiscencia resuelta en el ángulo, donde junto con las propiedades del CF, es posible resolver propiedades por debajo de los 30 nm (ver figura (3))[8]. La importancia de conocer la DLDE es vital, debido a que es una cantidad fundamental en la interacción radiación-materia, ya que provee una medición directa para la probabilidad de la emisión espontánea y dispersión de la luz. De esta manera, conociendo LDOS en la nanoescala, muchas aplicaciones pueden surgir

tales como iluminación, *displays*, manejo de la luz en celdas solares, óptica cuántica y tecnología de la información.

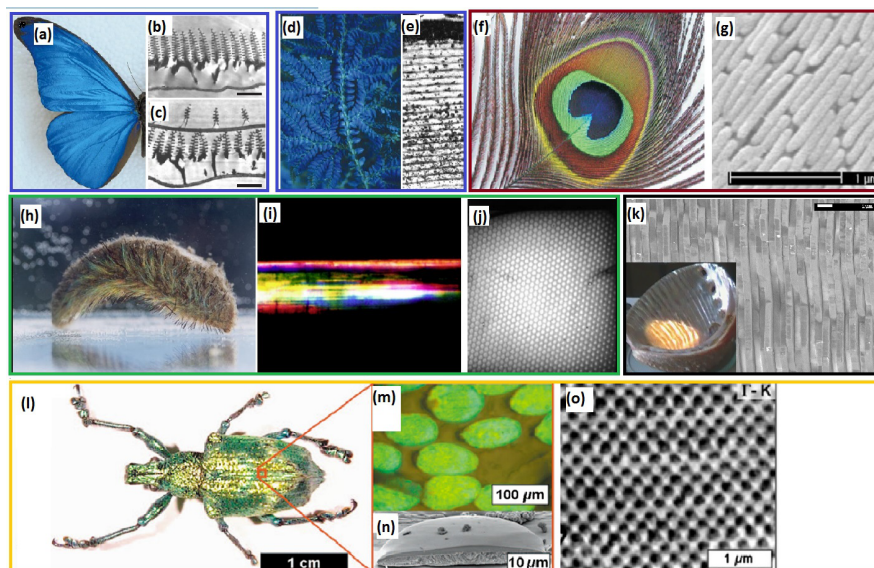


Fig. 1 Estructuras fotónicas en la naturaleza: (a) Color azul real de ala de una mariposa (*M. rhetenor*). (b) Imagen de TEM de la sección transversal de la ala de mariposa (*M. rhetenor*). (c) Imagen de TEM de la sección transversal de la especie *M. didius*. (d) Iridiscencia azul del helecho tropical de los montes (del género *Selaginella*). (e) Imagen de TEM de la sección transversal de una hoja joven de la planta *Diplazium Tomentosum*. (f) Iridiscencia de la pluma de un pavo real e (g) imagen de TEM de la misma. (h)-(i) Imagen gusano con arreglos estructurales que reflejan la luz en la región visible, (j) Imagen de TEM de la sección transversal de una de sus púas. (k) Imagen de SEM de la sección transversal de la concha de abulón tomada por nuestro grupo. (l)-(n) Insecto que presenta una estructura fotónica tridimensional (tipo diamante). (o) Imagen de TEM donde se muestra alguna dirección cristalina. Algunas de las Figuras fueron tomadas de [6, 9] y otras adaptadas de la tesis de maestría [10].

Para determinadas combinaciones de los materiales y determinadas geometrías, es posible obtener regiones de frecuencia prohibida para la propagación de las ondas electromagnéticas en una, dos y tres dimensiones, correspondientes a la periodicidad del CF (ver figura (2)). Muchas de las propiedades de los CFs se deducen a partir de su estructura de bandas, de la misma forma que en los semiconductores se deduce para los electrones [11, 12, 13]. En los CFs, la variación periódica de la constante dieléctrica, debido a la repetición periódica

Micro estructura óptica	Mecanismos ópticos	→	Efecto óptico	Materiales biomiméticos
Cristales fotónicos	Cristales fotónicos 2D en alas de pájaros	Frecuencias prohibidas via bordes de la banda	Iridiscencia	Fibra de cristal-fotónico
	Cristales fotónicos 2D en alas de mariposas	Luz guiada via bordes de la banda	Extracción de la luz	Superficie de cristal-fotónico en LED
	Cristales fotónicos 3D	Diferente orientación de los dominios en cristales fotónicos 3D	Bandas prohibidas fotónicas acumuladas	Color estructural omnidireccional

Table 1 Microestructuras en la naturaleza que exhiben efectos ópticos a través de mecanismos electromagnéticos y sus correspondientes materiales ópticos biomiméticos. Adaptado de la referencia[5].

de los materiales, es la que juega el papel equivalente al potencial periódico de los semiconductores. En el caso de los cristales fotónicos bidimensionales, la forma compleja de su estructura de bandas da origen a nuevos e interesantes fenómenos abriendo un campo conocido como óptica cristalina fotónica. Esto ha permitido la fabricación de superprismas y supercolimadores [14, 15]. Un prisma fabricado con un CF es muy sensible a la variación tanto de la dirección de incidencia como de la longitud de onda de la radiación electromagnética, obteniéndose en algunos casos y al aplicar directamente la ley de *Snell*, índices de refracción negativos [16, 17]. La propiedad más importante de los cristales fotónicos es su banda prohibida fotónica, ya que ésta impone fuertes condiciones sobre la propagación de la radiación electromagnética dentro de la estructura. Este tipo de estructuras presentan una alta reflectividad sobre un rango ancho de longitudes de onda, si tanto los índices de refracción como los grosores de las capas constituyentes se seleccionan adecuadamente.

Otras propiedades que presenta los cristales fotónicos son: el aumento local del campo, la dispersion anómala de la velocidad de grupo, y la dispersion anómala en el índice de refracción. Se puede construir una amplia variedad de CFs con diferentes materiales dieléctricos [18]. De todos los materiales considerados en la fabricación de este tipo de estructuras, el silicio es el que recientemente ha llamado la atención de los investigadores debido a su potencialidad para utilizarlo en diferentes aplicaciones [19]. Una variación periódica en los índices de refracción se consigue mediante la variación periódica de capas de silicio con diferente porosidad (silicio poroso) [20, 21, 22]. La porosidad del silicio es una cantidad que puede controlarse con bastante precisión durante el proceso de fabricación por ataque electroquímico

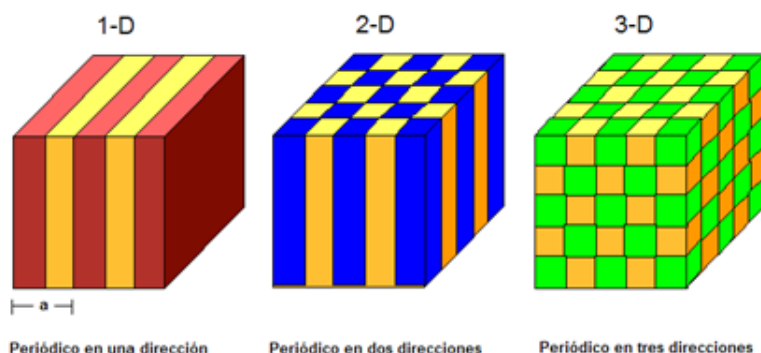


Fig. 2 Esquema de CFs en una, dos y tres dimensiones. Los colores diferentes representan materiales con diferente constante dieléctrica. Una de las propiedades de un CF es la periodicidad del material a lo largo de uno o más ejes. Figuras tomadas de [18].

[?, 24] permitiendo obtener un amplio rango de índices de refracción (aproximadamente de 1.2 a 2.8). Seleccionando apropiadamente los parámetros, es posible fabricar estructuras fotónicas basadas en SP para formar CFs con periodicidad dieléctrica en una dimensión (1D), dos dimensiones (2D), y tres dimensiones (3D) (ver figuras (4)-(6)), donde los grosores finales de las estructuras y la localización de las bandas prohibidas fotónicas, pueden ser sintonizadas en diferentes regiones del espectro electromagnético.

2 Cristales fotónicos fabricados con SP

Cristales fotónicos 1D: Las superredes fotónicas 1D basadas en SP han permitido la demostración de interesantes fenómenos ópticos análogos al caso electrónico tales como, oscilaciones de Bloch, tunelamiento Zener, localización de Anderson y switch ópticos, etc [25, 26, 27, 28, 29, 30]. Por otra parte, se han fabricado sistemas periódicos [31]-[52], cuasiperiódicos, y aperiódicos [53, 54, 55]. Efectos interesantes tales como refracción negativa han sido reportados cuando se considera luz que se propaga cerca de los bordes de la banda prohibida en multicapas de SP [56, 57].

Cristales fotónicos 2D: Por otro lado, la fabricación de estructuras basadas en SP con una banda prohibida fotónica en 2D requieren de

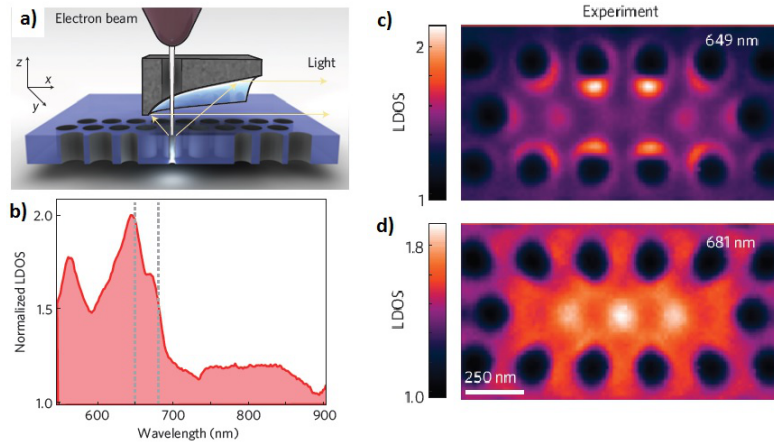


Fig. 3 (a) Esquema del arreglo experimental para medir la DLDE: un haz de electrones excita localmente el cristal fotónico 2D y la luz emitida es colectada por un espejo parabólico colocado por arriba de la muestra la cual es enviada a un espectrómetro o a una cámara CCD (charge-coupled device). El escaneo del haz de electrones permite un mapeo espacial por debajo de longitudes de ondas más profundas de la DLDE. (b) Medición del espectro de resonancia de la cavidad medido en el centro de la cavidad normalizado con el espectro de una membrana estructurada. Los modos de la cavidad exhiben un incremento de la DLDE de un factor de 2 a la resonancia localizada. (c)-(d) Mapas medidos de la de una cavidad de cristal fotónico L3 (periodo de la red $a=330$ nm, diámetro de los agujeros $d=230$ nm) a la frecuencia de los dos modos de la cavidad, 649 y 681 nm, respectivamente. Figuras adaptadas de [8].

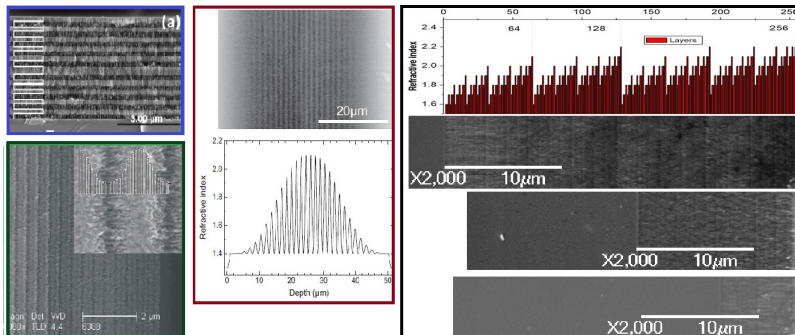


Fig. 4 Estructuras 1D basadas en SP: Espejos reflejantes (recuadro azul). Espejos omnidireccionales con perfil Gaussiano (recuadro en verde). Filtros rugate (recuadro en rojo). Estructura determinista-aperiódica secuencia 1-s (recuadro en negro). Adaptado de la referencias [58, 45, 55].

una pre-estructuración de la superficie de silicio antes de realizar el crecimiento por anodización electroquímica. Por ejemplo, se debe de usar litografía por interferometría para definir las redes periódicas

(cuadradas o triangulares) donde ocurrirá la formación de los poros sobre la superficie del silicio dopado moderadamente. Las estructuras 2D también pueden ser obtenidas usando una variación del potencial sobre el lado opuesto de la muestra durante la formación de las multicapas. Esta técnica permite una fabricación de filtros distribuidos espacialmente sobre escalas de tamaño milimétrico [59]-[72].

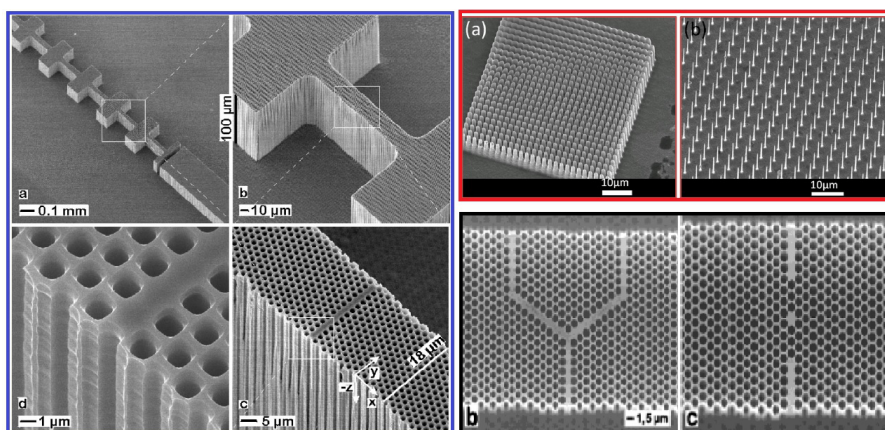


Fig. 5 Estructuras 2D basadas en SP: Guía de onda que opera en la región del IR (recuadro en azul), adaptado de referencia [68]. Arreglo periódico de agujas (recuadro rojo), adaptado de referencia [63]. guías de onda con defecto puntual (recuadro en negro). Adaptado de la referencia [72].

Cristales fotónicos 3D: Por último, para fabricar estructuras con una banda prohibida completa en 3D son necesarios materiales con constantes dieléctricas altas en la región visible. Los CFs en 3D son más complicados de fabricar, aunque ya han sido fabricadas diferentes estructuras usando una combinación de diferentes técnicas. También, diferentes sistemas 3D con defectos han sido realizados para la incorporación de materiales con funcionalidades avanzadas [73]-[80].

En resumen, los CFs 1D, 2D y 3D presentan varias propiedades ópticas no disponibles en el silicio cristalino y que ya han encontrado muchas aplicaciones tales como espejos de Bragg, microcavidades ópticas de Fabry-Perot, filtros rugate, multicapas corrugadas, y muchos otros dispositivos que son usados particularmente en varios tipos de procesamiento óptico y biosensado. Diferentes aplicaciones muy prometedoras tales como espejos altamente reflejantes para sistemas de concentración solar, reflectores dieléctricos para detectores de im-

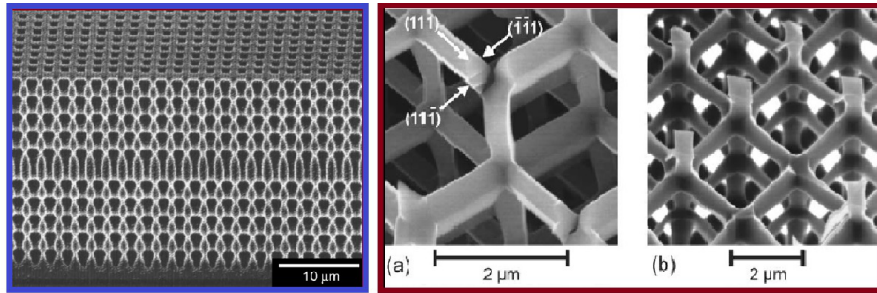


Fig. 6 Estructuras 3D basadas en SP: Guía de onda (recuadro azul), adaptado de referencia [78]. Estructura con banda prohibida en las tres direcciones (recuadro en rojo), adaptado de referencia [79].

agen en IR, dispositivos de generación del segundo y tercer armónico, birrefringencia alta, composites basados en cristales fotónicos de silicio, dispositivos fotónicos para producir frecuencias moduladas en los terahertz, switches ópticos basados en la condensación capilar, y estructuras con defectos en sistemas 1D, 2D y 3D para la incorporación de materiales con funcionalidades avanzadas que ya han sido realizadas, ampliando el rango de aplicaciones para la tecnología basada en silicio.

2.1 Estructuras con banda prohibida fotónica a base de SP

En el sentido estricto, un CF-1D es un sistema periódico a lo largo de una cierta dirección e infinitamente extenso en las dos direcciones perpendiculares. Así por ejemplo un CF-1D puede ser un arreglo periódico de capas de cuarto de onda ($\lambda/4$), conocidos durante muchas décadas como espejos dieléctricos o reflectores de Bragg. Su generalización, es decir, arreglos que no son completamente periódicos “*chirped mirrors*” [?], son espejos comercialmente disponibles para aplicaciones en cavidades laser [82]. Un defecto en el arreglo de cuarto de onda conduce al filtro óptico de Fabry-Perot, el cual es también un producto comercial fácilmente disponible. Los espejos de Bragg (en los extremos de la capa activa), en la microcavidad actúan como un confinador de fotones 1D de la luz emitida espontáneamente de la capa activa central. Es en esta capa donde el acoplamiento de las

transiciones excitónicas con los modos fotónicos deberían ser modificados (inhibidos o mejorados). El espectro de reflectancia de una microcavidad con un espesor óptico de la capa activa de media longitud de onda es caracterizado por una caída resonante en el ancho de banda. La longitud de onda de resonancia es determinada por $\lambda_c = mn_c d$, donde m es el orden de la resonancia, n_c el índice de refracción de la capa activa y d el espesor. El factor de calidad Q en una microcavidad, definido por $Q = \lambda_0/\Delta\lambda$, donde λ_0 es la longitud de onda del pico resonante y $\Delta\lambda$ el ancho de la resonancia a la mitad del punto máximo (FWHM por sus siglas en inglés), se usa para evaluar la eficiencia de la luz confinada dentro de una estructura de este tipo. El factor Q se incrementa cuando el número de periodos en los espejos de Bragg se incrementa y también cuando el contraste de índices de refracción entre las capas aumenta.

Como ya se ha mencionado anteriormente, un sistema con defecto de capa es ampliamente usado para aplicaciones como biosensor. Además de esto, se puede generar un sistema de microcavidades acopladas, el cual consiste de múltiples microcavidades que son superpuestas periódicamente, dando como resultado la aparición de múltiples minibandas permitidas dentro de una banda prohibida extensa. Cuando en una estructura de microcavidades acopladas se rompe la simetría traslacional, fenómenos tales como oscilaciones de Bloch y tunelamiento Zener pueden ser observados [25].

2.2 Monocapas y multicapas 1D basadas en SP

La posibilidad de formar estructuras con monocapas o multicapas a base de silicio poroso mediante el método de anodización electroquímica es relativamente simple. Para la formación de diferentes capas la influencia de los parámetros de ataque son cruciales, ya que si requerimos de una capa porosa con un determinado tamaño promedio del poro debemos usar una determinada resistividad y un determinado tipo de obleas, así como también una concentración específica de ácido fluorhídrico (HF). Existen básicamente dos tipos de multicapas de SP [83]. En el primer tipo de multicapas, la densidad de corriente se cambia durante la anodización; mientras que en el segundo tipo, el cambio en la porosidad es determinado cambiando el nivel de dopaje

de la oblea. El segundo tipo produce interfases afiladas [84]; por esta razón, el primer tipo de multicapas es el más común. Al cambiar la densidad de corriente en el proceso de anodización es posible variar la porosidad y por consiguiente el índice de refracción. La figura (7) muestra una representación de estructuras de monocapa y multicapas de SP obtenidas al modificar las densidades de corriente y los tiempos de ataque en el proceso electroquímico.

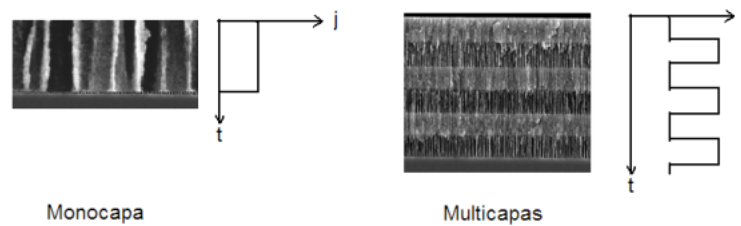


Fig. 7 Imágenes de microscopía electrónica de barrido (SEM) de la sección transversal de estructuras de monocapa y multicapas de SP. Los tiempos de anodización (t_1, t_2) y las magnitudes de las densidades de corriente (j_1, j_2) aplicadas en el proceso electroquímico corresponden directamente a los espesores y porosidades de las capas de SP que se crecen [83].

En la figura (4) se muestra un ejemplo de los diferentes sistemas que pueden ser fabricados con un número variado de capas en una dimensión. En particular se observa la imagen de HRSEM (recuadro en verde) de un sistema que presenta un perfil gaussiano en los índices de refracción y que presentan un rango de omnidireccionalidad en el IR [58]. Además de esto, una secuencia que siguen los índices de refracción de acuerdo a una regla matemática que denominamos "secuencia determinista-aperiódica" "secuencia 1-s" (recuadro en negro) presenta una respuesta óptica autosimilar [55]. Ambas estructuras han sido fabricadas en nuestro grupo.

2.3 Aplicaciones de estructuras 1D basadas en SP

Como ya se ha resaltado, debido a la versatilidad natural que presenta el SP con propiedades únicas e interesantes, hacen de éste un material con un gran potencial en diferentes áreas de aplicación. Por ejemplo, las aplicaciones en optoelectrónica y óptica se basan en la

adaptación y manipulación de las propiedades ópticas del SP tales como el índice de refracción. En el caso de las microcavidades, como ya se mencionó anteriormente, es posible infiltrar materiales tales como cristales líquidos para aplicaciones en interconectores ópticos. También se pueden aprovechar los fenómenos de fotoluminiscencia y electroluminiscencia asociados al SP en la fabricación de LEDs, celdas solares, entre otros. Además, como el SP presenta una gran área superficial específica de la capa porosa, se permiten aplicaciones en el sensado químico y biológico (debido a que el SP es compatible biológicamente). También puede ser explotado en un futuro para catálisis química. En la tabla 1.2 se muestran de forma simplificada algunas de las diversas áreas de investigación y de aplicación del SP. En la siguiente sección se muestran a manera de ejemplo dos estructuras de multicapas que han sido usadas para aplicaciones en el sensado de moléculas biológicas.

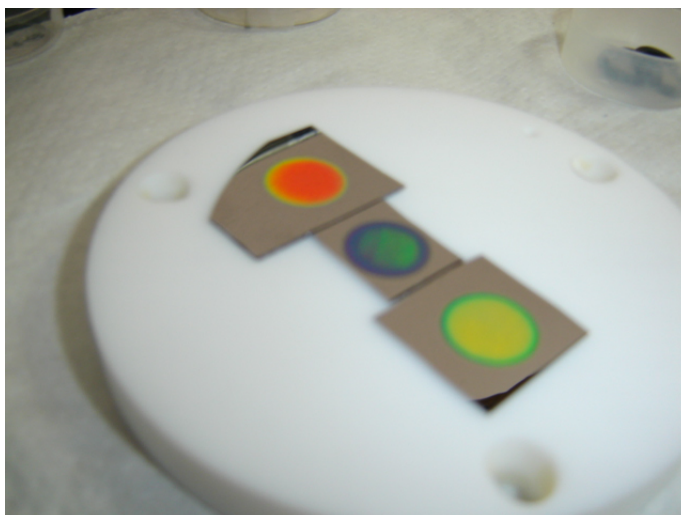


Fig. 8 Estructuras de multicapas de SP fabricadas en nuestro laboratorio.

2.4 Ejemplos de multicapas basadas en SP

Estructuras Doblemente-periódicas DP:

Propiedad	Aplicaciones principales
Luminiscencia	Optoelectrónica (LEDs, marcadores)
Dependencia porosidad-índice de refracción	Fotónica (guías de onda, filtros, espejos, microcavidades, procesamiento óptico)
Cargado de compuestos y enlaces/adsorción de moléculas dentro de los poros; área y volumen extensos de los poros	Interruptor óptico y sensor; liberación de drogas; explosivos
Propiedades ópticas no lineales, anisotropía	Interruptor óptico; birrefringencia; generación de armónicos
Conductividad térmica extremadamente baja	Sonido/emisión ultrasónica; actuadores; sensor de presión; transmisión digital
Biocompatibilidad	Liberación de drogas, dispositivos implantables

Tabla 1.2: Aplicaciones potenciales del SP.

La idea de las estructuras doblemente periódicas se ha analizado teóricamente y ha sido explorada experimentalmente en muchos sistemas diferentes [85, 86, 43]. Recientemente, las estructuras DP se han fabricado usando multicapas de SP [43]. En resumen, una estructura DP (ver figura 9) está compuesta de dos subestructuras A y B , repetidas alternadamente para obtener la secuencia $A_n B_m A_n B_m \dots A_n B_m = (A_n B_m)^N$. Las subestructuras A_n y B_m están a su vez formadas por dos unidades periódicas diferentes, a y b respectivamente, donde los subíndices n y m son el número de periodos a y b en las subestructuras A y B . Ambas subestructuras (a y b) consisten de un par de capas con índices de refracción alto y bajo. El espesor de la capa a doble es $d_a = d_1 + d_2$, donde d_1 y d_2 son los espesores para las capas con índice de refracción alto (n_1) y bajo (n_2) respectivamente. De forma similar, la capa b doble tiene el espesor $d_b = d_3 + d_4$, donde d_3 y d_4 son los espesores para las capas de alto y bajo índice. En particular, en este trabajo se usó la secuencia $A_3 B_6 A_3 B_6 A_3 B_6 A_3 B_6 A_3 B_6 = (A_3 B_6)^5$ diseñada para la región infrarroja. Si la estructura $B(A)$ es considerada como la capa de defecto los intervalos de frecuencia donde las resonancias de transmisión aparecen se pueden reducir (incrementar) al incrementar (reducir) el número de periodos $a(b)$ en la subestructura $A(B)$. Cuando estructuras $A_n B_m$ idénticas se acoplan entonces se producen modos de repulsión degenerados. Cada resonancia óptica degenerada se desdobra en una minibanda fotónica [85, 43]. Debido a la periodicidad de la estructura, las minibandas fotónicas están sep-

aradas por bandas prohibidas fotónicas en las cuales la propagación está prohibida. Además cuando $N > 1$, hay $N - 1$ capas de defecto, por lo tanto hay $N - 1$ modos resonantes y $N - 1$ picos de transmisión aparecerán en el espectro. Ajustando los parámetros estructurales es posible sintonizar el número, la frecuencia y el ancho medio de los picos de los modos resonantes abriendo la posibilidad de fabricar filtros ópticos basados en multicapas de silicio poroso. Tales estructuras fotónicas DP presentan aplicaciones prometedoras en los campos de la optoelectrónica, comunicaciones ópticas y biosensores ópticos [40].

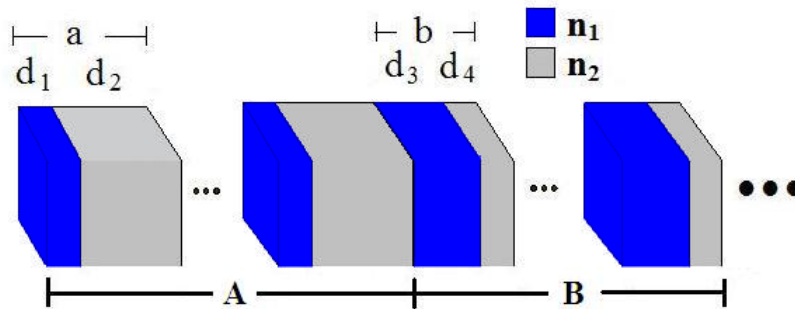


Fig. 9 Representación esquemática de una estructura doblemente periódica 1D, donde n y m representan el número de periodos de a y b en las subestructuras A y B respectivamente; n_1 y n_2 son los índices de refracción alto y bajo de las capas dieléctricas alternadas en a y b ; el espesor de las capas es d_1 y d_2 para a y d_3 y d_4 para b .

Propagación de la luz en estructuras DP

Como ejemplo, en la figura (10) se muestra la distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de una estructura DP como función de la energía. La gráfica muestra el mapa de estados dispersivos, para una secuencia DP $(A_3B_6)^N$, donde $N=1,2,3,4$. El mapa de estados dispersivos se obtiene mediante un procedimiento basado en las matrices de transferencia, el cual se explica con detalle en el capítulo anterior. El mapa de estados dispersivos para una estructura $(A_3B_6)^N$ muestra $N - 1$ modos resonantes, los cuales se observan claramente localizados sobre toda la estructura, desde la primera capa hasta la última, y aparecen separados por bandas prohibidas (mini band-gaps, ver figura (10)). Todas las propiedades ópticas simuladas en este trabajo, tales como la reflectancia, distribución de la intensidad del campo eléctrico y propagación de un pulso gaussiano a través

de la estructura periódica, se han obtenido mediante el método de la matriz de transferencia [1].

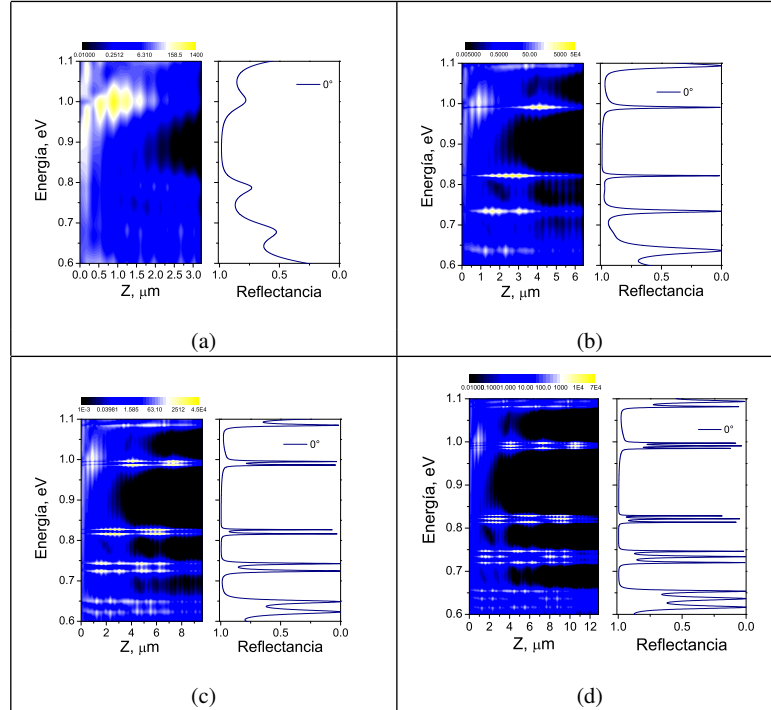


Fig. 10 Distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de las estructuras para el caso cuando no hay gradiente aplicado, esto es, para $\Delta d = 0\%$ (situación de minibandas planas). (a) estructura $(A_3B_6)^1$, (b) $(A_3B_6)^2$, (c) $(A_3B_6)^3$ y (d) $(A_3B_6)^4$, respectivamente.

Por ejemplo, para el caso de la estructura $(A_3B_6)^3$, el desdoblamiento de las frecuencias de resonancia de los dos "defectos de capa" acoplados son visibles en el mapa de estados dispersivos, donde también se observan ambas polarizaciones (s,p) para un ángulo de incidencia de la luz de 20° como se muestra en la figura (11)(a). También se puede ver que los estados resonantes aparecen separados por minigaps. La contraparte dinámica de la figura (11) es un tunelamiento resonante del fotón, el cual oscila entre los dos defectos de capa (microcavidades). Si un paquete de onda corto de luz incide por izquierda a la interfase, entonces, este se tunelará dentro de la estructura de multicapas, la intensidad en el primer defecto crecerá y comenzará a oscilar

entre los dos sitios de los defectos por tunelamiento resonante (ver figura (11)(b)).

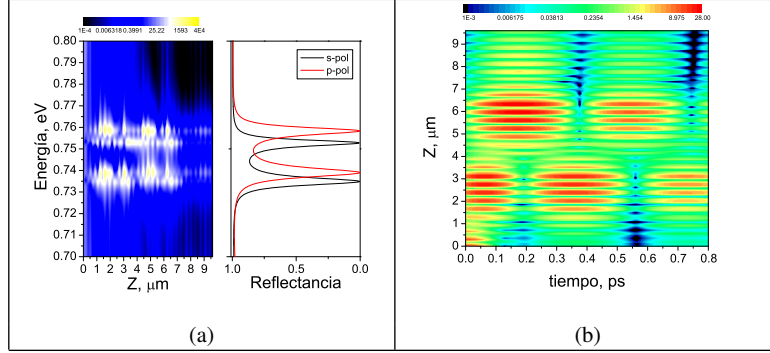


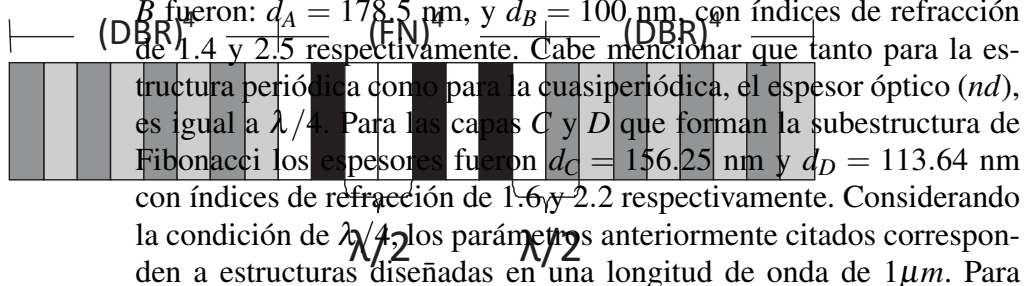
Fig. 11 (a) Distribución de la intensidad del campo eléctrico dentro de la estructura $(A_3B_6)^3$ para $\Delta d = 0\%$ (situación de minibandas planas) a 20° de incidencia de la luz. (b) Simulación de la respuesta resuelta en el tiempo de un pulso gaussiano (de 30 nm de ancho de pulso) que incide sobre la estructura. El paquete de ondas entra desde la izquierda en el tiempo igual a cero y entonces oscila por tunelamiento resonante entre las dos cavidades.

Heteroestructuras híbridas:

Las multicapas de SP para aplicaciones como biosensores han llamado mucho la atención principalmente a que el área superficial específica de las capas de SP es muy alta dependiendo de las condiciones de crecimiento y cuando se combina esto a las propiedades ópticas que surgen cuando se diseña una determinada multicapa, resulta en una alta sensibilidad para detectar moléculas. Recientemente, nuestro grupo, desarrolló una heteroestructura híbrida (HH), la cual se forma al acoplar una estructura cuasiperiódica (en este caso un arreglo de multicapas que sigue una secuencia tipo Fibonacci [88]) entre dos estructuras periódicas (espejos de Bragg) (ver figura (12))[89]. La secuencia es $(DBR)^N - (FN)^M - (DBR)^N$. Los espejos de Bragg se forman al alternar dos capas (A y B) de diferente índice de refracción y repetirlas periódicamente. La secuencia de Fibonacci se genera a partir de la regla de recursión $F_M = F_{M-1} + F_{M-2}$, donde M representa el orden de la secuencia ($M = 2, 3, 4, \dots$). Las estructuras dieléctricas multicapas que siguen una secuencia matemática de Fibonacci de cualquier orden se pueden generar definiendo $F_0 = C$ y $F_1 = CD$, donde C y D son dos capas diferentes. Por ejemplo $F_2 = CDC$, $F_3 = CDCCD$, $F_4 = CDCCDCDC$, etc. Las HHs pre-

sentan modos de transmisión fuertemente localizados en función de los parámetros de diseño y pueden ser localizados sobre un amplio rango de frecuencias. El fuerte confinamiento de los campos electromagnéticos dentro de la HHs es una ventaja que presentan este tipo de cristales fotónicos debido a que son altamente dependientes del índice de refracción y el espesor de cada capa que los constituye. Cualquier cambio en estos parámetros se refleja como un cambio en la respuesta óptica. De esta forma es posible lograr un desplazamiento de los modos localizados cuando se induce un ligero cambio en el índice de refracción de alguna capa o de la estructura completa el cual puede ser provocado por la oxidación de la estructura o al introducir alguna sustancia dentro de los poros. Esta característica puede ser explotada especialmente para aplicaciones en el área de biosensado.

Fig. 12 Esquema de la Heteroestructura. Los colores de las capas representan índices de refracción diferentes.



Para llevar a cabo este trabajo se diseñó una HH en la región infrarroja del espectro electromagnético. Las HHs se fabricaron usando una solución electrolítica de HF (40%) y etanol (99.98%) en razón volumétrica 1:1. Los parámetros que se consideraron para los espejos de Bragg los cuales están conformados por 4 periodos de capas A y B fueron: $d_A = 178.5$ nm, y $d_B = 100$ nm, con índices de refracción de 1.4 y 2.5 respectivamente. Cabe mencionar que tanto para la estructura periódica como para la cuasiperiódica, el espesor óptico (nd), es igual a $\lambda/4$. Para las capas C y D que forman la subestructura de Fibonacci los espesores fueron $d_C = 156.25$ nm y $d_D = 113.64$ nm con índices de refracción de 1.6 y 2.2 respectivamente. Considerando la condición de $\lambda/2$ los parámetros anteriormente citados corresponden a estructuras diseñadas en una longitud de onda de $1\mu m$. Para

determinar la sensibilidad de las HHS como biosensores se usó la molécula 5-6 Carboxyfluorescein N-hydroxysuccinimide ester (*FSE*), la cual es una molécula fluorescente comunmente utilizada como marcador biológico. Para inmovilizar esta molécula es necesaria la previa infiltración de un silano, en este caso 3-aminopropyltriethoxysilane (*APTES*), la cual es una molécula ligante que permite formar enlaces covalentes con moléculas que contengan grupos funcionales tipo amino. Previo a la infiltración de *APTES* se llevó a cabo un tratamiento térmico a 800°C durante 3 min bajo un flujo de oxígeno, el cual permite estabilizar la muestra para evitar cambios de la respuesta óptica debido al contacto con el ambiente, a demás de que las terminaciones $\text{Si} - \text{O}_x$ proveen el carácter necesario para la adhesión del *APTES* a la superficie porosa. La silanización con *APTES* se llevó a cabo incubando las HHS durante 1.5 horas en una solución al 5% de *APTES* en tolueno, posteriormente se lavaron con el solvente y se secaron bajo un flujo de N_2 . Finalmente las muestras se sometieron a un tratamiento térmico a 110°C durante 15 min. La inmovilización de *FSE* se realizó incubando las HHs en una solución 10mM de *FSE* en solución buffer (PO_4buffer) durante 2 horas; transcurrido este tiempo las muestras se lavaron con solución buffer y finalmente se secaron bajo un flujo de N_2 .

La figura (13) muestra los espectros de reflectancia después de cada paso de la inmovilización de las moléculas. Como se puede observar, la HH fabricada con los parámetros anteriormente mencionados presenta dos resonancias localizadas en 1021.1 y 1132.6 nm respectivamente. El proceso de oxidación induce un desplazamiento de las resonancias a longitudes de onda menores debido a que el índice de refracción efectivo disminuye al oxidarse la muestra localizándose ahora las resonancias en 893.2 y 987.2 nm respectivamente. La infiltración de moléculas como el *APTES* y la *FSE* provocan desplazamientos hacia longitudes de onda mayores ya que el índice de refracción de estas moléculas es mayor al del aire, y por tanto desplazan parte de éste al ser inmovilizadas dentro de la HH. Las posiciones espectrales de ambas resonancias fueron 950.1 y 1051.9 nm y 965.8 y 1073.4 nm respectivamente.

La sensibilidad de las muestras se evaluó a partir del parámetro $\Delta\lambda/\Delta n$; considerando la resonancia de mayor energía. El cambio de índice de refracción se estimó por una simulación teórica usando el formalismo de la matriz de transferencia del cual se obtuvo el cam-

bio de índice para cada capa porosa y se evaluó en su conjunto siendo éste igual a 0.036. Por lo tanto la sensibilidad de la HH ante la inmovilización de *FSE* se estimó en 597 nm.

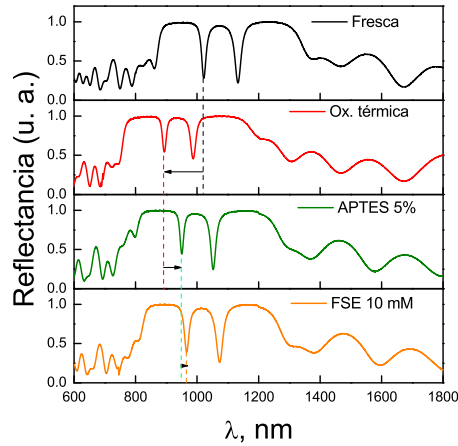


Fig. 13 Espectros de reflectancia medidos de la estructura HH para las diferentes etapas.

3 Conclusiones

En conclusión, diferentes cristales fotónicos basados en SP, con una gran calidad óptica, se han fabricado en los últimos dos décadas y se ha encontrado que exhiben diversas propiedades ópticas, las cuales se ven reflejadas en muchas aplicaciones, tales como espejos de Bragg, espejos omnidireccionales, microcavidades tipo Fabry-Pérot, microcavidades acopladas, filtros *rugate*, multicapas corrugadas, entre muchos otros dispositivos que han sido usados en varios tipos de procesamiento óptico y biosensado. Diversas aplicaciones tales como espejos secundarios para sistemas de concentración solar, espejos dieléctricos para detectores de imagen en infrarrojo, dispositivos generadores del segundo y tercer armónico, birrefringencia amplia, dispositivos ópticos para la modulación de la radiación terahertz, interruptores ópticos activados por la condensación capilar de un gas, y estructuras con defectos para la incorporación de materiales con fun-

cionalidades avanzadas se han realizado, abriendo el rango de aplicaciones basadas en la tecnología del silicio.

Bibliografía

1. Jonh P. McKelvey, Robert E. Krieger Publishing Company. Malabar, Florida, (1966).
2. Yoder M. N. *Electron Devices* **43**, 1633 (1996).
3. Yablonovitch, Eli, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2059 (1987).
4. John S. *Phys. Rev. Lett.* **58**, 2486 (1987).
5. Kuilong Yu, Tongxiang Fan, Shuai Lou, Di Zhang, *Progress in Material Science*, **58**, 825-873 (2013).
6. Pete Vukusic and J. Roy Sambles, *NATURE*, **424**, (2003).
7. L. Chen, Y. Suzuki and G.E. Kohnke, *Appl. Phys. Lett.* **80**, 1514 (2002).
8. R. Sapienza, T. Coenen, J. Renger, M. Kuttge, N.F. van Hulst, and A. Polman, *NATURE MATERIALS*, **11** (2012).
9. L. P. Biró Zs. Bálint, K. Kertész, Z. Vértesy, G. I. Márk, Z. E. Horváth, J. Balázs, D. Méhn, I. Kiricsi, V. Lousse, and J. P. Vigneron, *Phys. Rev. E*, **67**, 021907 (2003).
10. José Octavio Estevez Espinoza, Tesis de maestría: "Espejos omnidireccionales basados en multicapas de silicio poroso", IFUAP-BUAP (2008).
11. J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, *PHOTONIC CRYSTALS: MOLDING THE FLOW OF LIGHT*, Princeton University Press, (1995).
12. Kazuaki Sakoda, *Springer Series in Optical Science*, 80, Springer Verlag, Mayo (2001).
13. *Photonic Band Gap Materials*, Proceedings of the NATO ASI on Photonic Band Gap Materials, Crete, Greece, June 18-30, 1995, Editado por C. Soukoulis, (NATO ASI Series, Kluwer Academic Publishers, The Netherlands, (1996).
14. H. Kosaka, et al., *Phys. Rev. B*. **58**, R10096 (1998); *ibid*, *Appl. Phys. Lett.*, **74**, 1212 (1999).
15. H. Kosaka, et al., *Appl. Phys. Lett.* **74**, 1370 (1999); *ibid*, *J. Lightwave Technol.* **17**, 2032 (1999).
16. N. Notomi, *Phys. Rev. B*, **62**, 10696 (2000).

17. S. Fetoinoupolou and C. M. Soukoulis, *Phys. Rev. B*, **67**, 235107 (2003).
18. Y. Fink, J. N. Winn, S. Fan, C. Chen and J. D. Joannopoulos, *Science*, **282**, 1679 (1998).
19. J. O. Estevez et al., *Appl. Phys. Lett.*, **94**, 061914 (2009).
20. A. Bruyant, G. Lerondel, P. J. Reece and M. Gal, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 3227 (2003).
21. E. Xifré-Pérez, L. F. Marsal, J. Pallarès and J. Ferré-Borrull, *J. Appl. Phys.*, **97**, 064503 (2005).
22. J. C. Knight, et. al., *Science*, **282**, 1476 (1998); J. C. Knight and P. St. J. Russell, *Science*, **296**, 276 (2002).
23. *Properties of Porous Silicon*, Edited by Leigh Canham DERA, Malvern, UK. Published by: INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, London, United Kingdom (1997).
24. G. Amato, C. Delerue and H. J. von Bardeleben, Gordon and Breach Science Publishers (1997).
25. R. Sapienza, P. Costantino, D. Wiersma, M. Ghulinyan, C.J Oton, L. Pavesi. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 263902. (2003).
26. V. Agarwal, J. A. del Río, G. Malpuech, M. Zamfirescu, A. Kavokin, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 097401 (2004).
27. M. Ghulinyan, C. J. Oton, Z. Gaburro, L. Pavesi. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 127401 (2005).
28. M. Ghulinyan, Z. Gaburro, C. Toninelli, L. Pavesi, D. S. Wiersma, *Nat. Photon.* **1**, 172-175 (2007).
29. J. Octavio Estevez, J. Arriaga, A. M.-Blas, E. Reyes-Ayona, J. Escorcia, V. Agarwal, *Nanoscale Research Letters* **7** 413 (2012).
30. Bertolotti J, Gottardo S, Wiersma DS, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 113903 (2005).
31. W. H. Zheng, P. Reece, B. Q. Sun, M. Gal. *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3519 (2004).
32. MIAO Feng-Juan, ZHANG Jie, XU Shao-Hui, WANG Lian-Wei, CHU Jun-Hao, CAO Zhi-Shen, ZHAN Peng, WANG Zhen-Lin. *Chin. Phys. Lett.* **26**, 044207 (2009).
33. M.B. de la Mora , O.A. Jaramillo , R. Nava, J. Tagüeña -Martínez, J.A. del Río. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* (2009).
34. A. G. Palestino, M. B. de la Mora, J. A. del Río, C. Gergely, E. Pérez. *Appl. Phys. Lett.* **91**, 121909 (2007).
35. M. Ghulinyan, C. J. Oton, Z. Gaburro, P. Bettotti, L. Pavesi. *Appl. Phys. Lett.* **82**, 1550-1552 (2003).

36. T. V. Dolgova, A. I. Madikovski, M. G. Martemyanov, G. Marovsky, G. Mattei, D. Schuhmacher, V. A. Yakovlev, A. A. Fedyanin, and O. A. Aktsipetrov. *JETP Letters*, **73**, 6-9 (2001).
37. T. V. Dolgova, A. I. Madykovski, M. G. Martemyanov, A. A. Fedyanin, and O. A. Aktsipetrov. *JETP Letters*, **75**, 15-19 (2002).
38. H. Ouyang, C. C. Striemer, P. M. Fauchet. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 163108 (2006).
39. S. Li, J. Huang, L. Cai, *Nanotechnology* **22**, 425502 (2011).
40. Claudia Pacholski. *Sensors* **13**, 4694-4713 (2013).
41. Tatyana V. Murzina, Fedor Yu. Sychev, Irina A. Kolmychek, Oleg A. Aktsipetrov. *Appl. Phys. Lett.* **90**, 161120 (2007).
42. Sharon M. Weiss, Huimin Ouyang, Jidong Zhang, Philippe M. Fauchet. *Opt. Express* **13**, 1090 (2005).
43. K. Pérez, J. O. Estevez, A. Méndez-Blas, J. Arriaga. *J. Opt. Soc. Am. B* **29** (4), 538-542 (2012).
44. A. David Ariza-Flores, L. M. Gaggero-Sager, V. Agarwal. *Appl. Phys. Lett.* **101**, 031119 (2012).
45. Nobuyuki Ishikura, Minoru Fujii, Kohei Nishida, Shinji Hayashi, Joachim Diener. *Infrared Physics & Technology*, **53** (4), 292-294 (2010).
46. Simone Ciampi, Till Bcking, Kristopher A. Kilian, Jason B. Harper, and J. Justin Gooding. *Langmuir* **24**, 5888-5892 (2008).
47. F. Cunin, Thomas A. Schmedake, Jamie R. Link, Yang Yang Li, Jennifer Koh, Sangeeta N. Bhatia & Michael J. Sailor. *Nature Materials* **1**, 39-41 (2002).
48. A. M. Ruminski, G. Barillaro, E. Secret, W. D. Huang, A. Potocny, U. Carion, C. Wertans, and M. J. Sailor. *Adv. Optical Mater.* (2013).
49. Yang Yang Li, Frédérique Cunin, Jamie R. Link, Ting Gao, Ronald E. Betts, Sarah H. Reiver, Vicki Chin, Sangeeta N. Bhatia, Michael J. Sailor. *Science* **299**, 2045-2047 (2003).
50. K.A. Kilian, T. Bcking, S. Ilyas, K. Gaus, W. Jessup, M. Gal, J. J. Gooding, *Adv. Funct. Mater.* **00**, 1-8 (2007).
51. Claudia Pacholski, Christine Yu, Gordon M. Miskelly, Denis Godin, M. J. Sailor, *J. AM. CHEM. SOC.* **128**, 4250-4252 (2006).
52. SILICON NANOCRYSTALS. Ed. by Lorenzo Pavesi and Rasit Turan. 14 Silicon Nanocrystals in Porous Silicon and Applications. (WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010).

53. L. Dal Negro, C. J. Oton, Z. Gaburro, L. Pavesi, P. Johnson, A. Lagendijk, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 055501 (2003).
54. L. Moretti, I. Rea, L. Rotiroti, I. Rendina, G. Abbate, A. Marino, L. De Stefano. *Opt. Express* **14**, 6264 (2006).
55. J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez-Blas, M. G. Robles-Cháirez, D. A. Contreras-Solorio, *J. Appl. Phys.* **111**, 013103 (2012).
56. J. E. Lugo, B. de la Mora, R. Doti, R. Nava, J. Tagüeña, A. del Río, J. Faubert. **17**, 3042-3051 (2009).
57. M. B. de la Mora, J. A. del Río, R. Nava, J. Tagüeña-Martínez, J. A. Reyes-Esqueda, A. Kavokin, J. Faubert, J. E. Lugo. *Opt. Express* **18**, 22808-22816 (2010).
58. J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez Blas, V. Agarwal. *Appl. Phys. Lett.* **93**, 191915 (2008).
59. S. W. Leonard, H. M. van Driel, K. Busch, S. John, A. Birner, A. Birner, A.-P. Li, F. Müller, U. Gsele, V. Lehmann. *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3063 (1999).
60. R. B. Wehrspohn, and J. Schilling. *phys. stat. sol. (a)* **197**, 673-687 (2003).
61. S.M. Weiss, M. Haurylau, P.M. Fauchet. *Optical Materials* **27**, 740-744 (2005).
62. Gonzalo Recio-Sánchez, Zhiya Dang, Vicente Torres-Costa, Mark BH Breese, Raul-Jose Martín-Palma. *Nanoscale Research Letters* **7**, 449 (2012).
63. Zhiya Dang, Mark BH Breese, Gonzalo Recio-Sánchez, Sara Azimi, Jiao Song, Haidong Liang, Agnieszka Banas, Vicente Torres-Costa, Raúl José Martín-Palma. *Nanoscale Research Letters* **7**, 416 (2012).
64. M. Haurylau, S. P. Anderson, K. L. Marshall, P. M. Fauchet. *Appl. Phys. Lett.* **88**, 061103 (2006).
65. F. Genereux, S. W. Leonard, H. M. van Driel, A. Birner, and U. Gosele. *Phys. Rev. B*, **63**, 161101(R) (2001).
66. R. J. Martín-Palma, M. Manso, M. Arroyo-Hernández, V. Torres-Costa, J. M. Martínez-Duart. *Appl. Phys. Lett.* **89**, 053126 (200).
67. F. Müller, A. Birner, U. Gsele, V. Lehmann, S. Ottow, H. Fll. *Journal of Porous Materials* **7**, 201-204 (2000).
68. A. Birner, A.-P. Li, F. Müller, U. Gsele, P. Kramper, V. Sandoghdar, J. Mlynek, K. Busch, V. Lehmann. *Materials Science in Semiconductor Processing* **3** 487-491 (2000).

69. Mindy Lee and Philippe M. Fauchet. *Opt. Express* **15**, 4532-4535 (2007).
70. Two- and three-dimensional photonic crystals made of macroporous silicon and liquid crystals. Guido Mertens, Thorsten Rder, Heinrich Matthias, Heinrich Marsmann, Heinz-Siegfried R. Kitzlerow, Stefan L. Schweizer, Cecile Jamois, Ralf B. Wehrspohn, Mary Neubert. *Appl. Phys. Lett.*, **83**, 3036-3038 (2003).
71. G. Recio-Sánchez, V. Torres-Costa, M. Manso-Silván, R. J. Martín-Palma. *Journal of Nanotechnology* (2012).
72. Albert Birner, Ralf B. Wehrspohn, Ulrich M. Gsele, Kurt Busch. *Adv. Mater.* **13**, 377-388 (2001).
73. K Wang, A Chelnokov, S Rowson, P Garoche, J-M Lourtioz. *J. Phys. D: Appl. Phys.* **33**, L119-L123 (2000).
74. V. V. Aristov, S. A. Magnitskii, V. V. Starkov, A. V. Tarasishin, A. M. Zheltikov. *Laser Physics* **10**, 946-951 (2000).
75. R. Hillebrand, St. Senz, W. Hergert, U. Gsele. *J. Appl. Phys.* **94**, 2758-2760 (2003).
76. J. Schilling, J. White, A. Scherer, G. Stupian, R. Hillebrand, U. Gsele. *Appl. Phys. Lett.* **86**, 011101 (2005).
77. J. Schilling, F. Müller, S. Matthias, R. B. Wehrspohn, U. Gsele, K. Busch. *Appl. Phys. Lett.*, **78**, 1180-1182 (2001).
78. Paul V. Braun, Stephanie A. Rinne, Florencio García-Santamaría, *Adv. Mater.* **18**, 2665-2678 (2006).
79. Sven Matthias, Frank Müller, Ulrich Gsele. *J. Appl. Phys.* **98**, 023524 (2005).
80. Heinrich Matthias, Thorsten Rder, Ralf B. Wehrspohn, Heinz-S. Kitzlerow, Sven Matthias, Stephen J. Picken. *Appl. Phys. Lett.* **87**, 241105 (2005).
81. N. Matuschek, F.X. Krtner, U. Keller, *IEEE J. Selected Topics Quantum Electron*, **4** (1998).
82. K. Busch, G. von Freymann, S. Linden, S.F. Mingaleev, L. Tkeshe-lashvili, M. Wegener, *Phys Rep*, **444**, 101 (2007).
83. St. Frohnhoff, M.G. Berger, M. Thonissen, C. Dieker, L. Vescan, H. Munder and H. Luth, *Thin Sol. Films*, **255**, 59 (1995).
84. O. Bisi, S. Ossicini and L. Pavesi, *Surf Science Rep*, **38**, 1, (2000).
85. Q. Qin, H. Lu, S. N. Zhu, C. S. Yuan, Y. Y. Zhu, and N. B. Ming, *Appl. Phys. Lett.* **82**, 4654-4656 (2003).
86. A. G. Yamilov, M. R. Herrera, and M. F. Bertino, *J Opt Soc Am: B* **25**: 599-608 (2008).

87. Yeh P: *Optical Waves in Layered Media*. New Jersey:Wiley VCH; 1998.
88. J. Escorcia-García, C. A. Duque and M. E. Mora-Ramos, Superlattice Microst. **49**, 203-208 (2011).
89. Karina S Pérez, J Octavio Estevez, Antonio Méndez-Blas, Jesús Arriaga, Gabriela Palestino and Miguel E. Mora-Ramos, Nanoscale Research Letters **7**, 392 (2012).

Propiedades ópticas lineales y no lineales en pozos δ -dopados dobles tipo n en GaAs

K. A. Rodríguez-Magdaleno¹, J. G. Rojas-Briseño¹, J. C. Martínez-Orozco¹, I. Rodríguez-Vargas¹, C. A. Duque².

Resumen

En este trabajo se realiza el estudio de las propiedades electrónicas de sistemas δ -dopados dobles tipo n en una matriz de GaAs, así como también el estudio de algunas propiedades ópticas del sistema, en particular, se calcula el coeficiente de absorción óptica y el cambio relativo del índice de refracción asociados con la transición fundamental E_{10} . En este trabajo, proponemos el potencial del sistema de estudio como la suma analítica del potencial de dos pozos cuánticos δ -dopados simples. La validez de este modelo se verificó al comparar nuestros resultados con un cálculo autoconsistente reportado en la literatura, encontrando excelente acuerdo en el valor de la transición fundamental cuando la distancia de separación entre pozos es del orden o mayor al radio de Bohr (10 nm en este caso) de las impurezas en el material. Al variar los parámetros del sistema se pueden proponer valores para los cuales se maximizan tanto el valor del coeficiente de absorción, así como el cambio relativo del índice de refracción, además de determinar la importancia de las correcciones de tercer orden en ambas propiedades. Nosotros reportamos que es posible el *sintonizar* la energía de resonancia para el coeficiente de absorción y del nodo del cambio relativo del índice de refracción, los cuales están en el rango del infrarrojo lejano.

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina con Paseo la Bufa, S/N. C.P. 98060. Zacatecas, Zac. México.

²Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia UdeA; Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

Linear and nonlinear optical properties for a double n -type δ -doped GaAs systems

Abstract

In this work we perform the electronic properties study of double n -type δ -doped systems in a matrix $GaAs$ as well as the study of certain optical properties of the system, in particular we calculated, the optical absorption coefficient and the relative refractive index change, associated with the fundamental transition. In this paper, we propose the potential of the system as the analytical sum of the potential of two single δ -doped quantum wells, the validity of this simple model was verified by comparing our results with a self-consistent calculation already reported in the literature, finding excellent agreement in the main energy transition when the distance between wells is of the order or greater than the Bohr radius (10 nm in this case) of the impurities in the material. By varying the parameters of the system we can propose some values for which the absorption coefficient and the relative refractive index change are maximized, in addition to determining the importance of third-order corrections in both properties. We report that it is possible to *tune* the resonant energy for the absorption coefficient and the node of the relative refractive index change, which are in the far-infrared range.

1 Introducción

El perfil de impurezas δ -dopado fue propuesto hace ya más de treinta años por Wood *et al.* [1] y consiste en la incorporación de una alta concentración de impurezas en una sola capa atómica de un material semiconductor, típicamente del orden de 10^{12} - 10^{13} cm^{-2} . Este tipo de perfil de impurezas es posible gracias a técnicas experimentales como la Epitaxia de Haces Moleculares (*MBE*, por sus siglas en inglés) o la Deposición Química de Vapores Metalorgánicos (*MOCVD*, también por sus siglas en inglés). En este trabajo en particular estamos interesados en las impurezas tipo n en una matriz de Arseniuro de Galio.

El dopamiento tipo δ surge por la necesidad de tener perfiles dopados bien definidos y angostos en materiales semiconductores. El poder controlar y crear este tipo de estructuras, se debe al desarrollo de las técnicas experimentales antes mencionadas, la habilidad que tienen estas técnicas, es el controlar la distribución de las impurezas dopantes en la estructura con precisión atómica. El comportamiento de las impurezas dopantes ha motivado mucho a la investigación de las capas δ -dopadas con interés principal en sus propiedades tanto electrónicas como ópticas. De hecho, en el presente trabajo reportamos no sólo la estructura electrónica de sistemas δ -dopados de impurezas sino también algunas propiedades ópticas, tales como el coeficiente de absorción óptica y el cambio relativo del índice de refracción. Calculamos estas propiedades para pozos δ -dopados dobles de impurezas tipo n , en general, los pozos dobles son asimétricos y obtenemos tanto su estructura electrónica como sus propiedades ópticas, estudiamos también cual es el efecto de un campo eléctrico externo aplicado sobre los sistemas de estudio. Todos estos cálculos se hacen trabajando en la aproximación de masa efectiva.

La primer referencia, hasta el conocimiento de estos autores, de este tipo de sistemas es en 1979 cuando Bass [2] construyó el primer pozo δ -dopado por medio de la Deposición Química de Vapores Metalorgánicos (*MOCVD*) al crecer una capa dopada extremadamente angosta de impurezas tipo n , tanto con Silicio (*Si*) como con Germanio (*Ge*) en la interface de la capa epitaxial del sustrato de Arseniuro de Galio (*GaAs*), posteriormente en 1980 Wood *et al.* lograron producir un perfil de dopado hiperabrupto y algunas heteroestructuras en *GaAs* dopado con *Ge* a través de la *MBE* [1]. El dopado hiperabrupto o dopamiento *deltaico*, consiste en la interrupción del crecimiento epitaxial para la deposición de los átomos dopantes, bajando la temperatura y evitando la difusión de impurezas para continuar con el crecimiento epitaxial de la muestra.

Si sustituimos un átomo del material semiconductor base por otro que tenga un electrón de valencia de más, entonces estamos colocando una impureza donadora o tipo n , por ejemplo Fósforo (*P*) en Silicio (*Si*). Si se sustituye un átomo del material semiconductor base por uno que tenga un electrón de valencia menos, entonces estamos introduciendo una impureza tipo p o aceptora, por ejemplo Boro (*B*) en *Si*. En este trabajo, estamos interesados en el dopado tipo n del *GaAs*, típicamente si sustituimos un átomo de *Ga* por uno de *Si* en una ma-

triz de $GaAs$ tendremos una impureza donadora¹, como se muestra en la figura 1 a). Con fines ilustrativos, aprovechando la naturaleza anfotérica del Si en $GaAs$ ², si sustituimos un átomo de As por uno de Si en el Arseniuro de Galio tendremos una impureza aceptora como se muestra en la figura 1 b).

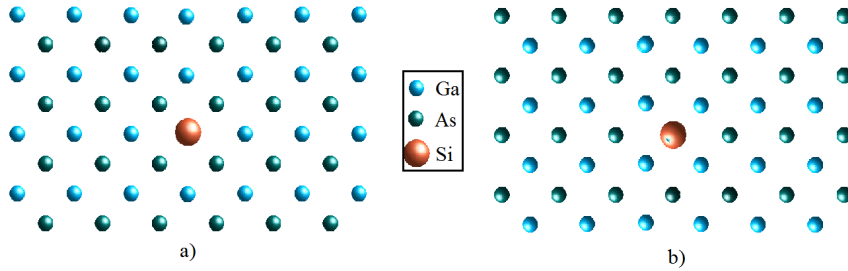


Fig. 1 Representación esquemática bidimensional de una matriz de Arseniuro de Galio. a) Dopaje tipo n (Si_{Ga}) y b) Dopaje tipo p (Si_{As}).

El objetivo de introducir impurezas en un material semiconductor es el de modular el potencial debido al campo electrostático que producen e introducir portadores a la estructura. El ejemplo más conocido de este hecho es un pozo cuántico rectangular basado en la heteroestructura $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ donde x representa el porcentaje de impurezas sustitucionales (Al_{Ga}). En esta línea de perfiles de *dopaje* existen una cantidad importante de trabajos donde se estudian y analizan sus propiedades electrónicas y ópticas.

El límite bidimensional de la localización de las impurezas está dado por los pozos δ -dopados. Supongamos, por ejemplo que nuestro material semiconductor base es el Arseniuro de Galio y que colocamos una densidad de impurezas por unidad de área N_{2d} de átomos de Silicio en la dirección de crecimiento $[001]$, como se muestra en la

¹ Sustituimos un átomo de valencia III, por uno tetravalente (grupo IV) como es el Silicio –una notación estandarizada para estas impurezas sustitucionales es; Si_{Ga} .

² Esto significa que el Silicio puede sustituir tanto átomos de Galio (Si_{Ga}) como átomos de Arseniuro (Si_{As}) en el $GaAs$ de manera que puede actuar tanto como impureza tipo n como p lo cual depende además de las condiciones de crecimiento de la dirección cristalográfica, en el caso particular de la dirección $[001]$ se sabe que el Silicio sustituye preferentemente a los átomos de Galio (Si_{Ga}) sirviendo entonces como impureza donora.

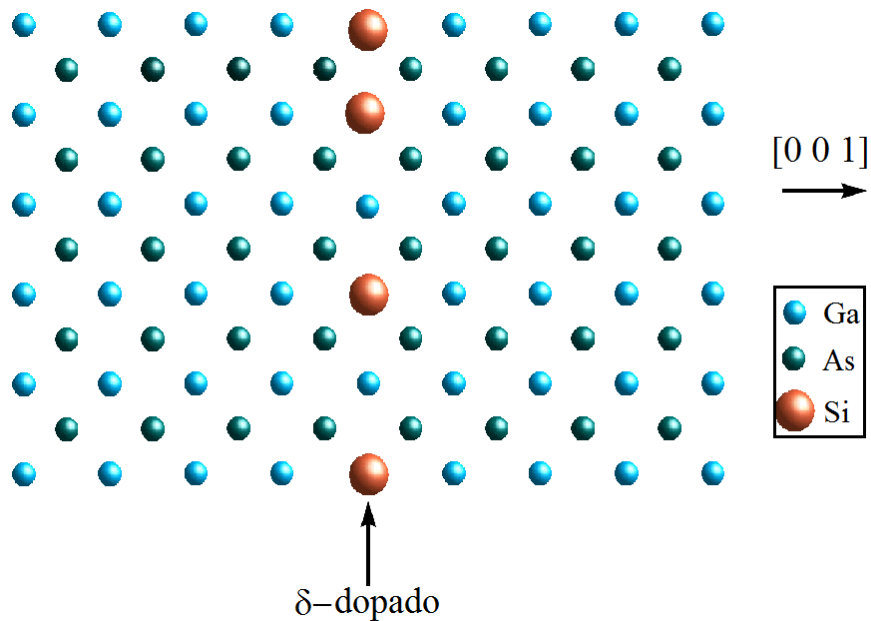


Fig. 2 Representación esquemática bidimensional de la distribución de impurezas sustitucionales (Si_{Ga}) tipo n en una matriz de GaAs.

figura 2. El ancho de la lámina del material con el que se dopa debe ser cero, tal que la expresión que describe dicho perfil de distribución de impurezas es $N_{2d}(z) = N_{2d}\delta(z)$, donde z es la dirección de crecimiento y $\delta(z)$ es la función $\delta(z)$ de Dirac, surgiendo de aquí el nombre de estas estructuras. Cabe mencionar que los pozos δ -dopados de impurezas son homoestructuras³. La densidad de impurezas que se coloca debe ser tan alta de manera que las órbitas medias de los portadores se solapen y formen así un gas bidimensional de electrones (*2DEG*). Esto forma un potencial electrostático en forma de V para los portadores de carga, que estarán localizados alrededor del plano por la atracción Coulombiana. La densidad de impurezas bidimensional de los sistemas δ -dopados típicamente son del orden de 10^{13} cm^{-2} .

³ Una heteroestructura generalmente se define cuando se tiene la unión de dos materiales distintos por el ejemplo el $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$, mientras que una homoestructura es cuando se tiene un mismo material dopado por regiones, como lo es el caso de la disposición δ -dopada de las impurezas.

1.1 Crecimiento de pozos δ -dopados.

La construcción de pozos δ -dopados se da a través de técnicas experimentales por un crecimiento epitaxial, ya que el dopar al semiconductor implica que la distribución de impurezas dopantes esté confinada en una sola capa, obteniendo tal característica al interrumpir el crecimiento epitaxial. Técnicas como la Epitaxia por Haces Moleculares *MBE* y la Deposición Química de Vapores Metalorgánicos *MOVCD* permiten realizar este tipo de procedimiento. La Epitaxia de Haces Moleculares fue utilizada por primera vez por Cho y Arthur [3] para crecer sistemas cuánticos semiconductores a nivel de capas atómicas. La *MBE* consiste en el crecimiento de capas epitaxiales mediante la reacción de uno o más haces moleculares térmicos con un sustrato cristalino, el crecimiento se da en condiciones de ultra-alto vacío (10^{-11} Torr) a fin de evitar la dispersión de las impurezas. Los haces moleculares se crean por el calentamiento de los materiales a depositar hasta que se vaporizan, el vapor se escapa y se deposita sobre el sustrato. Es posible interrumpir el flujo de cualquiera de los haces en el momento deseado, justo esta habilidad del método permite detener el flujo del Galio durante el crecimiento y sustituirlo por un haz de átomos de Silicio, para luego cerrar el flujo de ese último y continuar con el crecimiento del material original (*GaAs*). Por otro lado, la *MOVCD* es un método con el que se produce un crecimiento epitaxial de ciertos materiales, en particular de semiconductores originados a raíz de una reacción química en la superficie de compuestos orgánicos y metalorgánicos, en donde el crecimiento se debe a una reacción química.

2 Metodología

Nosotros resolvemos el problema de un electrón confinado en un pozo de potencial tipo *V*, que como sabemos es el producido por la disposición de las impurezas de Silicio en una sola capa atómica en una matriz de Arseniuro de Galio (pozo δ -dopado tipo *n* en *GaAs*). En la figura 3 mostramos el perfil de potencial tipo *V* con las correspondientes densidades de probabilidad que corresponden a cada subbanda de energía.

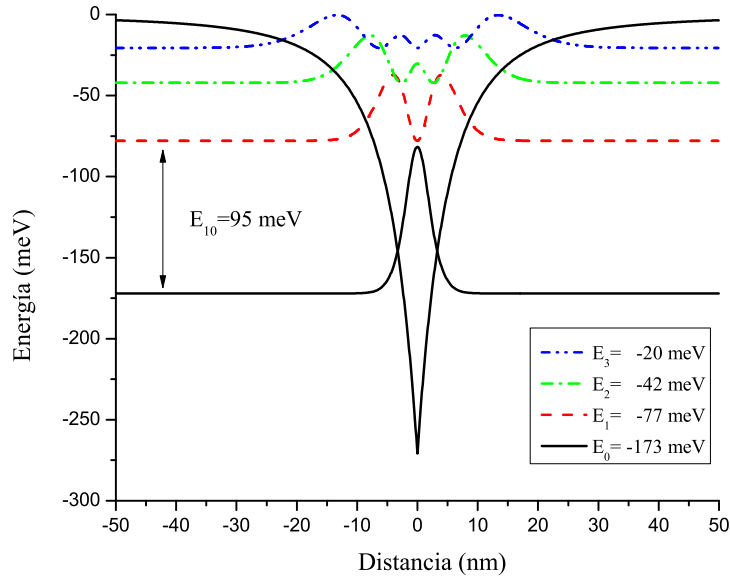


Fig. 3 Perfil de potencial para un pozo δ -dopado de impurezas simple en una matriz de *GaAs*. La densidad bidimensional de impurezas donoras es de $N_{2d} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. La profundidad del pozo es de 270 meV y muestran el estado base, así como los tres primeros estados excitados en las energías correspondientes.

Este perfil de potencial es el que se obtiene de resolver el problema de un solo plano dopado de impurezas en la aproximación de Thomas-Fermi, suponiendo válida la aproximación de masa efectiva al considerar dicha capa δ -dopada de impurezas como una capa de cargas positivas de ancho despreciable, modelado por

$$N_{2d}(z) = N_{2d}\delta(z), \quad (1)$$

donde N_{2d} representa la densidad bidimensional de impurezas que se suponen están completamente localizadas en un plano como lo refleja la ecuación (1). Posteriormente se resuelve la ecuación de Thomas-Fermi en el límite de altas densidades ($\sim 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). En 1990 Ioriatti [4] demostró que la solución a la ecuación de Thomas-Fermi para el problema del pozo δ -dopado de impurezas está dado por

$$V_{Ior}(z) - \mu = -\frac{\gamma^2}{(\gamma|z| + z_{0n})^4}, \quad (2)$$

donde μ representa la energía de Fermi, $\gamma = 2/15\pi$, finalmente

$$z_{0n} = \left(\frac{\gamma^3}{\pi N_{2d}} \right)^{1/5}, \quad (3)$$

representa una escala de longitud fundamental para el sistema, que implica que el ancho medio del pozo se encoge o disminuye al aumentar la densidad bidimensional de impurezas N_{2d} como $N_{2d}^{-1/5}$. A partir de este momento, nosotros debemos fijar el valor del nivel de Fermi en el borde de la banda de conducción, que es nuestro origen de energía, es por esto que $\mu=0$. Este modelo de potencial ha sido ampliamente usado para resolver el problema de eigenvalores de Schrödinger en este tipo de sistemas con diferentes métodos numéricos.

Con este potencial resolvemos entonces la ecuación de Schrödinger unidimensional, considerando el efecto de un campo eléctrico externo aplicado de intensidad F

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - eFz \right] \psi(z) = E\psi(z), \quad (4)$$

donde $\psi(z)$ es la función envolvente. Teniendo en cuenta que estamos trabajando en la aproximación de masa efectiva y tratamos las impurezas en el modelo hidrogenoide, donde el radio de Bohr efectivo (a_0^*) y del Rydberg efectivo (R_y^*) están dados por [5];

$$a_0^* = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon}{e^2m_e^*} = \frac{\epsilon/\epsilon_0}{m_e^*/m_0} * a_0 \quad (5)$$

$$R_y^* = -\frac{m_e^*e^4}{2(4\pi\epsilon)^2\hbar^2} = \frac{m_e^*/m_0}{(\epsilon/\epsilon_0)^2} * R_y, \quad (6)$$

siendo a_0 el radio de Bohr, que representa el valor más probable para la órbita en el estado base del electrón del átomo de hidrógeno, y R_y el Rydberg que es la energía de ionización de este mismo electrón que corresponden a valores numéricos de $a_0 = 0.529177 \text{ \AA}$ y 13605.8 meV , respectivamente.

En el caso particular de una impureza tipo n en el Arseniuro de Galio, considerando el valor de masa efectiva de $m_e^* = 0.069m_0$ y la

constante dieléctrica estática relativa de $\epsilon_r = 12.65$, encontramos que el radio de Bohr efectivo (ecuación 5) para esta impureza hidrogenoide poco profunda es $a_0 \sim 95.9 \text{ \AA}$ y el Rydberg efectivo (ecuación 6) está dado por $R_y^* \sim 5.93 \text{ meV}$.

Es preciso destacar aquí que la aproximación de Thomas-Fermi para la descripción de estados de electrones y huecos en pozos cuánticos δ -dopados ha sido empleada con éxito en una amplia variedad de situaciones e, incluso, en el estudio de la respuesta óptica no lineal asociada a transiciones intersubbanda en esta clase de sistemas [6-13].

2.1 Método de cálculo

Una vez que tenemos el potencial en unidades efectivas usamos el método desarrollado por Xia y Fan [14], donde se expresan las funciones de onda en términos de las soluciones de un pozo de potencial cuadrado infinito

$$\psi(z) = \left(\frac{2}{L_\infty}\right)^{1/2} \sum_{m=1}^{\infty} C_m \sin\left(\frac{m\pi z}{L_\infty} + \frac{m\pi}{2}\right), \quad (7)$$

donde L_∞ es la longitud del pozo cuadrado infinito que contiene a nuestro sistema.

Una vez que tenemos la estructura electrónica del sistema de estudio, en este caso particular usando la expansión de la función de onda dada por la ecuación 7 en la ecuación de Schrödinger (ecuación 4), procedemos al cálculo de las propiedades ópticas del sistema cuántico.

2.2 Expresiones para el cálculo de propiedades ópticas no lineales

Las propiedades ópticas se relacionan con la interacción entre un material y las radiaciones electromagnéticas en forma de ondas o partículas de energía, conocidas como fotones. Esta interacción produce una diversidad de efectos tales como: absorción, transmisión, reflexión, refracción, entre otros. Si los fotones incidentes interactúan con los electrones de valencia pueden ocurrir varias cosas: los fotones ceden energía al material, en cuyo caso hay absorción; o puede

ser que cuando los fotones aportan energía, de inmediato el material emite electrones de idéntica energía, de forma que se produce reflexión. También puede que los fotones no interactúen con la estructura electrónica del material, en ese caso ocurre la transmisión. En cualquiera de estos tres casos, la velocidad de los fotones cambia, este cambio propicia la refracción.

En condiciones típicas de temperatura y de interacción con luz, los materiales presentan valores fijos en sus constante de absorción, constante dieléctrica y en la polarización que se induce. Sin embargo, al trabajar con haces de luminosos de alta intensidad, estos valores dejan de ser constantes y dan pie a lo que se llaman propiedades ópticas no lineales. Las características de las propiedades ópticas lineales y no lineales de los materiales son de gran importancia en el desarrollo de la tecnología en fotónica y electrónica.

El interés del estudio de la óptica no lineal comienza en 1960, cuando Maiman descubre el láser [15], seguido por la observación que realizó Franken *et al.* de la generación de los segundos armónicos en un cristal de cuarzo en 1961 [16]. A partir de entonces, diversos grupos se han dedicado en el aspecto teórico, así como en la parte experimental de sistemas ópticamente no lineales para su aplicación en dispositivos.

El origen de estas propiedades radica en la magnitud de la interacción de la luz con la materia. En el caso concreto de un material para que su respuesta óptica no lineal sea importante, se requiere que la intensidad del campo electromagnético sea elevada. Esta interacción dará lugar a que una de las componentes del campo electromagnético resultante quede alterada en fase, frecuencia, amplitud u otras características de propagación del campo.

Para entender la óptica no lineal, se considera un momento dipolar por unidad de volumen o polarización $\tilde{P}(t)$ de un material que depende de la magnitud de un campo eléctrico $\tilde{E}(t)$ aplicado. En el caso convencional (lineal), la polarización eléctrica inducida depende linealmente de la magnitud del campo eléctrico de manera tal, que se puede expresar como:

$$\tilde{P}(t) = \epsilon_0 \chi^{(1)} \tilde{E}(t), \quad (8)$$

donde la constante de proporcionalidad $\chi^{(1)}$ es conocida como la susceptibilidad dieléctrica lineal y ϵ_0 es la constante de permitividad

dieléctrica en el vacío. En la óptica no lineal, por la presencia de campos eléctricos de alta intensidad, la polarización $\tilde{P}(t)$ pierde la proporcionalidad lineal entre la polarización y el campo eléctrico. Por lo tanto, la polarización ahora ya no es lineal y se expresa en series de potencias del campo eléctrico,

$$\tilde{P}(t) = \varepsilon_0 \left[\chi^{(1)} \tilde{E}(t) + \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t) + \chi^{(3)} \tilde{E}^3(t) + \dots \right]. \quad (9)$$

Las cantidades $\chi^{(2)}$ y $\chi^{(3)}$ son conocidas como las susceptibilidades no lineales de segundo y tercer orden, respectivamente. Entonces de la misma forma las polarizaciones de segundo y tercer orden están definidas como

$$\tilde{P}^{(2)}(t) = \varepsilon_0 \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t), \quad (10)$$

$$\tilde{P}^{(3)}(t) = \varepsilon_0 \chi^{(3)} \tilde{E}^3(t). \quad (11)$$

Las expresiones para las contribuciones lineales y no lineales para los coeficientes de absorción óptica se encuentran típicamente a través del formalismo de la matriz densidad para la susceptibilidad dieléctrica del sistema, su deducción involucra una expansión en órdenes de la intensidad de la luz incidente I . La solución para la ecuación de Von Neumann a diferentes órdenes lleva a las fórmulas para las cantidades en consideración [17-24]. Por ejemplo, el coeficiente de absorción lineal intersubbanda de primer orden está dado por

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega e^2 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \left[\frac{\rho \hbar \Gamma_{10} |M_{10}|^2}{(E_{10} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2} \right], \quad (12)$$

el coeficiente de absorción no lineal (corrección de tercer orden) es

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = -\omega e^4 \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} \left(\frac{I}{2n\varepsilon_0 c} \right) \frac{\rho \hbar \Gamma_{10} |M_{10}|^2}{[(E_{10} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2]^2} \left\{ 4|M_{10}|^2 - \frac{|M_{11} - M_{00}|^2 [3E_{10}^2 - 4E_{10}\hbar\omega + \hbar^2(\omega^2 - \Gamma_{10}^2)]}{E_{10}^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2} \right\}, \quad (13)$$

por lo tanto el coeficiente de absorción total estará dado por la suma de los dos términos anteriores

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I). \quad (14)$$

Se sabe que todos los materiales tienen un índice de refracción, es decir, cómo es que la velocidad de la luz que está interactuando con él se ve afectada por la interacción con el material. El cambio relativo expresa como es que el índice de refracción del sistema cambia con respecto al índice de refracción del material.

El cambio relativo del índice de refracción de primer orden está dado por

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n} = \frac{\rho e^2 |M_{10}|^2}{2n^2 \epsilon_0} \left[\frac{E_{10} - \hbar\omega}{(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \right], \quad (15)$$

y la correspondiente corrección a tercer orden es

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n} = & - \frac{\rho e^4 |M_{10}|^2}{4n^3 \epsilon_0} \frac{\mu c I}{[(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2]^2} \\ & \left[4(E_{10} - \hbar\omega) |M_{10}|^2 - \frac{(M_{11} - M_{00})^2}{(E_{10})^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \left\{ (E_{10} - \hbar\omega) \right. \right. \\ & \left. \left. [E_{10}(E_{10} - \hbar\omega) - (\hbar\Gamma_{10})^2] - (\hbar\Gamma_{10})^2 (2E_{10} - \hbar\omega) \right\} \right], \quad (16) \end{aligned}$$

la contribución total es la suma de la parte lineal (15) más la parte no lineal (16)

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n}. \quad (17)$$

En estas expresiones, $M_{ij} = \langle \phi_i | z | \phi_j \rangle$; ϵ_0 es la permitividad en el vacío, c es la velocidad de la luz en el vacío, μ representa la permeabilidad magnética ($= 4\pi \times 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$), $n = \sqrt{\epsilon}$ es el índice de refracción del material base y e es la carga eléctrica fundamental. Además, $E_{10} = E_1 - E_0$ es la diferencia de energía de la transición energética fundamental, mientras que $\hbar\Gamma_{10} = \hbar/T_{10}$ es el término de amortiguamiento asociado con el tiempo de vida media de los electrones debida a la dispersión intersubbanda. I (en unidades de MW/cm^2) es la intensidad de la radiación óptica en el sistema que está relacionada con el campo eléctrico de la luz incidente a través de la expresión

$$I = \frac{2n}{\mu c} |E(\omega)|^2. \quad (18)$$

La concentración ρ , que aparece en estas expresiones se refiere a la densidad tri-dimensional de electrones en la estructura que corresponde a la diferencia entre la densidad volumétrica entre el estado base y E_0 y el primer estado excitado E_1 en el gas electrónico bidimensional (2DEG), $\rho_0 - \rho_1$. En este estudio suponemos fija dicha densidad.

3 Estructura electrónica

En esta sección se presenta la estructura electrónica para un pozo δ -dopado doble asimétrico, en donde se varía la distancia de separación entre las capas δ -dopadas, la densidad de impurezas del segundo pozo N_{2d}^R manteniendo fija la densidad del primer pozo N_{2d}^L , así como la aplicación de un campo eléctrico externo. El obtener la estructura electrónica a través de los parámetros del sistema antes mencionados, permitirá entender el comportamiento físico del sistema, proponiendo valores para los cuales existan las propiedades ópticas que se están estudiando. El cálculo de la estructura electrónica se realizó resolviendo a través de la aproximación de la masa efectiva, el hamiltoniano dado por la ecuación (4), obteniendo las funciones de onda a través de una expansión sobre una base ortogonal de funciones sinusoidales (ec. 7) asociadas con el pozo rectangular de paredes infinitas con un ancho de $L_\infty=100$ nm, tomando en cuenta la masa efectiva correspondiente al *GaAs*, siendo $m^*=0.067$, así como la constante dieléctrica relativa $\epsilon_r=12.5$.

La forma de verificar la validez del modelo utilizado para el potencial, es analizando por un lado el caso límite cuando ℓ_p es muy grande, de manera tal que se pueden considerar a los pozos δ -dopados como independientes, lo cual quiere decir que los niveles correspondientes a ellos, coinciden con los de un pozo δ -dopado simple, concordando bastante bien con cálculos previos [25]. Por otro lado, comparando nuestros resultados con un cálculo autoconsistente [26], en donde la transición principal $E_1 - E_0$ reportada en él es de 9.5 meV, mientras que la obtenida para nuestro modelo es de 10.5 meV utilizando $\ell_p=15$

nm y $N_{2d}^L = N_{2d}^R = 2.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, resultando ser una buena aproximación.

En las siguientes subsecciones presentamos primero el modelo de potencial del sistema δ -dopado doble tipo n , luego su estructura electrónica como función de la separación entre los pozos δ -dopados –casos simétricos y asimétricos–, la densidad de impurezas del segundo pozo N_{2d}^R y el campo eléctrico aplicado. En todos los casos se muestra el perfil de potencial con sus respectivas densidades de probabilidad, así como también la diferencia de energía entre cada estado.

3.1 Perfil de potencial de pozos δ -dopados dobles tipo n

El perfil de potencial del pozo δ -dopado doble, está dado por:

$$V(z) = -\frac{\gamma^2}{(\gamma|z + \ell_p/2| + z_0^L)^4} - \frac{\gamma^2}{(\gamma|z - \ell_p/2| + z_0^R)^4}. \quad (19)$$

En esta expresión ℓ_p es la separación entre capas δ -dopadas de impurezas, $\gamma = 2/15\pi$ es un parámetro del modelo y finalmente,

$$z_0^{R,L} = \left(\frac{\gamma^3}{\pi N_{2d}^{R,L}} \right)^{1/5}, \quad (20)$$

toma en cuenta la concentración de impurezas de cada capa.

Veamos ahora la dependencia de la estructura electrónica de cada parámetro involucrado.

3.2 Como función de la separación entre pozos ℓ_p

En la figura 4 se presenta el perfil de potencial de un sistema formado por dos pozos δ -dopados simétricos con densidades de impurezas $N_{2d}^L = N_{2d}^R = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para tres distancias de separación ℓ_p de 12, 18 y 24 nm.

En los tres casos se observa cómo es que la simetría del sistema induce a una simetría en las densidades de probabilidad de los cuatro primeros estados, es decir, el electrón se puede encontrar con igual

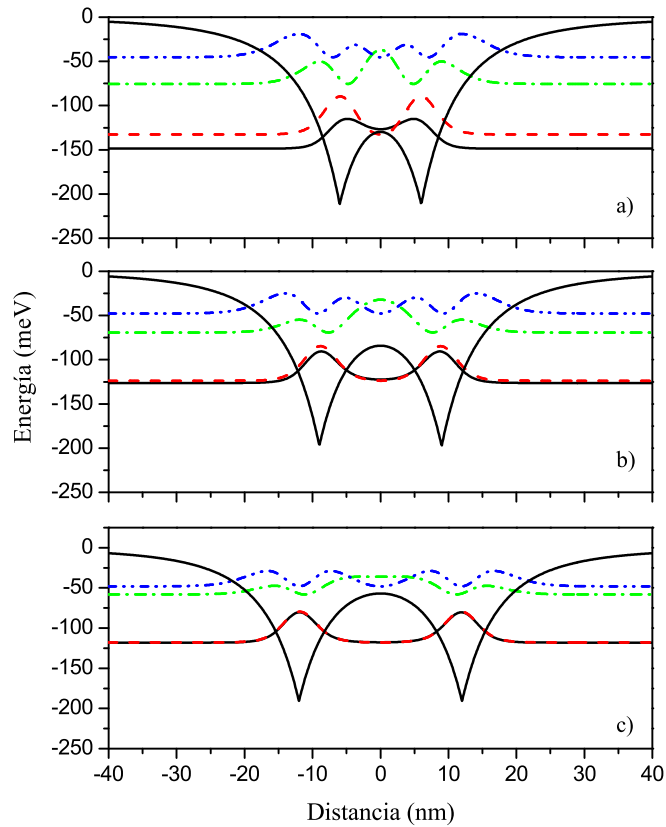


Fig. 4 Perfil de potencial y densidades de probabilidad de los primeros cuatro estados para un pozo δ -dopado doble simétrico, con densidad de impurezas $N_{2d}^L = N_{2d}^R = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y diferentes distancias de separación entre los pozos ℓ_p . a) $\ell_p=12 \text{ nm}$, b) $\ell_p=18 \text{ nm}$, c) $\ell_p=24 \text{ nm}$.

probabilidad en cada uno de los pozos respecto del origen. Cuando la distancia de separación de los pozos es pequeña, los niveles de energía se encuentran separados. Sin embargo, cuando la distancia de separación entre los pozos comienza a aumentar, el estado base y el primer estado excitado se tienden a juntar, de igual forma ocurre con el segundo y tercer estado excitado. Entonces pues, cuando la distancia entre los pozos es muy grande, ya no hay interacción entre ellos, lo cual significa que hay una degeneración en los niveles de energía.

En la figura 5 se presentan cuatro niveles de energía como función de la distancia de separación de los pozos δ -dopados en el rango de

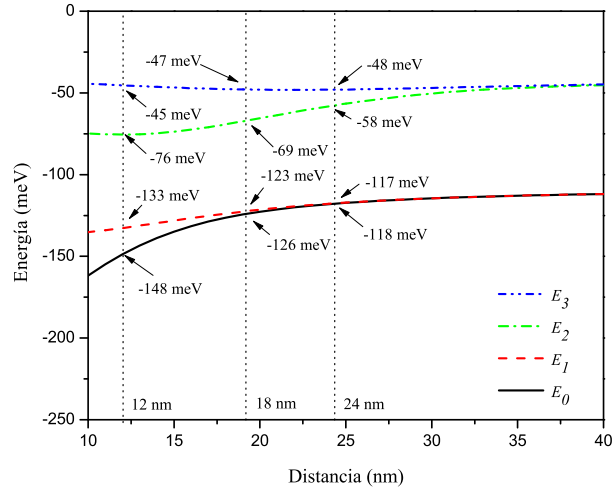


Fig. 5 Niveles de energía como función de la distancia de separación ℓ_p de los pozos δ -dopados simétricos con $N_{2d}^L = N_{2d}^R = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. E_0 estado base, E_1 primer estado excitado, E_2 segundo estado excitado y E_3 tercer estado excitado. Se muestran las diferencias de energía que corresponden a $\ell_p=12, 18$ y 24 nm.

10-40 nm. Se puede observar, cómo efectivamente hay una degeneración entre los niveles de energía. Entre el estado base y primer estado excitado la degeneración se da cuando la distancia entre los pozos es mayor a 24 nm, cuando la distancia es de 24 nm se ve como ya hay un desdoblamiento de niveles, ya que el estado base y el primer estado excitado se encuentran con una energía de $E_0=-118$ meV y $E_1=-117$ meV, respectivamente. Para el segundo y tercer estado excitado la degeneración se da para una distancia mayor a 35 nm. Cualitativamente a través de los valores de energía que corresponden a las distancias (12 nm, 18 nm y 24 nm) utilizadas en la figura 4, se observa que la diferencia de energía entre el estado base y primer estado excitado (E_{10}), así como entre el segundo y tercer estado excitado (E_{32}), aumenta conforme los pozos se van acercando. Lo cual es un comportamiento bien conocido para cualquier pozo doble simétrico.

Las figuras 6 y 7 muestran la estructura electrónica cuando al sistema está formado por dos pozos δ -dopados asimétricos. Ésta asimetría se da a través de la densidad de impurezas del pozo de la derecha N_{2d}^R que se está tomando en cuenta, en este caso esta den-

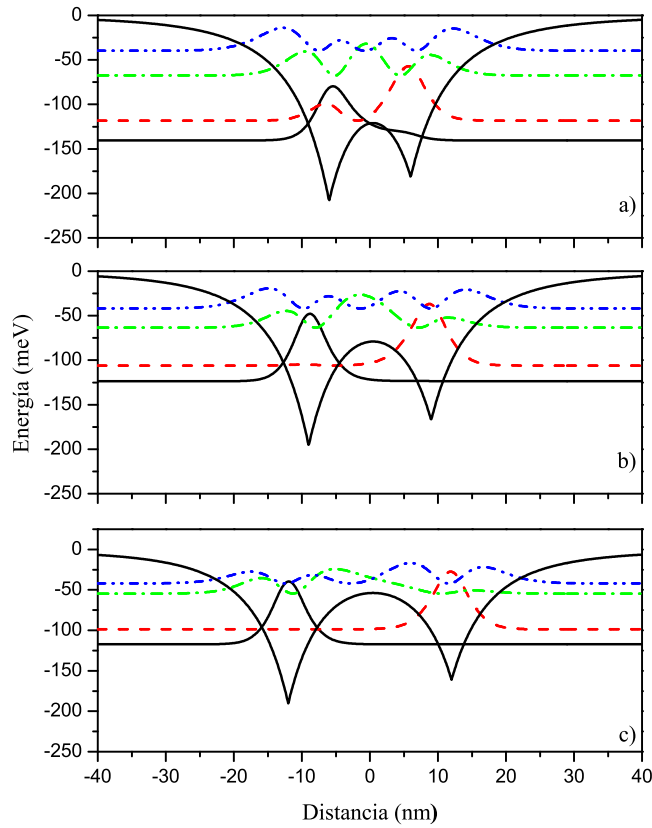


Fig. 6 Perfil de potencial y densidades de probabilidad de los primeros cuatro estados de energía para un pozo δ -dopado doble asimétrico, con densidad de impurezas $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y diferentes distancias de separación entre los pozos ℓ_p . a) $\ell_p=12 \text{ nm}$, b) $\ell_p=18 \text{ nm}$ y c) $\ell_p=24 \text{ nm}$.

sidad es de $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y la del pozo de la izquierda $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, al igual que en el caso simétrico se tomaron los mismos valores de la distancia entre los pozos. La figura 6 representa el perfil de potencial y la densidad de probabilidad para cuatro estados de energía del sistema antes mencionados.

Se observa cómo es que la densidad de probabilidad de los estados ya no es simétrica. Cuando la distancia entre los pozos es de 12 nm tal y como lo muestra la figura 6 a), la densidad de probabilidad del estado base se encuentra distribuida en los dos pozos, pero es mayor

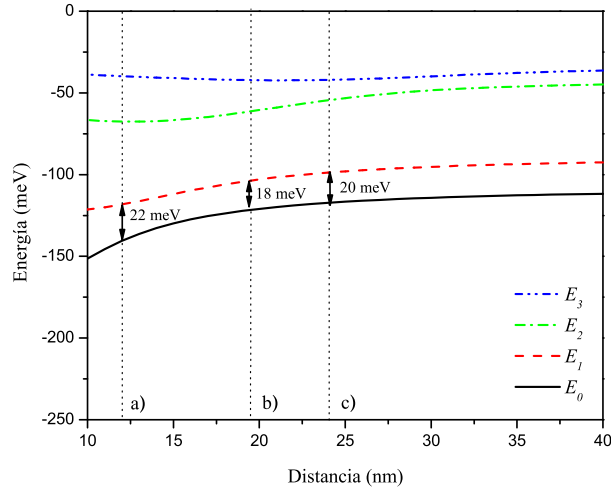


Fig. 7 Niveles de energía como función de la distancia de separación entre los pozos δ -dopados asimétricos con $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. E_0 estado base, E_1 primer estado excitado, E_2 segundo estado excitado y E_3 tercer estado excitado.

en el pozo de la izquierda, en el primer estado excitado la densidad de probabilidad está casi contenida en el pozo de la derecha, sin embargo hay una pequeña probabilidad en el pozo de la izquierda, es decir, ocurre lo contrario que en el estado base por cuestiones de ortogonalidad de las funciones de onda del sistema. En las figuras 6 b) y 6 c) la densidad de probabilidad del estado base se localiza en el pozo de la izquierda, mientras que en el primer estado excitado se encuentra totalmente contenida en el pozo de la derecha. Los niveles de energía están más juntos comparados con los de la figura 6 a) y además están casi en la misma energía, por lo tanto, conforme la distancia entre los pozos aumenta, la diferencia de energía entre estos dos estados permanece casi constante.

En la figura 7 se muestran los niveles de energía como función de la distancia entre los pozos δ -dopados para las mismas concentraciones de impurezas utilizadas en la figura 6. Se ve como es que ya no existe degeneración alguna en los niveles de energía comparado con el caso simétrico de la figura 5, pero sí como es que el estado base y primer estado excitado se comienzan a juntar, cuando la distancia

entre los pozos es muy pequeña, la diferencia de energía es mucho mayor, sin embargo, conforme la distancia aumenta, la diferencia de energía disminuye. La diferencia de energía E_{10} que se analiza es para las distancias utilizadas en la figura anterior 12 nm, 18 nm y 24 nm, obteniendo un valor de 22 meV, 18 meV y 20 meV, respectivamente. Es importante mencionar que se están mostrando cuatro estados, sin embargo, el cálculo de estas propiedades ópticas lineales y no lineales, está basado en la transición del estado base y primer estado excitado, por ello, sólo se muestra la diferencia de energía entre éstos.

3.3 Como función de la concentración de los pozos

En la figura 8 se presenta el perfil del potencial para un pozo δ -dopado doble asimétrico con sus correspondientes densidades de probabilidad para los cuatro estados (E_0 , E_1 , E_2 y E_3), en donde la densidad de impurezas del pozo de la izquierda permanece constante $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y la densidad del pozo de la derecha se toma para cuatro valores diferentes de $N_{2d}^R = 3.5, 4.5, 5.5, 6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, la distancia entre los pozos δ -dopados es $\ell_p = 12 \text{ nm}$.

En la figura 8 a) el valor de la densidad de impurezas del pozo de la derecha es $N_{2d}^R = 3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, se puede observar que la densidad de probabilidad del estado base está totalmente en la región del pozo δ -dopado de impurezas izquierdo y la del primer estado excitado está contenida casi completamente en el pozo δ -dopado de impurezas derecho, sin embargo, se observa que existe también una pequeña probabilidad en el primer pozo. En la figura 8 b), N_{2d}^R es $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y para esta configuración la densidad de probabilidad del estado base se distribuye en los dos pozos, pero es mayor en el primero, en el primer estado excitado está compartida entre las regiones de los dos pozos δ -dopados. En la figura 8 c) la densidad de impurezas del pozo de la derecha N_{2d}^R supera la densidad de impurezas del pozo de la izquierda N_{2d}^L , se observa entonces que la densidad de probabilidad del estado base se desplaza a la región del pozo δ -dopado derecho, la causa que lo origina es que esta región del pozo es ahora más atractiva (profunda). La densidad de probabilidad del primer estado excitado se encuentra claramente en la región del pozo δ -dopado izquierdo. Finalmente en la figura 8 d) que corresponde a $N_{2d}^R = 6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, en

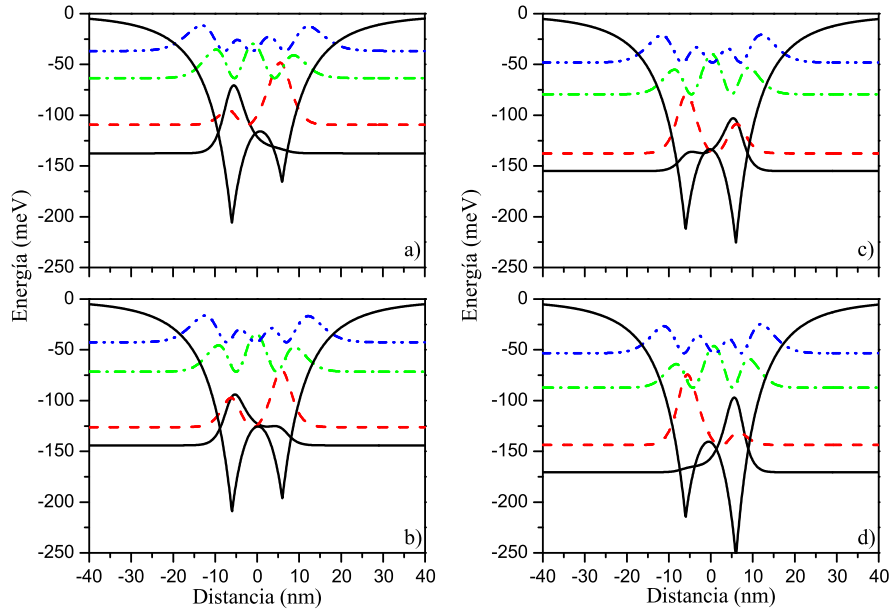


Fig. 8 Perfil del potencial y densidades de probabilidad de los primeros cuatro estados para un pozo δ -dopado doble asimétrico con una distancia de separación entre los pozos de $\ell_p=12$ nm. La densidad de impurezas del pozo δ -dopado de la izquierda (primer pozo) N_{2d}^L se encuentra fija en $5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y la densidad del pozo de la derecha N_{2d}^R con valores de a) 3.5, b) 4.5, c) 5.5 y d) 6.5 todos en unidades de $\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

contraste con la figura 8 a), las densidades de probabilidad del estado base y primer estado excitado se localizan en la región del pozo del lado derecho e izquierdo, respectivamente. Este análisis es importante para investigar en cuales regiones y con que parámetros del sistema los elementos de la matriz de dipolo M_{ij} no son nulos.

En la figura 9 se reportan los primeros cuatro niveles de energía del sistema como función de la densidad de impurezas del pozo de la derecha N_{2d}^R en el rango de 0 a $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Se observa que la diferencia de energía de transición entre el estado base y el primer estado excitado ($E_1 - E_0$) decrece hasta el valor de $N_{2d}^R = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ siendo de 16 meV (que corresponde al caso simétrico) y, a partir de este punto, esta diferencia de energía comienza a incrementar nuevamente. El valor de esta diferencia para las densidades utilizadas en la figura 8 a) $3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, b) $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, c) $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y d) $6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ es 27 meV, 18 meV, 18 meV y 28 meV, respecti-

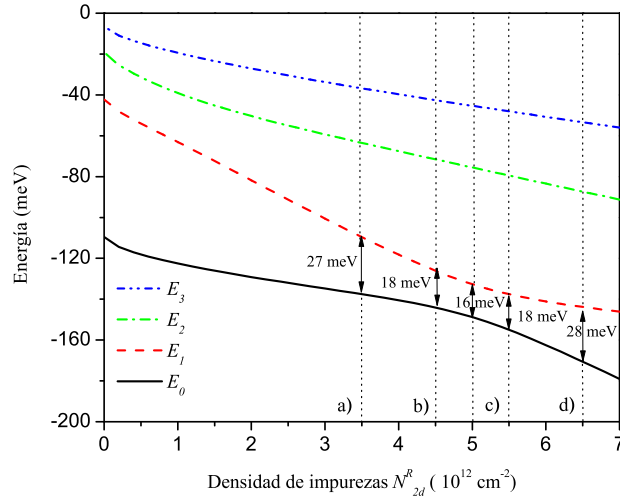


Fig. 9 Niveles de energía como función de la densidad de impurezas del pozo de la derecha N_{2d}^R . E_0 estado base, E_1 primer estado excitado, E_2 segundo estado excitado, E_3 tercer estado excitado. $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ $\ell_p = 12 \text{ nm}$.

vamente. Esta diferencia de energía determina la localización de los picos resonantes para el caso del coeficiente de absorción que se discutirá en la siguiente sección.

3.4 Como función del campo eléctrico F aplicado

Finalmente toca investigar el efecto que tiene la aplicación de un factor externos, como lo es un campo electrico aplicado a lo largo de la dirección de crecimiento en un rango de $-20 < F < 20 \text{ kV/cm}$.

En la figura 10 se presenta el perfil de potencial y la densidad de probabilidad de los primeros dos estados de energía (E_0 , E_1) para un pozo δ -dopado doble asimétrico, fijando la densidad de impurezas en ambos pozos que conforman el sistema ($N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), en la cual se investigan los efectos producidos por un campo eléctrico estacionario en la estructura electrónica del sistema. En la figura 10 a) se observa que el campo eléctrico aplicado, cuyo valor es de F es 5.0 kV/cm , no tiene influencia significativa

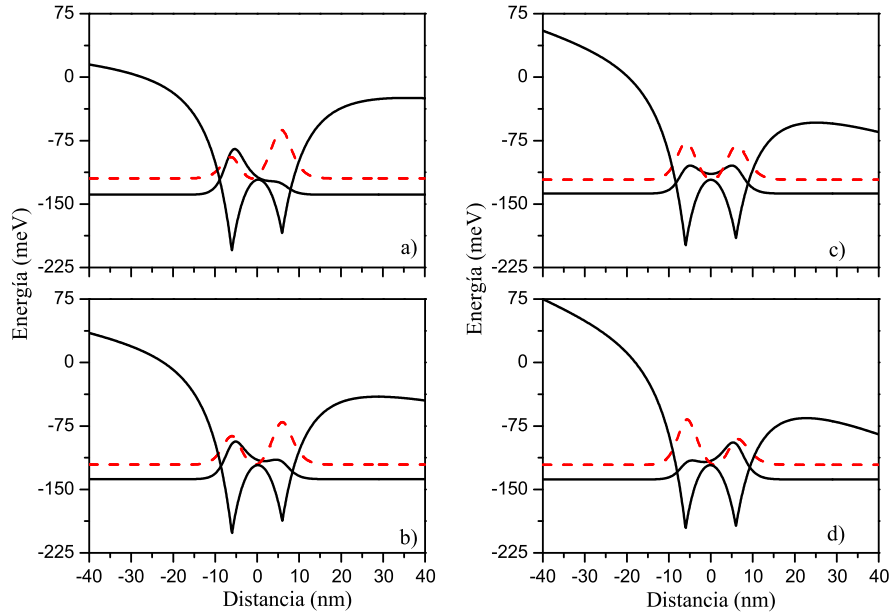


Fig. 10 Perfil del potencial y densidades de probabilidad del estado base y primer estado excitado para un pozo δ -dopado doble asimétrico aplicando un campo eléctrico de a) 5 kV/cm, b) 10 kV/cm, c) 15 kV/cm y d) 20 kV/cm. La distancia entre los pozos es $\ell_p=12$ nm, la densidad de impurezas del pozo de la izquierda y de la derecha son $5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, respectivamente.

en la estructura electrónica, comparándola con la figura 4 b). Cuando se comienza a incrementar el campo hasta $F = 10$ kV/cm tal y como se muestra en la figura 10 b) se observa que tampoco existe modificación alguna en la estructura electrónica del sistema, sin embargo, cuando el campo alcanza el valor de $F = 15$ kV/cm que corresponde a la figura 10 c), la densidad de probabilidad para el estado base y primer estado excitado se vuelve casi simétrica, sólo por el efecto del campo eléctrico. Finalmente para $F = 20$ kV/cm, la densidad de probabilidad del estado base está totalmente contenida en el pozo δ -dopado de la derecha y la del primer estado excitado se encuentra contenida en los dos pozos con mayor probabilidad en el pozo de la izquierda tal y como queda claro de la figura 10 d).

La figura 11 muestra el estado base y primer estado excitado de energía como función de un campo eléctrico externo aplicado en el rango de $-20 < F < 20$ kV/cm, para densidades $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12}$

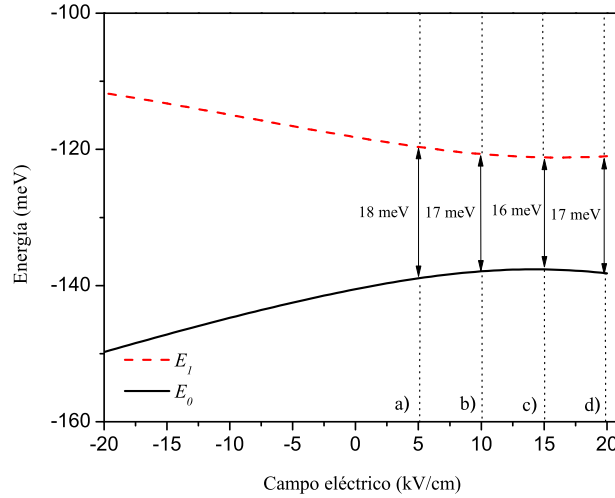


Fig. 11 Niveles de energía como función de un campo eléctrico externo aplicado. E_0 estado base, E_1 primer estado excitado, E_2 segundo estado excitado, E_3 tercer estado excitado. $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $\ell_p = 12 \text{ nm}$. Se presentan las diferencias de energía entre el estado base y el primer estado excitado para cada valor del campo eléctrico aplicado.

cm^{-2} y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y una distancia de separación entre los pozos de $\ell_p = 12 \text{ nm}$. La diferencia de energía $E_1 - E_0$, cuando el campo eléctrico tiene un valor de $F = 5 \text{ kV/cm}$, es 18 meV . Por otro lado el campo eléctrico aplicado, cuando la diferencia de energía es mínima (16 meV), tiene un valor de $F = 15.0 \text{ kV/cm}$. Finalmente para $F = 20.0 \text{ kV/cm}$, $E_1 - E_0 = 17 \text{ meV}$. Entonces, la diferencia de energía entre los dos primeros estados decrece de -20 a 15 kV/cm .

4 Coeficiente de absorción e índice de refracción

En esta última sección, antes de dar conclusiones generales, se presentan los resultados de las propiedades ópticas lineales y la corrección no lineal de tercer orden que se obtienen con base en la estructura electrónica de los pozos δ -dopados dobles asimétricos. Era necesario, antes de realizar el cálculo del coeficiente de absorción y del cambio relativo del índice de refracción del sistema cuántico, hacer un estudio

completo de la estructura electrónica como se presenta en la sección anterior. Se hace mención de esto, puesto que el estudiar de manera adecuada y profunda la estructura electrónica del sistema permite no sólo entender el comportamiento físico de éste, sino también investigar regiones de los parámetros del sistema para los cuales se obtienen las propiedades ópticas de interés.

La importancia de calcular la estructura electrónica completa, se fundamenta en lo siguiente; es necesario conocer para que rango de los parámetros del sistema se tienen elementos de matriz dipolar (M_{ij}) con valores no nulos, los cuales se definen como

$$M_{ij} = \int \psi_i(z) z \psi_j(z) dz = \langle \psi_i | z | \psi_j \rangle, \quad (21)$$

que fundamentalmente representa el momento dipolar asociado con la transición entre dos estados cuánticos i -ésimo y j -ésimo. Como se puede ver claramente de las expresiones para el coeficiente de absorción tanto en su parte lineal (ec. 12), como su corrección de tercer orden (ec. 13) así como las correspondientes al cambio relativo del índice de refracción, dados por las ecuaciones (15) y (16), dichas propiedades dependen de este elemento de matriz.

Entonces, es primordial el investigar cuando es que este elemento de matriz dipolar, dado por la ecuación (21), es diferente de cero. Queda claro que debe existir cierto traslape espacial en las funciones de onda del estado i -ésimo y j -ésimo para que el valor de la integral (21) sea diferente de cero. Por otro lado, si se introduce un cierto grado de asimetría al sistema, cambiando por ejemplo la densidad de impurezas del pozo de la derecha (N_{2d}^R), dicho traslape se hace menor y a su vez, justamente por la asimetría que se induce en las funciones de onda, la diferencia de elementos de matriz al cuadrado ($|M_{11} - M_{00}|^2$), que toma cuenta de dicha asimetría, empieza a ser distinto de cero y contribuye a las correcciones de tercer orden tanto en el coeficiente de absorción como en el cambio relativo del índice de refracción. En las siguientes subsecciones se muestra la dependencia de estas propiedades físicas como función de la separación entre los pozos (ℓ_p), de la densidad de impurezas del pozo de la derecha (N_{2d}^R), manteniendo fijos los demás parámetros, y finalmente como función del campo eléctrico externo aplicado (F). Se presentan y discuten los resultados del coe-

ficiente de absorción y cambio relativo del índice de refracción para cada caso.

4.1 En función de la separación entre pozos ℓ_p

Para investigar en que regiones de los parámetros de interés se tienen valores no-nulos del factor $|M_{10}|^2$, que es el elemento de la matriz dipolar al cuadrado y del factor $|M_{11} - M_{00}|^2$ que toma en cuenta la asimetría del sistema, se grafica la magnitud de estos dos parámetros como función de la separación entre los pozos, manteniendo fijas las concentraciones de impurezas de las capas δ -dopadas en $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para la capa de la izquierda y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para la de la derecha. En la figura 12 se presentan dichos comportamientos para un rango de separación entre pozos de 10 a 20 nm, que es el rango de separación para el que se encontraron valores significativos para $|M_{10}|^2$. Por otro lado, se observa que el factor de asimetría $|M_{11} - M_{00}|^2$, que participa en las correcciones de tercer orden, tanto del coeficiente de absorción (ec. 13) como del índice de refracción (ec. 16) aumentan de manera importante en este rango de separación entre pozos. Sin embargo, se debe enfatizar que es aún más importante el rol de $|M_{10}|^2$ ya que, como se observa de las expresiones anteriores, las propiedades ópticas dependen linealmente de éste y aunque el factor de asimetría crece de manera importante esto no impacta considerablemente en las propiedades físicas de interés, porque el valor de $|M_{10}|^2$ tiende a cero para separaciones mayores a 20 nm. Entonces, aunque $|M_{11} - M_{00}|^2$ crece de manera importante, las propiedades ópticas siguen moduladas por $|M_{10}|^2$ que tiende a cero cuando ℓ_p aumenta. Finalmente, se puede observar que el máximo valor de $|M_{10}|^2$ está cerca de los 11 nm, lo cual es muy importante porque nos dice que para una separación entre pozos de alrededor de este valor se tendrá un máximo del coeficiente de absorción y un mayor cambio relativo del índice de refracción. A continuación se muestran estas dos propiedades ópticas como función de la separación de los pozos ℓ_p .

En la figura 13 a) se muestra el comportamiento del coeficiente de absorción lineal $\alpha^{(1)}(\omega)$ para dos valores particulares de la distancia de separación entre pozos, la línea sólida representa dicho coeficiente de absorción para una separación entre pozos de 12 nm y la línea

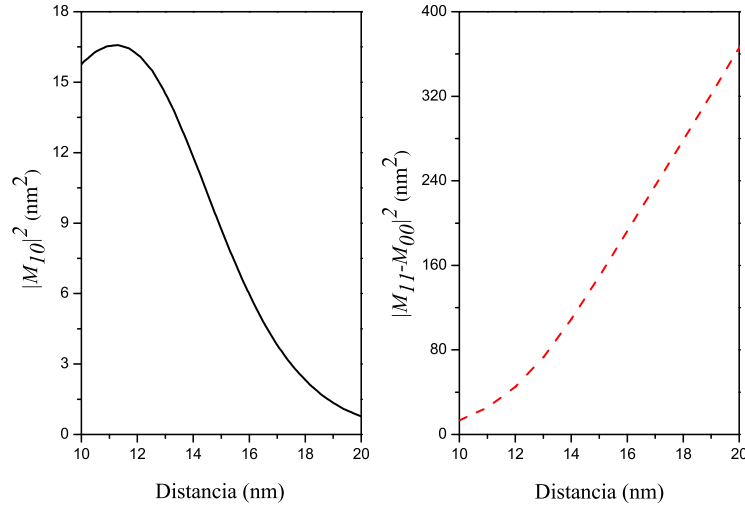


Fig. 12 Dependencia con la distancia de separación entre los pozos (ℓ_p) del elemento de matriz dipolar al cuadrado ($|M_{10}|^2$) y del factor $|M_{11} - M_{00}|^2$ para un pozo δ -dopado doble asimétrico con $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

punteada para el caso de 18 nm. Los picos de resonancia (que corresponden a la energía de transición $E_1 - E_0$) de este coeficiente, se encuentran en 22 y 18 meV, respectivamente para cada valor de la distancia. Se observa que para una distancia de separación de 18 nm el pico resonante se encuentra a la izquierda respecto del que corresponde a $\ell_p = 12$ nm, es decir, experimenta un corrimiento hacia el rojo como queda claro de la figura 7 donde se grafican los niveles de energía como función de ℓ_p . Además de que la intensidad de este pico es mucho menor que el pico resonante que corresponde a $\ell_p = 12$ nm como lo evidencia la figura 12 que dice que el parámetro $|M_{10}|^2$ es máximo alrededor de esta separación (12 nm) y disminuye conforme se separan cada vez más los pozos δ -dopados de impurezas (18 nm). En la figura 13 b) se presenta la corrección no lineal de tercer orden al coeficiente de absorción, la cual se sabe que es consecuencia de la intensidad del láser incidente, que en este caso es $I=0.1 \text{ MW/cm}^{-2}$, y de la asimetría del potencial. Se encuentra que la corrección de tercer orden es más importante para el caso de una separación entre pozos más pequeña, de hecho ésta es del 30% respecto de la contribución lineal para $\ell_p=12$ nm y del 20% de su respectiva parte lineal cuando

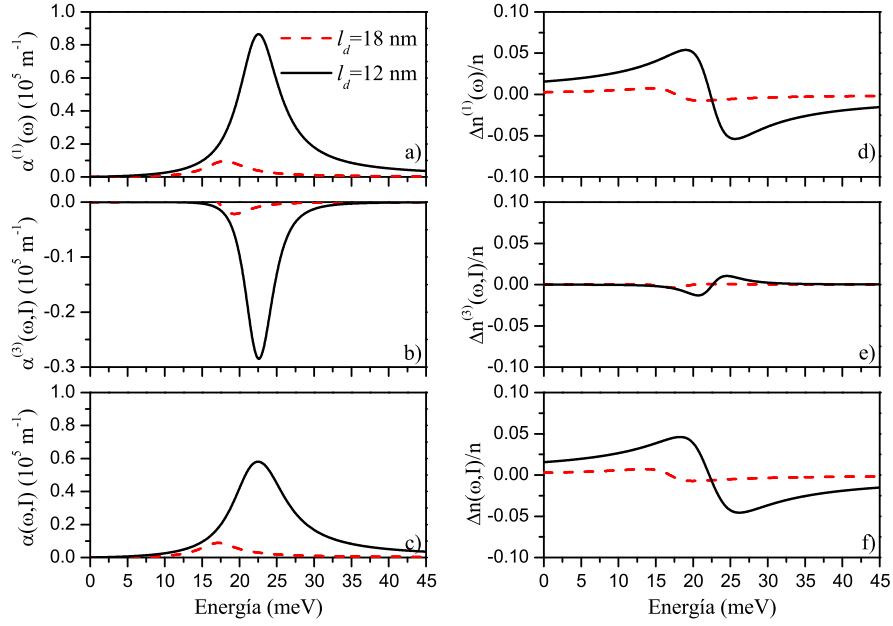


Fig. 13 a) Coeficiente de absorción lineal $\alpha^{(1)}(\omega)$, b) Corrección de tercer orden $\alpha^{(3)}(\omega, I)$, c) Coeficiente de absorción total $\alpha(\omega, I)$, d) Cambio relativo lineal del índice de refracción $\Delta n^{(1)}/n$, e) Corrección de tercer orden del cambio relativo de índice de refracción $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n$ y f) Cambio relativo total del índice de refracción $\Delta n(\omega, I)/n$ para un pozo δ -dopado doble asimétrico como función de la energía del fotón incidente para una separación entre pozos de $\ell_p=12$ nm y $\ell_p=18$ nm. Con concentraciones bidimensionales de impurezas $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

la separación entre pozos aumenta hasta los 18 nm. Finalmente se presenta el coeficiente de absorción total en la figura 13 c) que es la suma de las contribuciones lineales y las correspondientes correcciones de tercer orden. Lo importante de esta figura es el hecho de que cuando la separación entre pozos es cercana a los 20 nm, el coeficiente de absorción total prácticamente es cero, debido fundamentalmente a que el valor de $|M_{10}|^2$ va a cero en esta región, como queda claro de la figura 12 y que cuando ℓ_p es 12 nm este coeficiente de absorción total, incluida su corrección por efecto de láser intenso y asimetría del potencial es máxima.

Por otro lado, el cambio relativo del índice de refracción de primer orden $\Delta n^{(1)}/n$ como función de la energía del fotón incidente, se muestra en la figura 13 d). Se puede ver como es que existen regiones en donde Δn es mayor que n y otra en donde se vuelve negativo. La

distancia entre los pozos repercute de manera significativa en el valor de la energía para la cual $\Delta n=0$. Cuando los pozos se encuentran a una distancia de 12 nm la energía del fotón incidente para la cual el cambio relativo del índice de refracción de primer orden tiene el nodo, es 22 meV y para 18 nm se encuentra en 18 meV. Como se puede concluir del valor de las energías, el cambio relativo del índice de refracción experimenta también un corrimiento hacia el rojo, ya que la diferencia de energía del estado base y primer estado excitado disminuye. En la figura 13 e) se muestra la corrección del tercer orden del cambio relativo del índice de refracción, esta corrección es aproximadamente de un 20% en proporción del cambio relativo de primer orden en 12 nm y para 18 nm la corrección es de 14%, este comportamiento está de acuerdo a la dependencia que tiene esta corrección con $|M_{10}|^2$. La figura 13 f) representa el cambio relativo del índice de refracción total, en el cual se refleja la contribución de tercer orden para cada parámetro de distancia, por lo tanto, al igual que en el caso del coeficiente de absorción, el cambio relativo del índice de refracción (tanto en su parte lineal así como en su corrección de tercer orden) disminuye de forma significativa conforme la distancia entre los pozos δ -dopados aumenta.

4.2 Como función de la la concentración de los pozos

En la sección anterior se realizó el cálculo del coeficiente de absorción y el cambio relativo del índice de refracción lineal y no lineal de un sistema conformado por dos pozos δ -dopados asimétricos como función de la distancia ℓ_p entre los pozos, sin embargo, como se ha propuesto anteriormente, se quiere conocer también el comportamiento de estas propiedades en función de la asimetría generada al variar la densidad de impurezas del segundo pozo (N_{2d}^R), dejando fija la densidad de impurezas del primero (N_{2d}^L) así como la distancia entre ellos. Para esto, primeramente se analizan los elementos de la matriz dipolar $|M_{10}|^2$ y $|M_{11} - M_{00}|^2$ que como se sabe son los factores que más influyen en estas propiedades. En la figura 14 se muestra la dependencia de los elementos de la matriz dipolar $|M_{10}|^2$ y $|M_{11} - M_{00}|^2$ con la densidad de impurezas del pozo de la derecha (N_{2d}^R) en el rango de 0 a $7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, el pozo de la izquierda tiene una densidad

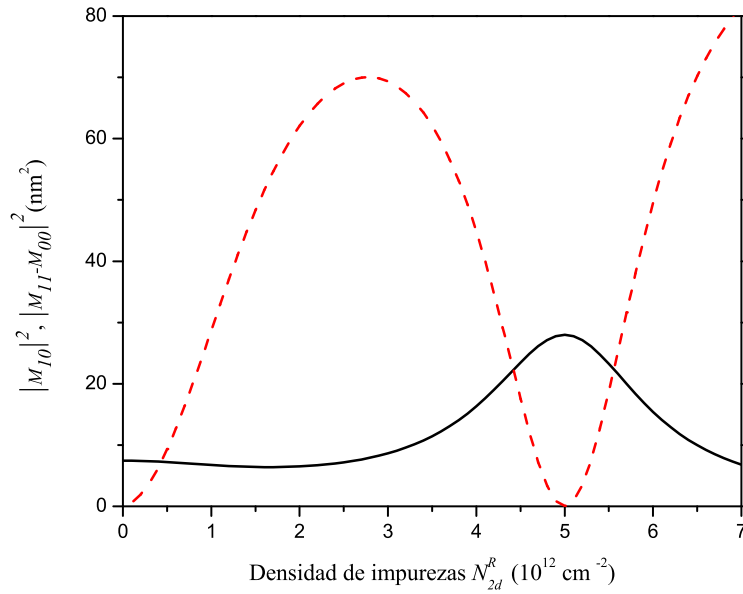


Fig. 14 Dependencia con la concentración de impurezas de la capa δ -dopada de la derecha (N_{2d}^R) del elemento de matriz dipolar al cuadrado $|M_{10}|^2$ (línea continua) y del factor $|M_{11} - M_{00}|^2$ (línea a trozos) para un pozo δ -dopado doble asimétrico con una distancia de separación entre pozos de 12 nm.

de $5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, siendo la distancia entre ellos de 12 nm. Se observa que el valor máximo de $|M_{10}|^2$ corresponde al caso simétrico ($N_{2d}^R = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$), por ello, para valores cercanos a esta densidad se tendrán coeficientes de absorción lineales máximos debido a su dependencia con $|M_{10}|^2$. Mientras tanto, el factor que se ve afectado por la asimetría del sistema $|M_{11} - M_{00}|^2$ tiene valor mínimo (cero) también en dicha densidad $N_{2d}^R = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Por esta razón la contribución de tercer orden en regiones cercanas con este valor de densidad, se verán afectadas simplemente por $|M_{10}|^2$ y por efectos de láser intenso.

A continuación se muestra el efecto que tienen los valores de $|M_{10}|^2$ y $|M_{11} - M_{00}|^2$ sobre las propiedades ópticas que se estudian en este trabajo, reportando el coeficiente de absorción y el cambio relativo en el índice de refracción en el rango de 3.5 a $6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, que es en el cual $|M_{10}|^2$ tiene valores importantes, fuera de este rango

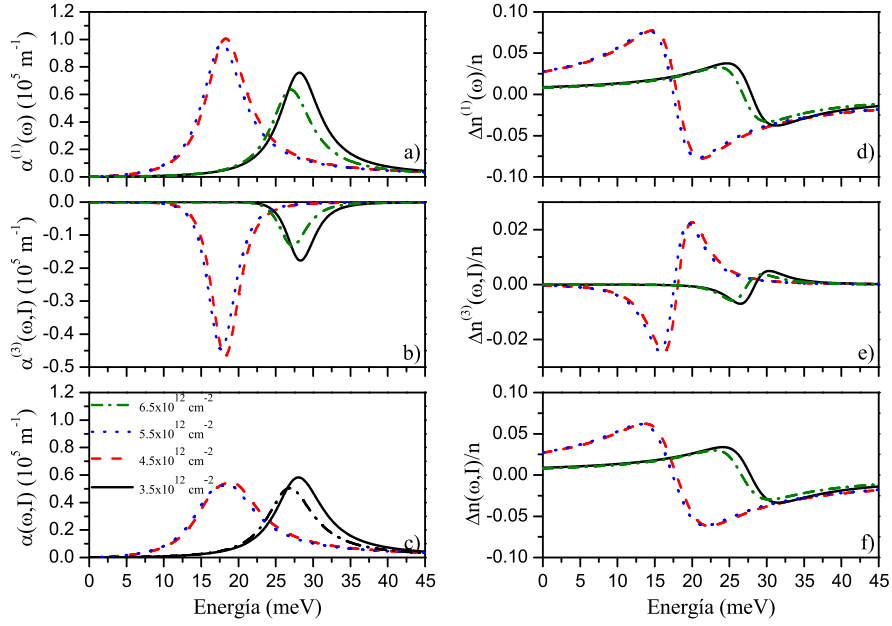


Fig. 15 a) Coeficiente de absorción lineal $\alpha^{(1)}(\omega)$, b) Corrección no lineal de tercer orden $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ y c) Coeficiente de absorción total $\alpha(\omega, I)$, d) Cambio relativo del índice de refracción de primer orden $\Delta n^{(1)}/n$, e) Corrección de tercer orden $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n$ y f) Cambio relativo total del índice de refracción $\Delta n(\omega, I)/n$ para un pozo δ -dopado doble asimétrico como función de la energía del fotón incidente con $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y varios valores de la densidad de impurezas del pozo de la derecha N_{2d}^R . La distancia entre los pozos es $\ell_p = 12 \text{ nm}$.

el valor de éste es muy pequeño. Por otro lado, se puede observar que $|M_{11} - M_{00}|^2$ tiene un valor máximo cuando $N_{2d}^R = 3.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, lo cual puede resultar interesante en las correcciones de tercer orden de ambas propiedades físicas, pero que sin embargo, no son tan importantes en este trabajo, puesto que se pretende investigar las regiones en las cuales se maximizan las propiedades ópticas de interés, las cuales se discuten enseguida.

En la figura 15 a) se reporta el comportamiento del coeficiente de absorción lineal $\alpha^{(1)}(\omega)$ para cuatro valores diferentes de N_{2d}^R . Los picos de resonancia para la energía de transición ($E_1 - E_0$) correspondientes a las densidades 3.5, 4.5, 5.5 y 6.5 en unidades de $\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se encuentran en 28, 18, 18 y 27 meV, respectivamente. Claramente se ve que para los tres primeros valores de N_{2d}^R se tiene un corrimiento al rojo tomando como base la densidad de $3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, sin embargo,

para el valor de $6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ el pico resonante experimenta un corrimiento al azul respecto a los otros. La situación anterior ocurre ya que la diferencia de energía entre el estado base y el primer estado excitado a partir de $N_{2d}^R = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ incrementa, tal y como lo muestra el análisis de la figura 7. La figura 15 b) corresponde a la corrección a tercer orden del coeficiente de absorción $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ debido a efectos de láser intenso, así como a la asimetría del sistema a través del factor $|M_{11} - M_{00}|^2$ que se presentó en la figura 14. Los picos resonantes están localizados en el mismo valor de energía que los del coeficiente lineal, sin embargo, la magnitud de la corrección de tercer orden es de aproximadamente de un 45% respecto de la contribución de primer orden para las densidades 4.5 y $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y del 20% para 3.5 y $6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Finalmente en la Figura 15 c) se muestra el coeficiente de absorción total donde se observa que la amplitud de $\alpha(\omega, I)$ es esencialmente igual para todas las concentraciones. La explicación de esto es que la magnitud de la corrección de tercer orden aumenta de manera considerable para los valores 4.5 y $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, sin embargo, disminuye para 3.5 y $6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Esto fundamentalmente es debido al hecho de que al variar la concentración de 4.5 a $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, el pozo se hace casi simétrico y hace que aumente significativamente el valor del elemento de matriz $|M_{10}|^2$ tal y como se muestra la figura 14. Esto implica por un lado, el aumento tan importante del máximo del coeficiente de absorción del sistema dada la dependencia lineal de $\alpha^{(1)}(\omega)$ con $|M_{10}|^2$, por otro lado, explica también la corrección de tercer orden, que como ya se discutió, es del orden de 45% y 20%. Cabe mencionar que la corrección de tercer orden depende también de la asimetría del sistema a través del factor $|M_{11} - M_{00}|^2$, el cual se vuelve más importante conforme el sistema es más asimétrico. Por ello, para los valores de $3.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ la corrección de tercer orden es menor porcentualmente que cuando la densidad de impurezas del pozo de la derecha vale $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Lo anterior se observa claramente en la figura 15 c), donde inclusive el máximo del coeficiente de absorción total es mayor para el caso más asimétrico que simétrico, en contraste con el caso del coeficiente de absorción lineal, debido a la correcciones de tercer orden.

Por otro lado, en la figura 15 d) se reporta el cambio relativo del índice de refracción de primer orden $\Delta n^{(1)}/n$ como función de la energía del fotón incidente, de la figura se observa que existen regiones

de energía del fotón, para cada valor de N_{2d}^R , donde Δn es “mucho” más grande que n , eventualmente el cambio relativo del índice de refracción es cero, posteriormente se vuelve negativo. La energía del fotón para la cual $\Delta n=0$ depende del valor de N_{2d}^R ($\hbar\omega$ del nodo), para ello cuando N_{2d}^R tiene valores de 3.5 (28 meV), 4.5 (18 meV), y $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (18 meV). Esta energía del fotón incidente (para la cual $\Delta n=0$) experimenta un corrimiento hacia el rojo, pero cuando $N_{2d}^R=6.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ (27 meV) sufre un cambio hacia el azul respecto a las otras densidades. Además para N_{2d}^R de 4.5 y $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, la diferencia del índice de refracción Δn es más significativa aun que la correspondiente al conjunto de los otros valores, por los mismos argumentos ya mencionados de la dependencia con $|M_{10}|^2$. En la figura 15 e) se reporta la corrección de tercer orden $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n$ del cambio relativo del índice de refracción, el cual es un 20% de la magnitud del cambio relativo del índice de refracción de primer orden para las densidades de 4.5 y $5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Finalmente en la figura 15 f) se reporta el cambio relativo total del índice de refracción del sistema, el cual considera una vez más la dependencia de este parámetro tanto en $|M_{10}|^2$ como la asimetría del sistema a través de $|M_{11} - M_{00}|^2$.

4.3 Como función del campo eléctrico F aplicado

Finalmente otro parámetro a considerar y que además induce más asimetría al pozo δ -dopado doble, es un campo eléctrico externo. Tal y como se vió en el cálculo de la estructura electrónica, el aplicarlo sobre el sistema cambia la interacción y traslape entre las funciones de onda, por lo cual, los elementos de la matriz dipolar también se ven afectados. La figura 16 muestra la dependencia con el campo eléctrico, en el rango de $-20 < F < 20 \text{ kV/cm}$, de los elementos $|M_{10}|^2$ y $|M_{11} - M_{00}|^2$ para un sistema donde la densidad de impurezas del primer pozo es $N_{2d}^L=5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y la densidad del segundo es $N_{2d}^R=4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, siendo la distancia entre ellos de 12 nm.

Se observa como el elemento $|M_{10}|^2$ incrementa hasta el valor de $F=15 \text{ kV/cm}$ en donde alcanza su valor máximo, y de la figura 10 c) que corresponde a este valor del campo, se puede observar que a pesar de que el perfil de potencial no es simétrico, si lo son así las funciones de onda, lo cual por un lado maximiza el valor de $|M_{10}|^2$ y por otro an-

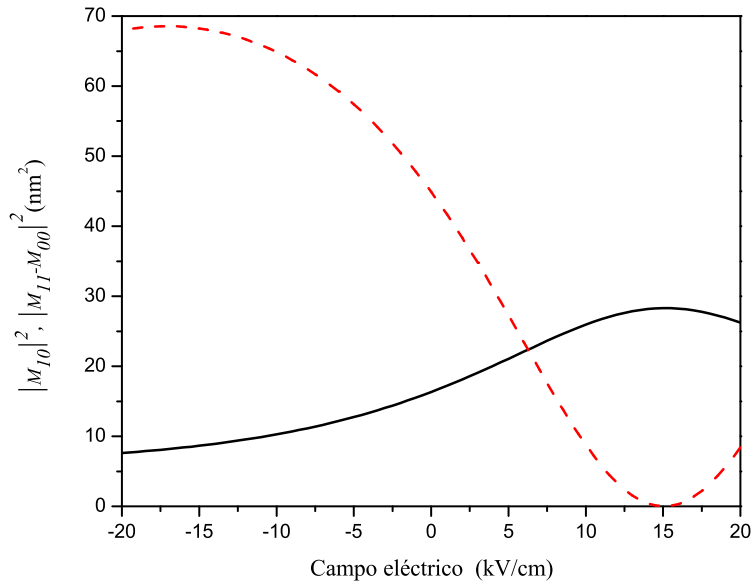


Fig. 16 Dependencia con el campo eléctrico externo F del valor del elemento $|M_{10}|^2$ (línea continua) y $|M_{11} - M_{00}|^2$ (línea a trozos) para el sistema de estudio cuando la separación entre pozos es de 12 nm y las concentraciones de impurezas son de $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ para los pozos de la izquierda y derecha, respectivamente.

ula el factor de $|M_{11} - M_{00}|^2$. Pasando este valor de campo eléctrico, $|M_{10}|^2$ comienza a disminuir una vez más, esto traerá un efecto de atenuamiento en el coeficiente de absorción lineal para valores mayores de 15 kV/cm. Por otra parte, el valor $|M_{11} - M_{00}|^2$ disminuye de 0 a 15 kV/cm, siendo en 15 kV/cm donde tiene su valor mínimo, comprobando una vez más que este factor se ve involucrado por la simetría o asimetría del sistema (siendo nulo cuando existe simetría en las funciones de onda). Una vez ya con un panorama general del comportamiento de los elementos de la matriz dipolar, de los cuales dependen y son los factores más importantes en el cálculo de las propiedades ópticas lineales y no lineales, se puede explicar como repercuten en el cálculo de las mismas.

La figura 17 a) muestra el comportamiento del coeficiente de absorción lineal $\alpha^{(1)}(\omega)$ para cuatro valores diferentes de campo eléctrico aplicado sobre un pozo δ -dopado con los mismos parámetros usados

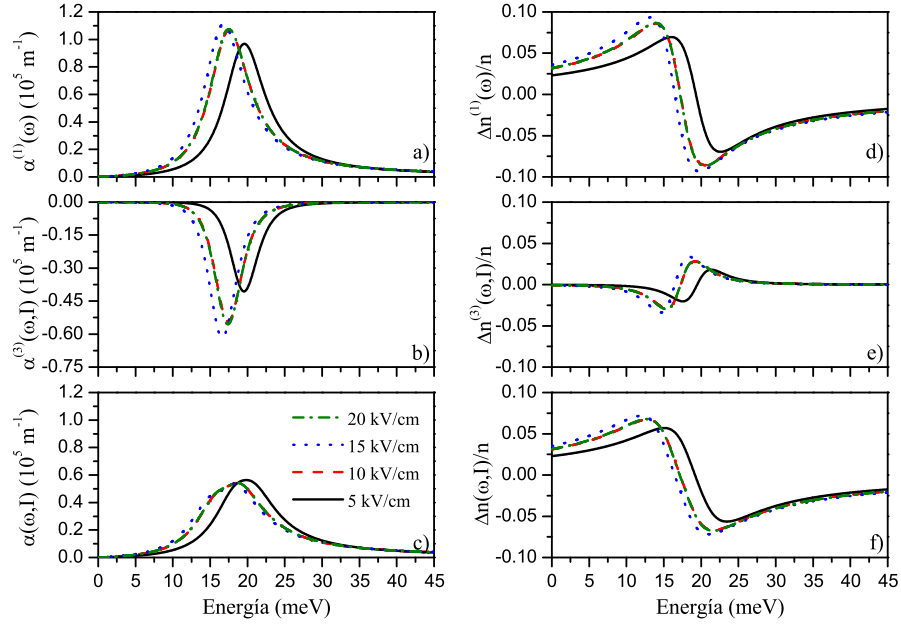


Fig. 17 a) Coeficiente de absorción lineal $\alpha^{(1)}(\omega)$, b) Coeficiente de absorción no lineal $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ y c) Coeficiente de absorción total $\alpha(\omega, I)$, d) Cambio relativo del índice de refracción de primer orden $\Delta n^{(1)}/n$, e) Corrección de tercer orden $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n$ y f) Coeficiente de absorción total $\Delta n(\omega, I)/n$ para un pozo δ -dopado doble asimétrico como función de la energía del fotón incidente para diferentes valores de campo eléctrico F aplicado.

en la figura 16. La diferencia de energía ($E_1 - E_0$) que da la ubicación de los picos resonantes del coeficiente de absorción lineal es 18, 17, 16 y 17 meV, respectivamente para los valores de campo eléctrico 5, 10, 15 y 20 kV/cm. Se puede observar que el comportamiento del coeficiente es muy parecido al mostrado en la figura 15, los picos resonantes muestran un corrimiento al rojo y tal como lo predice la diferencia de energía entre el estado base y el primer estado excitado (ver figura 11), el valor de $F=15$ kV/cm es el que más experimenta este corrimiento, ya que la diferencia de energía de transición es más pequeña. Sin embargo, cuando el valor del campo eléctrico es de 20 kV/cm, el comportamiento del coeficiente de absorción toma el mismo comportamiento que el de $F=10$ kV/cm y tiene un corrimiento hacia el azul respecto a los valores previos del campo. En la corrección a tercer orden del coeficiente de absorción $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ que se muestra en la figura figura 17 b) los picos resonantes están localizados

en el mismo valor de energía que los del coeficiente lineal, el orden de magnitud de la corrección de tercer orden es diferente para cada valor del campo eléctrico, por ejemplo, para $F=5$ kV/cm es del 40% en proporción al coeficiente de absorción lineal, para $F=15$ kV/cm es del 55% y para $F=10$ y 20 kV/cm del 50%, esto se obtiene, ya que para 5 kV/cm el valor de $|M_{10}|^2$ es menor que el correspondiente a los demás valores del campo eléctrico, por lo tanto esta contribución es menor. Para 15 kV/cm la contribución es mayor, ya que $|M_{10}|^2$ es máximo, además que el factor $|M_{11} - M_{00}|^2$ que se ve afectado por la simetría que adquiere el sistema, es cero. En 10 y 20 kV/cm el valor de $|M_{10}|^2$ y $|M_{11} - M_{00}|^2$ es el mismo, por lo cual, la contribución de tercer orden también lo es. Estas contribuciones se pueden ver claramente reflejadas en el coeficiente de absorción total que se muestra en la figura 17 c), disminuyendo en mayor proporción el coeficiente que corresponde a 15 kV/cm.

Finalmente en la figura 17 d) se presenta el cambio relativo del índice de refracción de primer orden $\Delta n^{(1)}/n$ como función de la energía del fotón incidente, la energía para la cual $\Delta n=0$ es 18, 17, 16 y 17 meV y corresponde para cada valor 5, 10, 15 y 20 kV/cm del campo eléctrico, respectivamente. Tal como lo muestra la figura 17 d) y los valores de energía, se observa que conforme se aumenta el campo eléctrico el nodo ($\Delta n = 0$) experimenta un corrimiento hacia el rojo. Sin embargo, cuando el campo es 20 kV/cm se tiene un corrimiento hacia el azul respecto a los demás valores y el comportamiento es esencialmente el mismo que el de $F=10$ kV/cm. La corrección de tercer orden del cambio relativo del índice de refracción tiene un valor del 30% de la magnitud de la del primer orden para todos los valores de F aplicados sobre el sistema, como se muestra en la figura 17 e), en esta ocasión esta corrección depende de los demás factores involucrados en la ec. 16 y no sólo de los elementos de la matriz dipolar. El cambio relativo total del índice de refracción se muestra en la figura 17 f), en donde se considera la contribución de la corrección de tercer orden.

5 Conclusiones

En este trabajo se presenta el cálculo de la estructura electrónica y de las propiedades ópticas lineales y no lineales para un pozo δ -dopado doble asimétrico tipo n en una matriz de $GaAs$. En el presente estudio, se ha usado el esquema de la masa efectiva, utilizando un modelo analítico sencillo del potencial que ha sido propuesto para modelar el sistema de un pozo δ -dopado doble asimétrico. El objetivo es proponer valores de diseño de este tipo de sistemas donde se tengan respuestas ópticas como las que se calculan aquí.

Primeramente, se calculó la estructura electrónica de los pozos δ -dopados dobles como función de diferentes parámetros, por ejemplo, como función de la separación de los pozos (ℓ_p) en un rango de 10 a 20 nm para el caso completamente simétrico, comparando los resultados con cálculos previos [25, 26] para mostrar que nuestros resultados son correctos. Se calculó entonces la estructura electrónica de un pozo δ -dopado doble asimétrico, suponiendo que la densidad de impurezas de las capas δ -dopadas son distintas. En general, se consideraron densidades de impurezas en el rango de 10^{12} cm^{-2} , en particular las densidades de $5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Una vez fijadas las concentraciones de impurezas, se calculó la estructura electrónica del sistema como función de la separación entre los pozos en un rango de 10 a 20 nm y se encontró que el elemento de matriz dipolar $|M_{10}|^2$ es máximo alrededor de los 11 nm para la separación entre capas δ -dopadas de impurezas y tiende a cero rápidamente alrededor de los 20 nm, esto determina en que región de separación entre capas de impurezas, el coeficiente de absorción y el cambio relativo del índice de refracción son máximos, lo cual, se puede observar claramente en las figuras 13. Finalmente, se debe aclarar que a pesar de que el factor de asimetría $|M_{11} - M_{00}|^2$ aumenta de manera importante como función de la separación entre las capas, no influye significativamente en las correcciones de tercer orden tanto del coeficiente de absorción como del cambio relativo del índice de refracción, dada la dependencia lineal de dichas correcciones con $|M_{10}|^2$, como queda claro de las ecuaciones (13) y (16). De esta parte de los resultados, se puede concluir que para una separación entre capas de alrededor de 12 nm se tendrán respuestas ópticas importantes del sistema de estudio y que no es recomendable crecer el sistema con separación

entre pozos más allá de los 20 nm, porque dichas propiedades no son tan buenas con respecto de esta separación que maximiza a $|M_{10}|^2$.

Ya determinada una separación adecuada entre capas, se investigó la estructura electrónica completa del sistema, manteniendo fija dicha separación entre pozos en 12 nm y la concentración de la capa δ -dopada de la izquierda en $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, graficando la estructura electrónica, con algunas funciones de onda como función de la densidad de impurezas de la capa de la derecha desde 0 hasta $N_{2d}^R = 7.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, encontrando por un lado, que la mínima separación energética corresponde al caso simétrico, es decir, cuando $N_{2d}^L = N_{2d}^R$. Se calculó también la dependencia de los elementos de matriz, en este caso como función de N_{2d}^R y se encontró que $|M_{10}|^2$ es máximo también cuando el sistema es simétrico y que el factor de asimetría efectivamente vale cero justo en este punto. Este análisis permite entonces, el calcular tanto el coeficiente de absorción total así como el cambio relativo del índice de refracción total para el rango de concentraciones de impurezas para las cuales el valor $|M_{10}|^2$ es significativo, el cual es: $3.5 < N_{2d}^R < 6.5$ en unidades de $\times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. En esta parte, se puede concluir que a pesar de que el factor de asimetría, para el rango de impurezas que se trabaja, pareciera no ser tan importante, se ve que las correcciones de tercer orden sí lo son y como consecuencia se tienen propiedades ópticas totales con amplitudes independientes de la concentración, cambiando únicamente la ubicación del pico resonante en cada caso.

Finalmente se investigó el efecto de un campo eléctrico externo aplicado en la dirección de crecimiento del sistema en el rango de -20 a 20 kV/cm. En este caso, se reporta también toda la estructura electrónica en este rango, y se identifican las regiones de campo eléctrico para los cuales se maximizan los elementos de matriz, cabe mencionar que en este caso usamos la configuración de concentración y separación entre pozos δ -dopados de impurezas que dan las mejores respuestas ópticas, es decir, $\ell_p = 12 \text{ nm}$, $N_{2d}^L = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ y $N_{2d}^R = 4.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Para esta configuración en particular se encuentra que el máximo valor de $|M_{10}|^2$ corresponde al valor de 15 kV/cm, como se observa de la figura 16, que es cuando la función de onda adquiere simetría (ver figura 10 c). En contraste, el valor de $|M_{11} - M_{00}|^2$ vale cero en este valor del campo eléctrico, lo cual hace que su corrección de tercer orden sea mucho mayor a la de los otros

valores del campo eléctrico aplicado (5, 10, 20 kV/cm) donde el factor $|M_{11} - M_{00}|^2$ es distinto de cero y disminuye la corrección de tercer orden. Este último análisis es de particular importancia puesto que permite, por medio de un factor físico externo, como lo es en este caso un campo eléctrico estático, el *sintonizar* la localización del pico resonante del coeficiente de absorción y modificar el valor del cambio relativo del índice de refracción con relativa facilidad.

Finalmente debemos mencionar que este tipo sistemas permiten transiciones ópticas que tienen potencial aplicación como fotodetectores en el régimen del infrarrojo lejano, como lo propone originalmente Ahn [19].

Agradecimientos

Esta contribución contiene esencialmente los resultados el trabajo de tesis de Maestría en Ciencias Físicas de K. A. Rodríguez-Magdaleno, presentado en la Unidad Académica de Física de la Universidad Autónoma de Zacatecas. Dicho trabajo se realizó con el apoyo parcial de el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) así como del Consejo Zacatecano de Ciencia, Tecnología e Innovación (COZCyT).

Bibliografía

1. C. E. C. Wood and G. Metze and J. Berry and L. F. Eastman. *Complex free-carrier profile synthesis by "atomic-plane" doping of MBE GaAs*, J. Appl. Phys. 51, 383-387 (1980).
2. S.J. Bass. *Silicon and germanium doping of epitaxial gallium arsenide grown by the trimethylgallium-arsine method*, J. Cryst. Growth 47, 613-618 (1979).
3. A.Y. Cho and J.R. Arthur, *Molecular beam epitaxy*, Prog. Sol. Stat. Chem. 10, 157-191 (1975).
4. L. Ioriatti. *Thomas-Fermi theory of δ -doped semiconductor structures: Exact analytical results in the high-density limit*, Phys. Rev. B 41, 8340-8344 (1990).

5. C. Hamaguchi. *Basic Semiconductor Physics*, (Springer, Berlin, 2010).
item L. M. Gaggero-Sager, M. E. Mora-Ramos and D. A. Contreras-Solorio. *Thomas-Fermi approximation in p-type delta-doped quantum wells of GaAs and Si*, Phys. Rev. B 57, 6286-6289 (1998).
6. M. E. Mora-Ramos and L. M. Gaggero-Sager. *A simple model for atomic layer doped field effect transistor (ALD-FET) electronic states*, Rev. Mex. Fis. 44S3, 165-167 (1998).
7. L. M. Gaggero-Sager and M. E. Mora-Ramos. *Hole energy levels in p-type delta-doped Si quantum wells*, Sol. Stat. Electron. 44, 175-183 (2000).
8. M. E. Mora-Ramos. *Hole states in boron-delta-doped diamond*, Diam. Relat. Mater. 12, 33-36 (2003).
9. M. E. Mora-Ramos. *Heavy and light hole states in boron delta-doped diamond*, Diam. Relat. Mater. 12, 1653-1656 (2003); Erratum. Diam. Relat. Mater. 13, 539-541 (2004).
10. I. Rodríguez-Vargas, M. E. Mora-Ramos. *k · p calculations of double p-type delta-doped quantum wells in GaAs*, Superlatt. Microstruct. 40, 100-112 (2006).
11. O. Oubram, M. E. Mora-Ramos, L. M. Gaggero-Sager. *Effect of the hydrostatic pressure on two-dimensional transport in delta-doped systems*, Eur. Phys. J. B, 71, 233-236 (2009).
12. J. C. Martínez-Orozco, M. E. Mora-Ramos and C. A. Duque. *Non-linear optical rectification and second and third harmonic generation in GaAs δ -FET systems under hydrostatic pressure*, Phys. Stat. Sol. B 132, 449-456 (2012).
13. J.-B. Xia and W.-J. Fan. *Electronic structures of superlattices under in-plane magnetic field*, Phys. Rev. B 40, 8508-8515 (1989).
14. T. H. Maiman, *Optical and Microwave-Optical Experiments in Ruby*, Phys. Rev. Lett. 4, 564-566 (1960).
15. P. A. Franken, A. E. Hill, C. W. Peters, and G. Weinreich. *Generation of Optical Harmonics*, Phys. Rev. Lett. 7, 118-119 (1961).
16. E. Rosencher and Ph. Bois. *Model system for optical nonlinearities: Asymmetric quantum wells*, Phys. Rev. B 44, 11315-11327 (1991).
17. R. W. Boyd. *Nonlinear Optics, Third Edition*, (Academic Press, 2008)
18. D. Ahn and S. L. Chuang. *Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an*

- applied electric field*, IEEE J. Quantum Electron. 23, 2196-2204 (1987).
19. K. J. Kuhn, G. U. Iyengar and S. Yee. *Free carrier induced changes in the absorption and refractive index for intersubband optical transitions in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ quantum wells*, J. Appl. Phys. 70, 5010-5017 (1991).
 20. J. C. Martínez-Orozco, M. E. Mora-Ramos and C. A. Duque. *The nonlinear optical absorption and corrections to the refractive index in a GaAs n-type delta-doped field effect transistor under hydrostatic pressure*, Phys. Stat. Sol. B 249, 146-152 (2012).
 21. J.G. Rojas-Briseño, J.C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque. *Nonlinear absorption coefficient and relative refraction index change for an asymmetrical double δ -doped quantum well in GaAs with a Schottky barrier potential*, Physica B 424, 13-19 (2013).
 22. K. A. Rodríguez-Magdaleno, J. C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, M. E. Mora-Ramos and C.A. Duque. *Asymmetric GaAs n-type double δ -doped quantum wells as a source of intersubband-related nonlinear optical response: Effects of an applied electric field*, J. Lumin. Journal of Luminescence, 147, 77-84 (2014).
 23. J.G. Rojas-Briseño, J.C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, M.E. Mora-Ramos and C.A. Duque. *Nonlinear optical properties in an asymmetric double δ -doped quantum well with a Schottky barrier: Electric field effects*, Phys. Stat. Sol. B 251, 415-422 (2014).
 24. I. Rodríguez-Vargas and L. M. Gaggero-Sager. *Subband structure comparison between n- and p-type double delta-doped GaAs quantum wells*, rev. Mex. Fis. 50, 614-619 (2004).
 25. E. Ozturk. *Optical intersubband transitions in double Si δ -doped GaAs under an applied magnetic field*, Superlatt. Microstruct. 46, 752-759 (2009).

Generalized Snell's Law and the Optical Absorption

M. J. Luévano Robledo, A. Enciso-Muñoz, and D. A. Contreras-Solorio

Resumen

The Generalized Snell's Law, which contains complex angles, is used to treat the problem of propagation of electromagnetic waves in media with absorption. A new refractive index, a new extinction coefficient and a refractive index of the inhomogeneous plane waves with constant phase are defined. These three properties depend on a complicated way with the incident angle. The three properties are calculated for a layer for the cases of silicon and aluminum. Also the absorbance, transmittance and reflectance are calculated. The calculations are made using the transfer matrix method and can be used for any multilayer system which contains dielectrics with absorption and/or metals.

1 Introduction

We deal in this work with the question of absorption of electromagnetic waves by matter. If we suppose that the absorption of a material is negligible, the approach is simple using the usual Snell's Law [1]. When there is absorption, the treatment is relatively simple for normal incidence of the electromagnetic waves on the material. In this case a complex refractive index is used, where the imaginary part, called the extinction coefficient, represents the absorption of the material [2]. However, in the case of oblique incidence of the radiation the approach is complicated because the so called Generalized Snell's Law must be used. Now due to the fact that the refractive index is com-

Unidad Académica de Física de la Universidad Autónoma de Zacatecas. Apartado Postal C-580, 98060 Zacatecas, Zac., Mexico. e-mail: D. A. C. S.: dacs10@yahoo.com.mx

plex, the angle of refraction is also complex. Consequently the theory is much more difficult [3-8]. Supposing homogeneous plane waves incident on the absorptive material, the refracted waves in the material with absorption, with wave front having constant phase, are inhomogeneous plane waves because the amplitude is not constant. The wave front farther from the interface has more attenuation. In this work we explain how are redefined a new refractive index, a new extinction coefficient and a new angle of refraction for the inhomogeneous plane waves. These three properties depend in a complicated way from the angle of incidence. We calculate properties like the transmittance, reflectance and absorption for a layer made of several materials. We also calculate the variation with the angle of incidence of the new redefined refractive index and extinction coefficient, as well as the angle of refraction for the inhomogeneous plane waves. We made the calculations by means of the transfer matrix, using scattering matrices D and propagation matrices P .

2 Method

2.1 Generalized Snell's Law

The theoretical treatment for the transmittance T and reflection R of electromagnetic waves (EMW) in a multilayer system without absorption A is by using the usual Snell's Law [1]

$$n_0 \sin \theta_0 = n \sin \theta \quad (1)$$

where n_0 is the refractive index of the medium where the EMW comes from, θ_0 the angle of incidence, n the refractive index of the medium where the waves are transmitted or refracted and θ the angle of refraction. On the other end, if there is absorption and the EMW are incident perpendicularly on the interface, the treatment of absorption is through a complex refractive index [2]

$$\bar{n} = n - ik \quad (2)$$

being n the real ordinary refractive index, k the so called extinction coefficient, and i the imaginary unit. This coefficient takes into

account the losses due to absorption. A bigger value indicates more absorption. The bar over the letter indicates a complex quantity. When there is oblique incidence on a material with absorption, the formalism uses the Generalized Snell's Law.

$$n_0 \sin \theta_0 = \bar{n} \sin \bar{\theta} \quad (3)$$

Now the angle of refraction is also complex

$$\bar{\theta} = \theta' + i\theta'' \quad (4)$$

The refracted plane waves are now inhomogeneous, the amplitude of a front wave with constant phase is variable depending on the distance from the interface between the medium of incidence and the refractive medium. The waves with constant amplitude are parallel to the interface but its phase is not constant. The preceding is shown in Fig. 1. A new generalized refractive index N is defined, as well as a new generalized extinction coefficient K . These properties depend on the angle of incidence θ_0 . Their values are given by the expressions

$$\begin{aligned} N^2 &= \frac{K^2}{2} \left\{ (n^2 - k^2) + n_0^2 \sin^2 \theta_0 + \left[4n^2 K^2 + (n^2 - k^2 - n_0^2 \sin^2 \theta_0)^2 \right]^{1/2} \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ (k^2 - n^2) + n_0^2 \sin^2 \theta_0 + \left[4n^2 K^2 + (n^2 - k^2 - n_0^2 \sin^2 \theta_0)^2 \right]^{1/2} \right\} \end{aligned} \quad (5)$$

Likewise, a new angle of refraction α for the inhomogeneous plane waves of constant phase is defined

$$\sin \alpha = \frac{n_0 \sin \theta_0}{N} \quad (6)$$

This is a kind of a new Snell's Law with the peculiarity that M and K depend on the angle of incidence θ_0 . The properties N y K are vectors whose meaning is illustrated also in Fig. 1, and also for the angle α .

2.2 Transfer matrix method

In general we consider a multilayer structure of N dielectric plane layers perpendicular to the x axis. Each layer has width d_j , electric permittivity $\bar{\epsilon}_j$, and magnetic permeability $\bar{\mu}_j$. If we consider that the layers have absorption, then the permittivity and permeability are complex quantities. Each medium j is homogeneous and isotropic. For each layer the complex refractive index \bar{n}_j is given by

$$\bar{n}_j = \sqrt{\frac{\bar{\epsilon}_j \bar{\mu}_j}{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (7)$$

Where ϵ_0 y μ_0 are, respectively, the permittivity and permeability of vacuum. In equation (7) normal materials correspond to the positive sign of the real part of the refractive index, while the materials with negative refraction known as metamaterials have negative real refractive index. The negative index is consistent with the boundary conditions for the electromagnetic fields when both the real parts of $\bar{\epsilon}_j$ and $\bar{\mu}_j$ are simultaneously negative. We consider an EMW propagating in plane xz from left to right in a medium with refractive index n_0 .

The wave is incident making an angle θ_0 with the normal to the structure. At the right side of the structure, the wave propagates in a lossless medium S called the substrate with refractive index n_S . The Generalized Snell's Law is

$$n_0 \sin \theta_0 = \bar{n}_1 \sin \bar{\theta}_1 = \dots \bar{n}_j \sin \bar{\theta}_j \dots = n_S \sin \theta_S \quad (8)$$

Being $\bar{\theta}_j$ the complex refractive angle in medium j . The electric field in the medium of incidence, in the layers, and in the substrate, can be written as

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \mathbf{E}_1 j e^{i\mathbf{k}_{jx}x} + \mathbf{E}_2 j e^{-i\mathbf{k}_{jx}x} \quad (9)$$

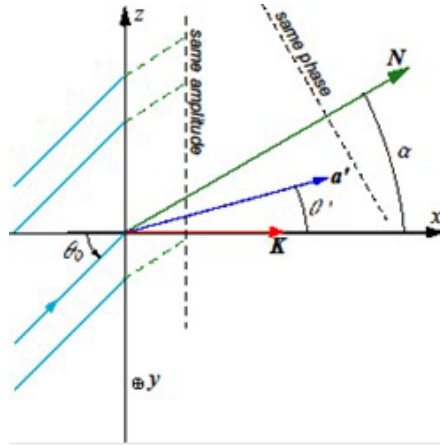


Fig. 1 Inhomogeneous plane waves of same phase refracted at an angle α . Illustration of the vectors \mathbf{N} and \mathbf{K} . θ' is the usual angle of refraction with no absorption.

Where the first and the second term at the right side represent waves traveling to the right and to the left, respectively. \mathbf{k}_{jx} is the x component of the complex wave vector for medium $j = 0, 1, \dots, N, S$. Considering that in the substrate the wave propagates only to the left, then $\mathbf{E}_{2S} = 0$. The corresponding magnetic field can be found using the Faraday's Law.

The wave propagation from medium 0 to medium S through the multilayer structure is described by

$$\begin{bmatrix} E_{10} \\ E_{20} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} E_{1S} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

Where the (2×2) transfer matrix is given by

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = D_0^{-1} \left[\prod_{j=1}^M D_j P_j D_j^{-1} \right] D_S \quad (11)$$

D_j is called the dynamical or transmission matrix, and arises from the continuity conditions on the electric and magnetic fields in the interface between $j - 1$ and j . P_j is the kinematical or propagation matrix inside the layer j . Their forms are

$$\begin{aligned}
 D_j^{TE} &= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{\cos \bar{\theta}_j}{\bar{Z}_j} & -\frac{\cos \bar{\theta}_j}{\bar{Z}_j} \end{bmatrix}, \\
 D_j^{TM} &= \begin{bmatrix} \cos \bar{\theta}_j & \cos \bar{\theta}_j \\ \frac{1}{\bar{Z}_j} & -\frac{1}{\bar{Z}_j} \end{bmatrix}
 \end{aligned} \tag{12}$$

$$P_j = \begin{bmatrix} e^{i\bar{k}_j d_j \cos \bar{\theta}} & 0 \\ 0 & e^{-i\bar{k}_j d_j \cos \bar{\theta}} \end{bmatrix} \tag{13}$$

The two different polarizations are indicated: electric transverse TE and magnetic transverse TM . \bar{Z}_j is the wave impedance, given by

$$\bar{Z}_j = \sqrt{\frac{\bar{\mu}_j}{\bar{\epsilon}_j}} \tag{14}$$

The transmittance T is given by the ratio of the Poynting power flow of the transmitted wave to that of the incident wave, and is given in terms of the transfer matrix by

$$T = \frac{Z_0 \cos \theta_s}{Z_s \cos \theta_0} \left| \frac{1}{M_{11}} \right|^2 \tag{15}$$

The reflectance R is defined as the ratio of the Poynting power flow of the reflected wave by the structure to that of the incident wave. It is given by

$$R = \left| \frac{M_{21}}{M_{11}} \right|^2 \tag{16}$$

By energy conservation, the sum of the transmittance, the reflectance and the absorption has to be the unity. The expression for the absorbance A is given by the expression

$$A = 1 - R - T \tag{17}$$

3 Results and discussion

We present results for a typical semiconductor as silicon and for an ordinary metal as aluminum. The absorbance for a material depends of the frequency or wave length of the radiation.

We show in Fig. 2 the dependence on θ_0 for the difference between the generalized refractive index N and the usual constant refractive index n for three wave lengths $\lambda = 280, 320$ and 550 nm.

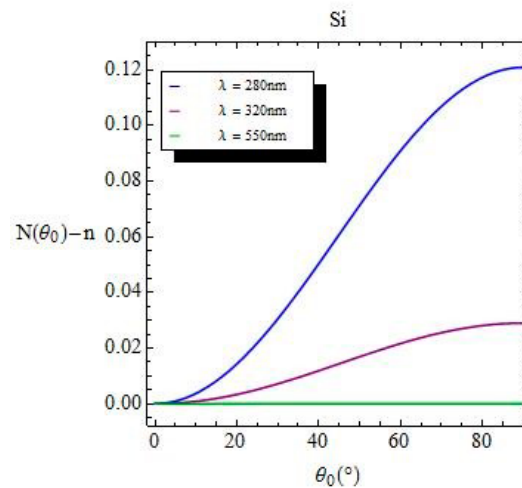


Fig. 2 Plots of the difference $N - n$ for silicon as a function of the incident angle for wavelengths $\lambda = 280, 320$ and 550 nm .

The first two wave lengths belong to the ultraviolet and the third one is at the middle of the visible spectrum where the absorption for silicon is lesser. This last wave length corresponds to a yellow-green color. For the different wave lengths, the respective values of n are 3.052, 5.102 y 4.077. While the respective values for k are 5.258, 3.269 and 0.028. We see clearly in the figure the variation of N with the angle of incidence. The variation with the angle of incidence is stronger when there is more absorption, that is, when the extinction coefficient k is larger.

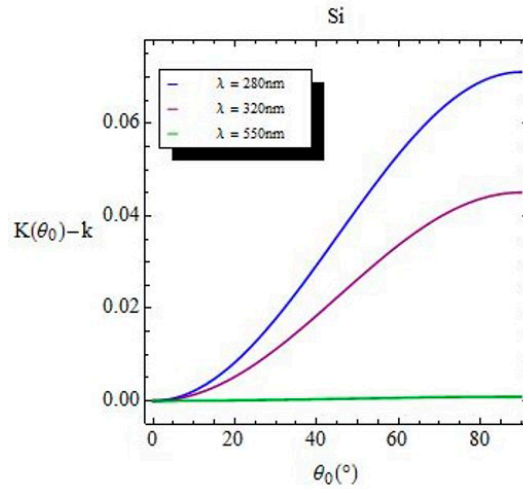


Fig. 3 Plots of the difference $K - k$ for silicon as a function of the incident angle θ_0 for the wavelengths $\lambda=280, 320$ and 550 nm.

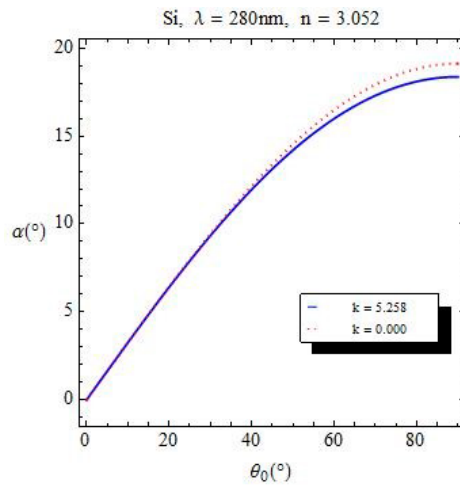


Fig. 4 Angle of refraction α of inhomogeneous plane waves as a function of the angle of incidence for silicon at $\lambda = 280$ nm for absorption with $k = 5.258$. It is also plotted the ordinary angle of refraction θ' assuming no absorption, that is, $k = 0$.

Fig. 3 presents also for silicon the dependence with θ_0 for the difference between the generalized extinction coefficient K and the ordinary constant extinction coefficient for the same three wave lengths. Similarly to Fig. 2, the coefficient K has a more intense dependence on θ_0 when there is more absorption.

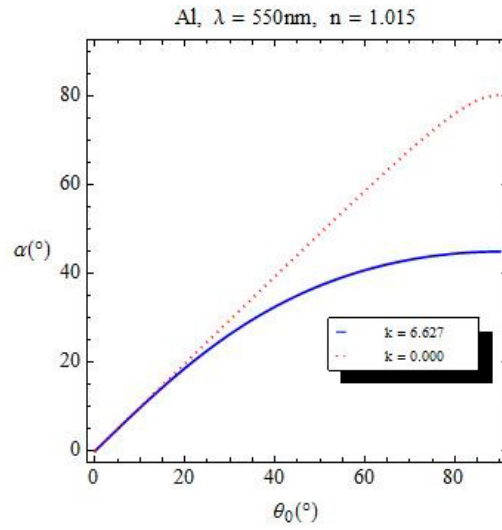


Fig. 5 Angle of refraction α of inhomogeneous plane waves as a function of the angle of incidence for aluminum at $\lambda = 550\text{ nm}$ for absorption with $k = 6.627$, $n = 1.015$. It is also plotted the ordinary angle of refraction θ_0 assuming no absorption, that is, $k = 0$.

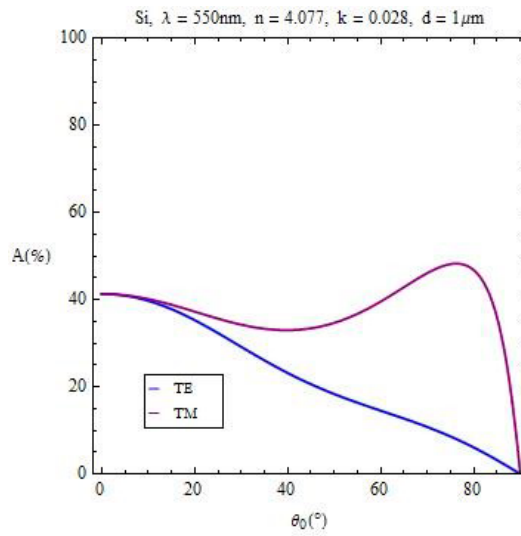


Fig. 6 Absorbance A as a function of the angle of incidence θ_0 for silicon at $\lambda = 550\text{ nm}$. The curves for both polarizations TE and TM are shown.

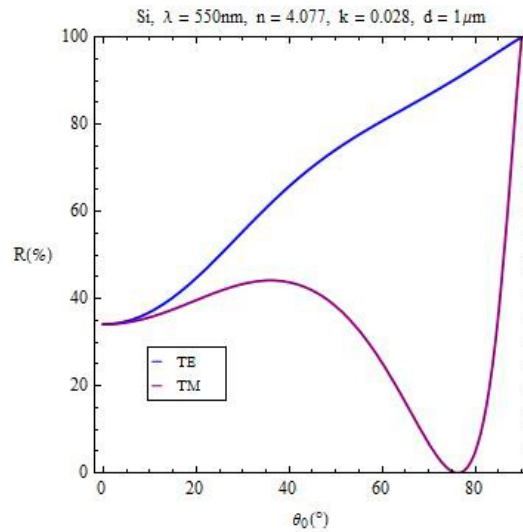


Fig. 7 Reflectance R as a function of the angle of incidence θ_0 for silicon at $\lambda = 550$ nm. The curves for both polarizations TE and TM are shown.

Fig. 4 shows for silicon the variation with θ_0 for the angle of refraction α of the inhomogeneous waves for $\lambda = 280$ nm. We compare this curve with that obtained with $k = 0$, that is, supposing that there is no absorption, which it corresponds to the usual Snell's Law. Fig. 5 shows similarly the variation of α with θ_0 for aluminum with $\lambda = 550$ nm. In this case we have $n = 1.015$ and $k = 6.627$. The value of k is large, there is much absorption and consequently α differs appreciably from the usual angle of refraction without absorption, with $k = 0$. Fig. 6 exhibits the variation with θ_0 of the absorbance A for a layer of silicon of one micron using radiation of $\lambda = 550$ nm.

Curves for both polarizations TE and TM are shown. Fig. 7 presents the reflectance for the same preceding data and Fig. 8 for the transmittance. The minimum for the reflectance at approximately 77° indicates the Brewster's angle. Also, Figs. 9 and 10 show the absorbance and reflectance for a one micron layer of aluminum at the same $\lambda = 550$ nm. For this value there is a large value of k , much absorption for aluminum for that wave length, and this causes the radiation can hardly penetrate the layer, so, there is large reflectance. This causes a practically zero transmittance and it does not deserve to present that figure.

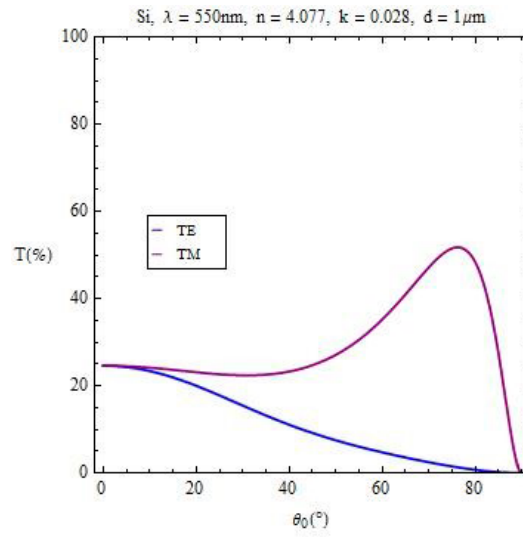


Fig. 8 Transmission T as a function of the angle of incidence θ_0 for silicon at $\lambda = 550$ nm. The curves for both polarizations TE and TM are shown.

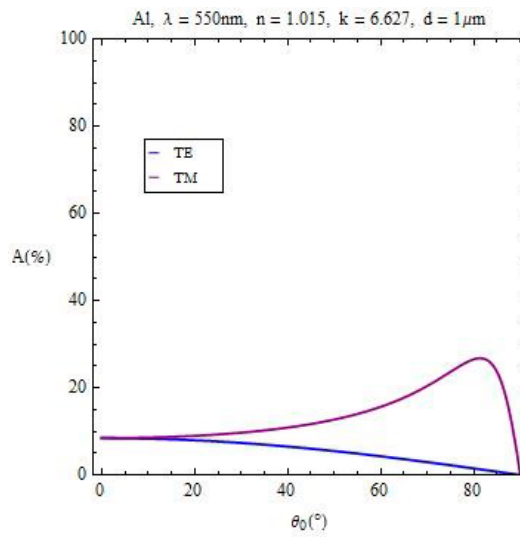


Fig. 9 Absorbance A as a function of the angle of incidence θ_0 for aluminum at $\lambda = 550$ nm. The curves for both polarizations TE and TM are shown.

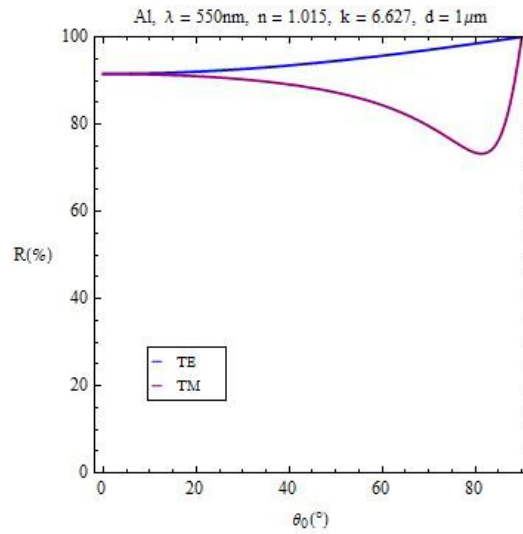


Fig. 10 Reflectance R as a function of the angle of incidence θ_0 for aluminum at $\lambda = 550$ nm. The curves for both polarizations TE and TM are shown.

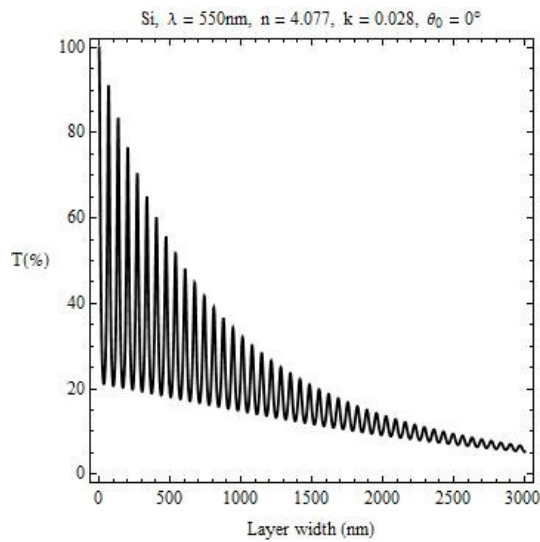


Fig. 11 Dependence with the layer width of the transmittance for normal incidence at $\lambda = 550$ nm for Si.

Fig. 11 presents the dependence on the layer width for the transmission at $\lambda = 550$ nm at normal incidence for Si. At this wavelength the extinction coefficient has a low value. The curve presents peaks

of maxima and minima which are due to events of constructive and destructive interference, respectively. The separation d between maxima or minima are given by $d = \lambda/2n$ which is approximately 67 nm. Fig. 12 also presents the transmission using the preceding data but at oblique incidence at 45° for both polarizations.

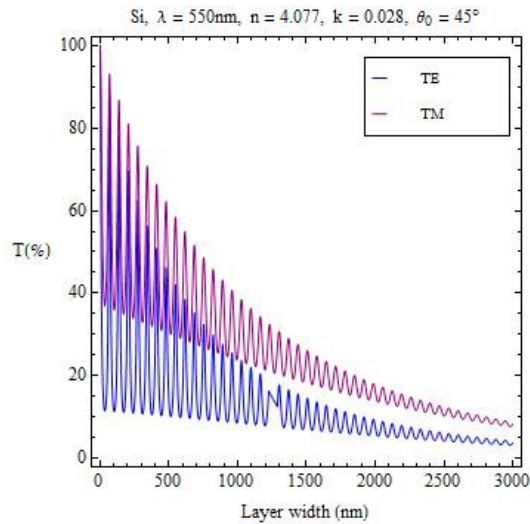


Fig. 12 Dependence with the layer width of the transmittance for Si at $\lambda = 550$ nm. Oblique incidence at 45° . The two polarizations TE and TM are shown.

Fig. 13 shows the transmission as a function of the layer width for aluminum at $\lambda = 550$ nm. The curves for normal incidence and oblique incidence at 45° for both polarizations TE and TM are shown. In this case, for Fig. 13, the peaks of maxima or minima should be separated approximately by 225 nm but the extinction coefficient has a very large value and the wave is strongly attenuated at much shorter distance. This causes that peaks of interference are not present. Figs. 11 to 13 are related to the skin depth in materials.

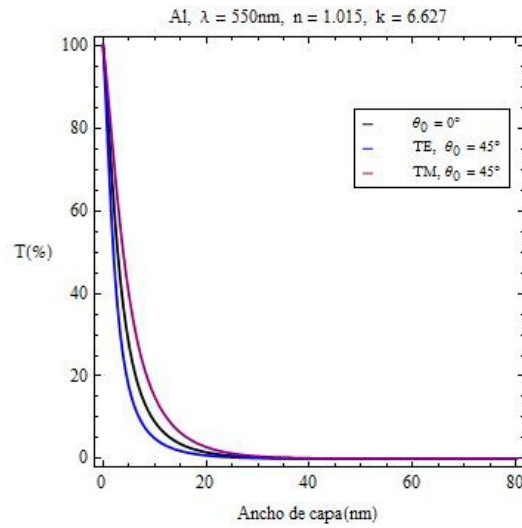


Fig. 13 Dependence with the layer width of the transmittance for Si at $\lambda = 550$ nm. The curves for both polarizations *TE* and *TM* are shown.

4 Conclusions

It was calculated and presented in a unprecedented way the dependence of the refraction angle α of the electromagnetic inhomogeneous plane waves in materials with absorption. It was shown how the deviation of this angle with respect to the ordinary angle θ of refraction with no absorption is noticeable only in materials with much absorption. It would be interesting to design experiments in order to measure α , although this would be very difficult due to the very limited penetration of the radiation in very absorbent materials. Also, the absorbance, reflectance and absorbance was calculated for a typical semiconductor and for a metal, with normal and oblique incidence of the radiation for both polarizations *TE* and *TM*. On the other hand, the calculations were made for a layer, but the method can be easily generalized for any number and any kind of layers, be dielectrics or metals, with positive or negative refractive index

Acknowledgements

This work has been supported partially by Universidad Autónoma de Zacatecas and Consejo Zacatecano de Ciencia y Tecnología (COZ-CyT).

References

1. E. Hecht. *Óptica*, (Pearson-Addison Wesley, Madrid, 2000)
2. W. Greiner. *Classical Electrodynamics*, (Springer-Verlag, New York, 1996).
3. J. R. Reitz, F. J. Mildford and R. W. Christy. *Fundamentos de la teoría electromagnética*, (Addison Wesley Iberoamericana, Wilmington, Delaware, 1996).
4. J. A. Stratton. *Electromagnetic theory*, (John Wiley and Sons, New York, 1941).
5. Z. Knittl. *Optics of thin films*, (John Wiley and Sons, Prague, 1976).
6. L. Pincherle. *Refraction of Plane Non-Uniform Electromagnetic Waves between Absorbing Media*, Phys. Rev. 72, 232-235 (1947).
7. A R Vamdatt and A I Bhatt. *Occurrence of complex angle of refraction in an absorbing medium in thin film optics*, Ind. J. Pure Appl. Phys. 19, 281-283 (1981).
8. R. Kadlec, E. Kroutilova and P. Fiala. *Multiple Reflection from Layered Heterogeneous Medium*, PIERS Proceedings, China, 87, September (2011)

Propagación de Electrones de Dirac en Estructuras Multicapas Fibonacci

H. García-Cervantes, J. Madrigal-Melchor, J. C. Martínez-Orozco e I. Rodríguez-Vargas.¹

Resumen

Se estudian las propiedades de transmisión y transporte para sistemas cuasirregulares multicapas en grafeno. En particular, se analiza la probabilidad de transmisión (transmitancia) y la conductancia en el régimen lineal para estructuras cuasirregulares construidas siguiendo las reglas de sustitución de la secuencia de Fibonacci, $g(A) = AB$ y $g(B) = A$. En nuestro caso A y B representan regiones con y sin barrera de potencial. Específicamente, se consideran dos sistemas: 1) la barrera de potencial es generada por medio de potencial electrostático aplicado perpendicularmente a la sábana de grafeno, y 2) la barrera de potencial es obtenida a través de sustratos que interactúan fuertemente, sustratos que rompen la simetría del grafeno, con la monocapa de grafeno. Dentro de las peculiaridades que acarrearán los sistemas mencionados se encuentran la no masividad de los electrones de Dirac y la presencia del tunelamiento de Klein para el primero de ellos (Barreras Electroestáticas), y la apertura de brecha de energía prohibida o gap, la masividad de los electrones de Dirac y la supresión del efecto Klein en el segundo de ellos (Barreras con Sustratos). Estos sistemas, se han considerado con la finalidad de desentrañar el rol que juega el efecto o tunelamiento de Klein sobre las propiedades arriba citadas. Igualmente, se incluye la probabilidad de transmisión y conductancia para el caso periódico con el objetivo de resaltar de forma comparativa el efecto de la cuasirregularidad. Cabe mencionar que este estudio

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina con Paseo la Bufa, S/N. C.P. 98060. Zacatecas, Zac. México.

teórico esta enmarcado dentro del contexto del método de matriz de transferencia, el cual permite con relativa facilidad estudiar la transmisión y el transporte, así como analizar los parámetros más importantes en estos sistemas: anchos de las regiones de pozo (B) y barrera (A), y el número de generación de la secuencia de Fibonacci.

En general, se obtiene que: la transmisión y conductancia para barreras electrostáticas presentan una asimetría respecto a la energía de los electrones de Dirac la cual no está presente en el caso de barreras con sustratos; el efecto principal de la cuasirregularidad, aumento en la generación de la secuencia de Fibonacci, es la fragmentación de las bandas de transmisión y la reducción de los picos presentes en la conductancia con respecto al caso periódico; la transmitancia y la conductancia se ven fuertemente reducidas al aumentar el tamaño de la estructura para el caso de electrones de Dirac masivos (barreras generadas por sustratos) contrario a los electrones sin masa, donde ambas propiedades se mantienen independientemente del tamaño de la estructura. En lo particular, se obtiene que la distribución angular de la probabilidad de transmisión, esto es, la transmitancia como función del ángulo de incidencia para energía fija, presenta un comportamiento muy distinto para electrones sin masa con respecto al caso masivo, ya que el ancho del pozo, el ancho de la barrera así como el número de generación no tienen un efecto importante sobre esta, siendo el tunelamiento de Klein (transmisión perfecta a incidencia normal) y el efecto de colimación (preferencia por ángulos pequeños) los dominantes en este caso. Igualmente, la asimetría presentada en las propiedades de transmisión y transporte para el sistema con barreras electrostáticas se puede entender dado que el potencial aplicado únicamente genera barrera para electrones o huecos según sea la polaridad, mientras que para el caso de sustratos la brecha prohibida generada da como resultado barreras tanto para electrones como para huecos.

En el caso de la conductancia ésta muestra fragmentación asociada a las estructuras Fibonacci. Sin embargo, para saber con toda precisión cómo se distribuye y fragmentan los picos asociados a la misma es necesario el cálculo de estados acotados, o en otras palabras la dinámica de formación y fragmentación de minibandas, ya que la

apertura y apertura-oclusión de canales de conducción determinan los picos de conductancia [1].

Propagation of Dirac electrons in Fibonacci multilayer structures

Abstract

We study the transmission and transport properties of quasiregular graphene-based structures. In particular, we analyze the probability of transmission (transmittance) and conductance in structures constructed following the substitution rules of the Fibonacci sequence, $g(A) = AB$ and $g(B) = A$. In our case A and B represent regions with and without potential barrier. Specifically, two systems are considered: 1) the potential barrier is generated through electrostatic potential applied perpendicular to the graphene sheet, and 2) the potential barrier is obtained through substrates that break the symmetry of the graphene sheet. Among the peculiarities that are carried by mentioned systems are the not massive Dirac electrons and the presence of Klein tunneling for the first one (Electrostatic Barriers), and the opening of forbidden energy gap or bandgap, the massiveness of the Dirac electrons, the suppression of the Klein effect in the second of them (Barriers with Substrates). These systems have been considered in order to unravel the role played by the Klein tunneling effect of the properties mentioned above. Likewise, we includes the transmission probability and conductance of the periodic case in order to highlight comparatively the quasiperiodicity. Note that this theoretical study is carrier out within the context of the transfer matrix method, which allows easily to study the transmission and conductance, and analyze the most important parameters in these systems: widths of the well and barrier regions, and the generation number of the Fibonacci sequence.

In general, we obtain: the trasmission and conductance for electrostatic barriers have an asymmetry relative to the energy of the electrons, which is not present in the case of substrate barriers, the main effect quasiperiodicity, is the fragmentation of the transmission bands and a reduction of the peaks present in the conductance with respect to the periodic case, the transmittance and conductivity are greatly reduced by increasing the size of the structure for the case massive

Dirac electrons (substrate barriers), in contrast massless electrons for both properties are maintained independently of the size of the structure.

In particular, we find that the angular distribution of the transmittance as a function of angle of incidence for fixed energy behaves very different for massless electrons with respect the massive case, because the width of the well, the width of the barrier and the number of generation do not have a significant effect on this, being the Klein tunneling (perfect transmission at normal incidence) and the collimation effect (preference for small angles) dominant in this case. Also, the asymmetry introduced in the transmission and transport properties for electrostatic barriers can be understood as the applied potential only generates barriers for electrons or holes depending on the polarity, while for the case of substrates there are barriers for both electrons and holes.

In the case of the conductance, it shown fragmentation associated to the Fibonacci structure. However, in order to know precisely how the peaks of the conductance are fragmented and distributed it is necessary to calculate the bound state, or in other words the dynamic of formation and fragmentation of minibands, since the opening and opening-closure of minibands determine the location of the conductance peaks [1].

1 Introducción

El grafeno es un material bidimensional compuesto por átomos de carbono empaquetados en una red hexagonal en forma de panal de un átomo de espesor [1-3]. El interés por este material a base de carbono proviene de las propiedades inusuales que se presenta, tales como la movilidad intrínseca, conductividad térmica, flexibilidad, resistencia y rigidez, que dan lugar a aplicaciones de dispositivos [4]. Todas estas nuevas propiedades y posibles avances tecnológicos se basan en la ausencia de brecha prohibida con la relación de dispersión lineal de grafeno [5, 6], $E = \pm \hbar v_F k$. En particular, los resultados de tunelamiento Klein de supresión de retrodispersión debido a la conservación del pseudo-espín [7, 8]. Por otra parte, es bien sabido que el orden periódica y aperiódica aparece en múltiples aspectos

de la naturaleza, así como ambos órdenes pueden ser explotados tecnológicamente [9].

La modulación periódica era el instrumento para dar a conocer los efectos cuánticos en estructuras artificiales semiconductoras [10, 11], dando lugar a lo que más tarde fue conocido como superred de semiconductores. Entre las propiedades más importantes de superredes en semiconductores podemos encontrar efectos excitónicos, minibanda de transporte, localización de *Wannier-Stark*, oscilaciones de Bloch, tunelamiento resonante y dominios de campo eléctrico. La mayoría de estas propiedades se basan en la estructura de minibandas o dispersión de minibandas presentado en superredes semiconductoras [10, 11]. En el caso de orden aperiódica resulta que era la respuesta a los cristales inesperados o cuasicristales.

Las estructuras aperiódicas o cuasiregulares pueden ser obtenidas sin un patrón conteniendo dos elementos que se repiten con diferentes períodos, y la relación de esos períodos es irracional. De esta manera, estos patrones pueden evadir las prohibiciones de ciertas simetrías rotacionales. También se mostró que estas estructuras podrían ser producidas usando las mismas técnicas utilizadas para los cristales regulares. Entre las características peculiares de las estructuras cuasiperiódicas podemos mencionar los espectros electrónicos altamente fragmentados, que dan lugar a la autosimilaridad, la criticalidad y la fractalidad [12]. Es importante mencionar que estas características son más que peculiares, ya que pueden afectar a las propiedades ópticas, electrónicas y de transporte de los dispositivos basados en semiconductores [9].

En resumen, aperiodicidad o cuasi-periodicidad se pueden utilizar como un mecanismo adicional para modular las propiedades fundamentales de estructuras basadas en semiconductores, y en consecuencia la ampliación de sus posibilidades de aplicaciones tecnológicas. Por lo tanto, teniendo en cuenta la importancia de las modulaciones periódicas y aperiódica, tanto desde el punto de vista fundamentales y tecnológicos, parece natural que sean una extensión para cualquier nuevo material. Al respecto, el grafeno no es la excepción, poco después de su descubrimiento se ha sometido a una intensa investigación, en particular con respecto a la forma en que sus propiedades fundamentales se modifican bajo la influencia de una modulación periódica [13-19].

Existen diferentes mecanismos o efectos propuestos para modular el grafeno en forma periódica, entre ellos podemos mencionar a: campos eléctricos y magnéticos, ruptura de simetría con sustratos, tensión, hidrogenación y desorden. Superred de grafeno (**GSL**, por sus siglas en inglés) es el término utilizado para referirse a grafeno bajo una modulación periódica, independientemente del mecanismo usado para generar el patrón periódico. Los efectos producidos por una modulación periódica en el grafeno son muy diferentes a lo que estamos acostumbrados a ver en los semiconductores tradicionales. En primer lugar, el patrón periódico crea conos de Dirac adicionales en la dispersión de energía de grafeno. En segundo lugar, la propagación de los portadores de carga a través de **GSL** es altamente anisotrópica, y en algunos casos los resultados en las velocidades de transporte están disminuidas a cero en una dirección y no se ha modificado en otro. La densidad y el tipo de especies portadoras también es bastante sensible a la configuración periódica considerado. En tercer lugar, mediante el cambio de los parámetros de la estructura de **GSL** (barreras y pozos de potencial, periodo del potencial y número de onda transversal) la conductividad promediada puede ser controlada fácilmente. Por otro lado, en los últimos años el interés en la modulación aperiódica en el grafeno está aumentando [20-24]. Todos estos estudios se centran principalmente en la monocapa de grafeno, y el mecanismo preferido para crear el patrón de cuasiperiódico ha sido el campo electrostático [21-24].

Hasta ahora, los modelos cuasiperiódicos estudiados en el grafeno han sido: Cantor [20-23], Fibonacci [21-23], Thue-Morse [25, 26] y Periodo-Doble (Period Doubling) [24]. Una de las características más notables de los patrones cuasiperiódicos en el grafeno, independientemente de la secuencia de cuasiperiodicidad usada, es una brecha prohibida cero asociado a un inusual punto de Dirac. Además, esta brecha especial es robusta frente a los ángulos de incidencia y las constantes reticulares, y también tiene un gran efecto en la transmisión y la conductancia. Por lo tanto, los patrones cuasiperiódicos en el grafeno pueden enriquecer y facilitar el desarrollo de la electrónica basada en el grafeno. Como podemos corroborar los patrones anteriores (periódico y aperiódico) en el grafeno han sido objeto de una intensa investigación, sin embargo, hay algunas cuestiones que por lo que podemos ver no se explican del todo. En concreto, no hemos encontrado una explicación clara y concisa sobre cómo mod-

ular periódica y cuasiperiódicamente en grafeno los efectos de oscilación natural de la conductancia.

Dentro de este contexto, el objetivo del presente trabajo es abordar las principales diferencias entre los sistemas, periódicos y aperiódicos en el grafeno. En concreto, se comparan las propiedades de transmisión, el transporte y la estructura electrónica de los sistemas mencionados en las barreras que las constituyen son de carácter electrostático y ruptura de simetría con sustratos. Consideramos este tipo de barreras, ya que son opuestas, una en la que se presenta tunelamiento de Klein (caso electrostático) y la otra en la que se descartó (caso sustrato). Siguiendo las líneas de nuestro trabajo previo [27], la principal preocupación de este estudio es averiguar cómo modular periódica y aperiódicamente los efectos intrínsecos en la naturaleza oscilatoria de la conductancia en el régimen lineal en grafeno y cómo estas oscilaciones están relacionadas con la estructura de niveles de energía, y cuál es el papel desempeñado por tunelamiento de Klein.

1.1 Barreras electrostáticas en grafeno

En los dispositivos basados en semiconductores es bien conocido que el efecto del campo eléctrico juega un papel fundamental debido a su capacidad para modular, de una manera muy simple, la optoelectrónica y las propiedades de transporte. Esto es posible debido al avance y la sofisticación del crecimiento de técnicas de deposición, específicamente a la deposición de los contactos metálicos en estructuras de semiconductores o en otras palabras, que se conoce como contacto de metal-semiconductor. El grafeno no es la excepción a este respecto, a pesar de su configuración intrínseca de dos dimensiones. Un dispositivo basado en grafeno consiste en una hoja de grafeno situada sobre un sustrato que no rompe la simetría como el SiO_2 , una puerta trasera (junto con el dopaje del sustrato) se utiliza para controlar la energía de Fermi de los electrones de Dirac, una puerta en la parte superior suspendida una cierta distancia de la hoja de grafeno se utiliza para controlar la anchura y la altura de la barrera electrostática y finalmente, dos cables conectados a la izquierda y derecha de la hoja de grafeno. Esta es una configuración típica para dispositivos

electrónicos de transporte o el transporte magnetoelectrónico si se aplica un campo magnético perpendicular a la hoja de grafeno. Es importante mencionar que este dispositivo ha sido el elemento esencial para dar a conocer las propiedades fundamentales de la monocapa, bicapa y tricapa en grafeno [28].

Desde una perspectiva teórica un campo perpendicular electrostático puede tenerse en cuenta directamente debido a que el efecto principal de la misma es un desplazamiento de los conos de Dirac proporcionales a la intensidad de campo. Este cambio se puede obtener a través de la ecuación de Dirac sin masa.

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{p}) + V(x)]\psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (1)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector dado por las matrices de Pauli $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$, $\boldsymbol{p} = (p_x, p_y)$ es el operador momento en el plano, $V(x) = V_0$ es el potencial unidimensional a lo largo de la dirección x y $\psi(x, y)$ representa la función bi-espinor. Esta ecuación puede ser fácilmente resuelta dando la siguiente relación de dispersión:

$$E - V_0 = \pm \hbar v_F q, \quad (2)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi de los electrones de Dirac en grafeno ($v_F = \frac{c}{300}$), q es el vector de onda en dos dimensiones, y \pm estados electrones y huecos, respectivamente. Las funciones de onda correspondientes, normalizando a el área de la hoja de grafeno, puede ser escrita como:

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm i q_x x + i q_y y}, \quad (3)$$

con q_x y q_y las componentes del vector de onda q en dos dimensiones dado por la ecuación (2). Los coeficientes v_{\pm} son dados por:

$$v_{\pm} = \frac{\hbar v_F (\pm q_x + i q_y)}{E - V_0}. \quad (4)$$

Tenemos que mencionar que las barreras electrostáticas en grafeno remarcan el tunelamiento de Klein y colimación como resultado de la preservación de la estructura de los cono Dirac bajo los efectos del campo electrostático [7, 8].

1.2 Rompimiento de simetría en grafeno usando sustratos

Al igual que el efecto del campo eléctrico, los sustratos se han convertido en la piedra angular de la era de la microelectrónica y la nanoelectrónica. Una oblea de silicio era la respuesta a labrarse e interconectar a millones y millones de transistores [29]. Los sustratos son también un elemento básico en las técnicas actuales de crecimiento, siendo fundamentales para obtener las estructuras de semiconductores cuánticos en los que se basan las aplicaciones electrónicas y optoelectrónicas de vanguardia.

A este respecto los sustratos en el grafeno no son la excepción, ya que pueden abrir una brecha prohibida de energía, así como cambiar la forma de la relación de dispersión [30]. En particular, se informa experimentalmente que el grafeno crecido en carburo de silicio, también conocido como grafeno epitaxial, muestra una brecha prohibida debido a la no despreciable interacción entre grafeno y el sustrato SiC, lo que resulta en una ruptura de la simetría de la red hexagonal en forma de panal de grafeno. Desde un punto de vista teórico esto puede ser tratado a través de la siguiente ecuación de Dirac,

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + t' \sigma_z] \psi(x, y) = E \psi(x, y), \quad (5)$$

donde $t' = mv_F^2$ es el término de masa y σ_z es la componente z de vector de la matriz de Pauli. Como en el caso de campo electrostático, esta ecuación puede resolverse dando la relación de dispersión parabólica;

$$E = \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 q^2 + t'^2}, \quad (6)$$

donde t' es proporcional a la brecha prohibida, $E_g = 2t'$.

Es importante mencionar que en este caso el número de capas de grafeno puede controlar el intervalo de banda. En particular, se informa de una banda prohibida de 0.26 eV, 0.14 eV y 0.066 eV para monocapa, bicapa y tricapa en grafeno, respectivamente. A partir de ahora, t' será 0,13 eV ya que este trabajo trata de grafeno monocapa. Las funciones de onda asociados mantienen la misma forma matemática como en el caso de grafeno sometido a campo electrostático, pero ahora los coeficientes del biespinor vienen como,

$$v_{\pm} = \frac{E - t'}{\hbar v_F (\pm q_x - i q_y)}. \quad (7)$$

Como comentario final de esta sección, es importante mencionar que, debido a la apertura de banda prohibida inducido por el sustrato, cantidades tales como pseudo-giro no se conservan y, por consiguiente el tunelamiento de Klein se descarta [27].

2 Metodología

Como ya hemos mencionado en las secciones de estructuras multi-barrera precedentes en el grafeno puede ser obtenido a través de diferentes mecanismos o efectos externos. Desde un punto de vista teórico (con independencia del efecto externo que se utiliza para crear las barreras) las propiedades de transmisión, transporte y estructura de nivel se puede conseguir fácilmente a través del bien conocido método de matriz de transferencia [31]. Considerando una estructura multibarrera arbitraria como la de la figura 1, en la cual se muestra cada interfaz de propagación. Teniendo en cuenta la conservación del momento

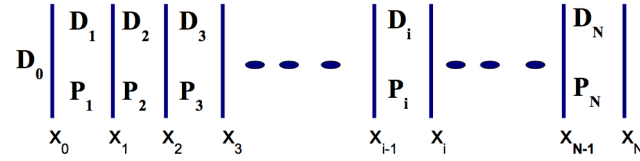


Fig. 1 Sistema multibarreras.

transversal, $q_y = k_y$, la condición de continuidad de la función de onda en las diferentes interfaces a lo largo de la dirección de propagación (coordenada x), podemos obtener una relación entre los coeficientes de las funciones de onda de avance y retroceso de la región semi-infinita izquierda A_0 y B_0 y la función de onda hacia adelante de la región semi-infinita derecha A_{N+1} y B_{N+1} (fig. 1), a través de la matriz de transferencia como:

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

donde la matriz de transferencia esta dada por,

$$M = D_0^{-1} \left(\prod_{j=1}^N D_j P_j D_j^{-1} \right), \quad (9)$$

y definida a través de las matrices dinámicas D_j y de propagación P_j ,

$$D_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_{+j} & v_{-j} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

y

$$P_j = \begin{pmatrix} e^{-iq_{x,j}d_j} & 0 \\ 0 & e^{iq_{x,j}d_j} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

aquí $j = 1, 2, \dots, N$, $q_{x,j}$ y d_j es la componente x del vector de onda y el ancho de la región j el cual puede ser barrera o pozo dependiendo de la estructura multibarrera especifica, y D_0 es la matriz dinámica de la región semi-infinita de izquierda a derecha, en nuestro modelo son las mismas. Conociendo la matriz de tranferencia podemos calcular fácilmente la probabilidad de transmisión,

$$T = \left| \frac{A_{N+1}}{A_0} \right| = \frac{1}{|M_{11}|^2}, \quad (12)$$

con M_{11} es el elemento $(1, 1)$ de la matriz de tranferencia. La probabilidad de transmisión nos permite calcular la conductancia en el régimen lineal de forma directa a través del formalismo de Landauer-Büttiker [32],

$$G(E_F) = \frac{2e^2}{h} \int_{-\frac{E_F}{\hbar v_F}}^{\frac{E_F}{\hbar v_F}} T(E_F, k_y) \frac{dk_y}{2\pi/L_y}, \quad (13)$$

donde L_y es el tamaño del sistema en la dirección transversal y se supone grande en comparación con el tamaño del sistema en la dirección de propagación L_x y E_F la energía de Fermi de los electrones de Dirac. La conductancia se puede escribir como el promedio angular de la probabilidad de transmisión cambiando k_y por θ a través de la relación $k_y = \frac{E_F}{\hbar v_F} \sin \theta$,

$$G(E_F) = \frac{2e^2 L_y E_y}{h^2 v_F} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T(E_F, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (14)$$

y normalizando E_F para la energía del alto de la barrera $E_F^* = \frac{E_F}{E_0}$,

$$\frac{G(E_F^*)}{G_0} = E_F^* \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} T(E_F^*, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (15)$$

con $G_0 = \frac{2e^2 L_y E_0}{h^2 v_F}$ la conductancia en el régimen lineal inicial.

Por último, el espectro de los estados acotados se calcula cambiando las condiciones a la frontera abiertas fig. 2 a), a condiciones a la frontera de pared-dura fig. 2 b), esto es, los anchos de la primer y la última barrera de las estructuras multiples son extendidas a infinito. Del mismo modo, tenemos que se requiere un vector de onda imag-

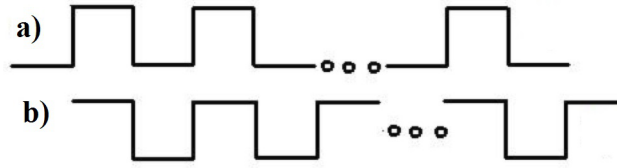


Fig. 2 a) Condiciones a la frontera abiertas. b) Condiciones a la frontera duras.

inario puro para las regiones de barrera semi-infinita, lo que resulta en una ecuación trascendental entre la energía y el vector de onda transversal de electrones de Dirac como,

$$M_{11}^{BS}(E, k_y; q_x \rightarrow i\alpha_x) = 0, \quad (16)$$

donde q_x es el vector de onda a lo largo de la coordenada x y cambiará de acuerdo con el mecanismo específico para generar las barreras, las ecuaciones. (6) y (7). M^{BS} está dada por,

$$M^{BS} = D_1^{-1} \left(\prod_{l=2}^{N-1} D_l P_l D_l^{-1} \right) D_1, \quad (17)$$

aquí el superíndice BS se ha utilizado para diferenciar esta matriz de transferencia (17) con respecto a la matriz de transferencia de condiciones a la frontera abiertas, ecuación (9).

3 Resultados

El interés principal de este trabajo es averiguar los efectos de cuasirregularidad en grafeno. Así como, la diferencia entre estructuras masivas (sin tunelamiento de Klein) y sin masa (con efecto Klein). También haremos un análisis comparativo de las propiedades de transmisión, transporte y estructura electrónica para **SBGS** (estructura de grafeno en barreras de sustratos) y **EBGS** (estructura de grafeno en barreras electrostáticas), en sistemas que siguen una secuencia de barreras periódicas y aperiódicas.

3.1 Probabilidad de Transmisión

Presentaremos la transmitancia al variar la generación 3, 5 y 7 de la secuencia de Fibonacci. Aquí tenemos un ángulo de incidencia fijo, variamos la energía de incidencia del electrón.

En la figura 3 se muestra la transmitancia respecto de la energía, con los dos ángulos de incidencia fijos 0° y 30° , manteniendo el ancho de los pozos y barreras fijos $dA = 50a = dB$, donde a representa la distancia carbono-carbono en grafeno. Para las generaciones 3, 5 y 7 según la secuencia de Fibonacci.

Como se puede observar en esta gráfica se tiene una gran simetría para electrones y huecos, las ventanas de transmisión no dependen del ángulo de incidencia, para **SBGS** tanto para sistemas periódicos como para aperiódicos, al aumentar la generación las bandas son más definidas para el sistema periódico, el sistema cuasirregular fragmenta las bandas, disminuyendo las ventanas de transmisión y suavizando la curva.

Contrario lo que pasa en **EBGS**, ya que existe una asimetría muy clara para electrones y huecos, este caso es muy sensible al ángulo de incidencia, siempre para 0° la transmitancia es perfecta igual a **1** esta transmisión se conserva independiente de la generación, entonces la tomamos como referencia, a incidencia de 30° se presentan ventanas de transmisión diferente de **1** tanto para sistemas periódicos como aperiódicos y nuevamente el sistema cuasirregular fragmenta las bandas. Esta asimetría se debe a la asimetría natural entre electrones y

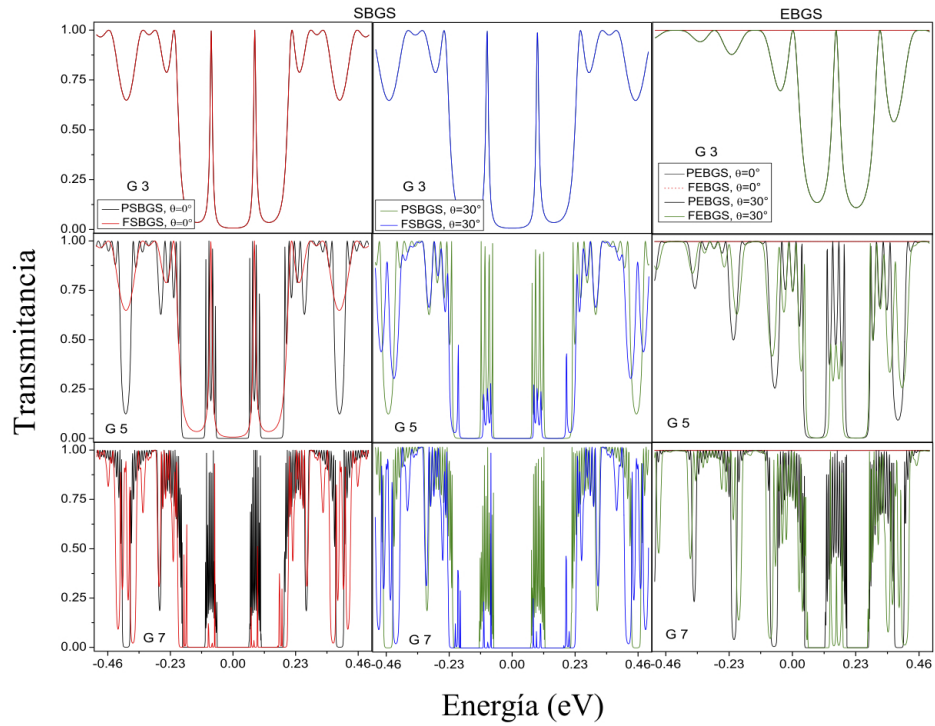


Fig. 3 Transmitancia vs Energía, usando sistemas periódicos y aperiódicos, con **SBGS** y **EBGS**, manteniendo ángulos de incidencia fijos de 0° y 30° , para ancho de los pozos y las barreras $dA = 50a = dB$ y generaciones 3, 5 y 7 según la secuencia de Fibonacci.

huecos dado el potencial considerado. Sin embargo al variar la generación la perturbación se manifiesta también para huecos a pesar de no tener barrera para ellos. Cabe mencionar que para los dos sistemas al aumentar la generación los anchos de las bandas se conservan tanto para periódico como cuasirregular.

3.2 Distribución angular de la probabilidad de transmisión

En este apartado mostraremos la probabilidad de transmisión variando nuevamente la generación, pero ahora variamos el ángulo de incidencia de $-\frac{\pi}{2}$ a $\frac{\pi}{2}$, manteniendo fija la energía de incidencia del electrón

$$E_i = 0,1 \text{ eV.}$$

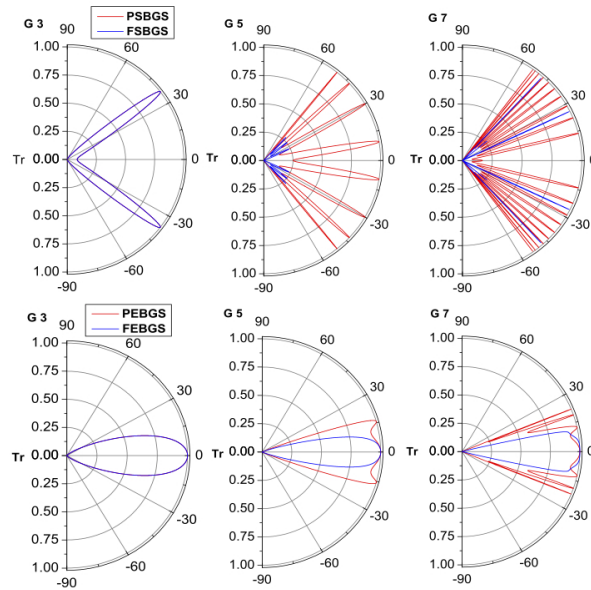


Fig. 4 Transmitancia vs ángulo, usando sistemas periódicos y aperiódicos con **SBGS** y **EBGS**, manteniendo los anchos de los pozos y las barreras fijos $dB = 50a = dA$, para generaciones de 3, 5 y 7 según la secuencia de Fibonacci, variando los ángulos de incidencia de $-\frac{\pi}{2}$ a $\frac{\pi}{2}$.

Se ha tomado una gráfica en coordenadas polares para ilustrarnos como se comporta la transmitancia respecto del ángulo de incidencia, 4. Como podemos observar al variar la generación se obtienen ventanas de transmisión para los dos casos, en **SBGS** al aumentar la generación se forman bandas en el sistema periódico, el sistema cuasirregular fragmenta las bandas obteniendo sólo algunas ventanas de transmisión. Para **EBGS** el sistema cuasirregular también fragmenta las bandas al aumentar la generación. Aquí aparece el efecto de colimación [28], preferencia por ángulos pequeños.

3.3 Contornos de transmisión

En esta sección mostramos los contornos de transmisión con la finalidad de tener una imagen más completa de la transmitancia como

función de la energía y el ángulo de incidencia, los cuales son normalizados a $E_0 = 0.13$ eV y $\theta_0 = \frac{\pi}{2}$ respectivamente. En las siguientes gráficas el primer renglón corresponde a un sistema periódico y el segundo a uno cuasirregular que cumple con la secuencia de Fibonacci, tanto para **SBGS** como para **EBGS**. El color negro corresponde a transmitancia cero y el rojo a transmitancia uno. Tendremos la variación de la generación, manteniendo el ancho de los pozos y las barreras fijos.

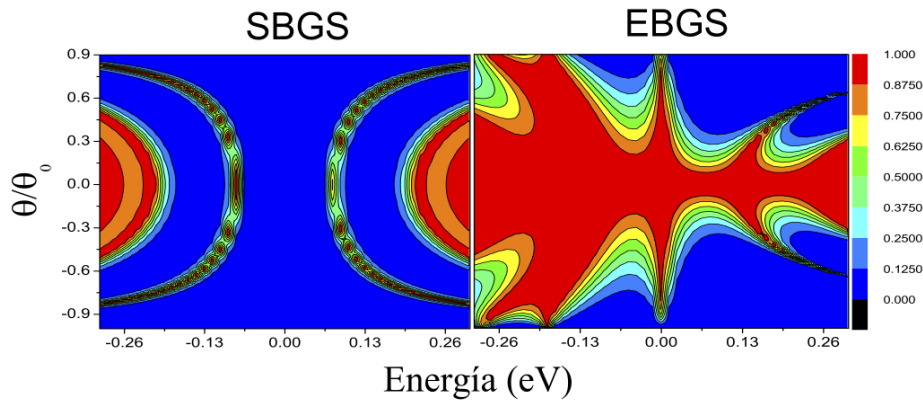


Fig. 5 Transmitancia vs energía y ángulo, para la generación 3, con sistemas periódicos y aperiódicos que siguen la secuencia de Fibonacci, con **SBGS** y **EBGS**, manteniendo fijos el ancho de los pozos y las barreras $dB = 50a = dA$.

Cabe señalar que en la figura 5 sólo mostramos dos contornos puesto que el sistema cuasirregular coincide con el periódico con dos barreras cada uno, aquí tenemos la transmitancia respecto de la energía y ángulo de incidencia, manteniendo fijos los anchos de los pozos y las barreras $dA=50a=dB$, para una generación 3 según la secuencia de Fibonacci.

Podemos ver grandes diferencias en las propiedades de transmisión de **SBGS** y **EBGS**. Por un lado **SBGS** muestra un contorno de transmitancia simétrico entre electrones y huecos, así mismo, regiones de transmisión en forma semicircular. Para la estructura simétrica se pueden observar ventanas de transmisión en rangos de energía pequeña rodeados de transmitancia muy baja. Por otro lado **EBGS** presenta un contorno muy diferente, en el cual se puede ver clara-

mente que se tiene transmisión perfecta en todo el rango de energía para incidencia normal y ángulos de incidencia pequeños, esto se debe al tunelamiento de Klein y efecto de colimación [8, 28]. Igualmente se presenta una redistribución de las características de transmisión para huecos, aun y cuando no existan barreras para ellos.

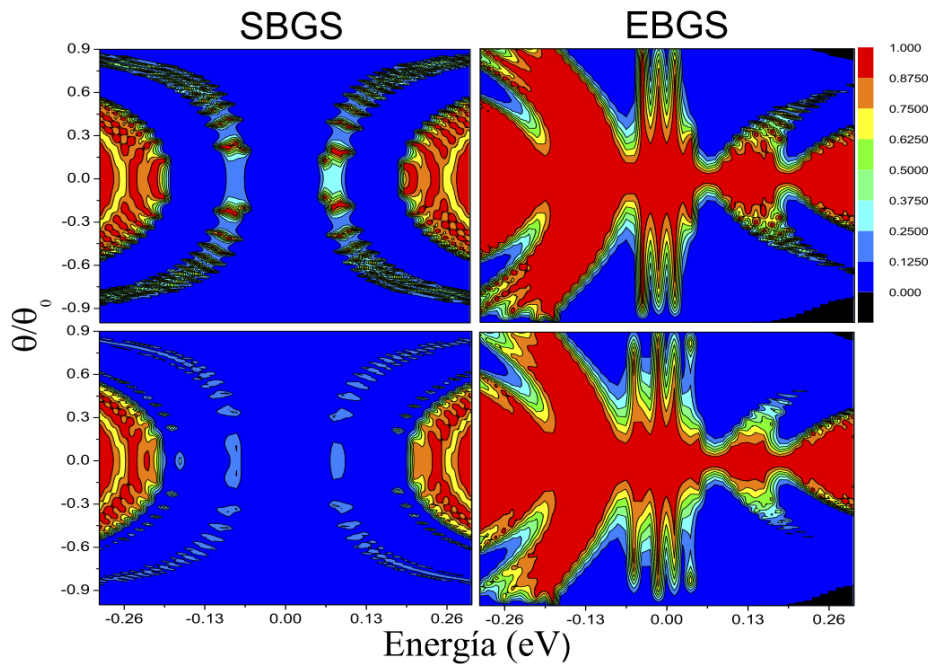


Fig. 6 Transmitancia vs energía y ángulo, para la generación 5, con sistemas periódicos (primer renglón) y aperiódicos (segundo renglón) que siguen la secuencia de Fibonacci, con **SBGS** y **EBGS**, manteniendo fijos el ancho de los pozos y las barreras $dB = 50a = dA$.

Ahora tenemos la generación 5, con los mismo datos que la figura 5. Nuevamente tenemos grandes diferencias en las propiedades de transmisión de **SBGS** y **EBGS**, puesto que tenemos un número mayor de pozos y barreras lo cual hace que la transmitancia se reduzca en los dos sistemas. En **SBGS** se muestra un contorno de transmitancia simétrico entre electrones y huecos, así como regiones de transmisión en forma semicircular. El sistema periódico tiene bandas mucho mejor estructuradas con más regiones de transmitancia perfecta, el sistema cuasirregular fragmenta las bandas teniendo regiones reduci-

das de transmisión perfecta. La estructura simétrica tiene ventanas de transmisión en rangos de energía pequeña rodeada de transmitancia muy baja en los dos sistemas.

Para **EBGS** se presenta un contorno muy diferente de transmisión, en el cual se puede ver claramente que se tiene transmisión perfecta en todo el rango de energía para incidencia normal y ángulos pequeños, se observa como cambia la estructura de transmitancia perfecta al pasar de un sistema a otro. El sistema cuasirregular tiene fragmentación de picos y hace que la transmitancia sea menor, sobre todo para electrones. Así mismo, se presenta una redistribución de las características de transmisión para huecos, cuando no hay barrera presente en ellos. Todo esto se muestra en la figura 6.

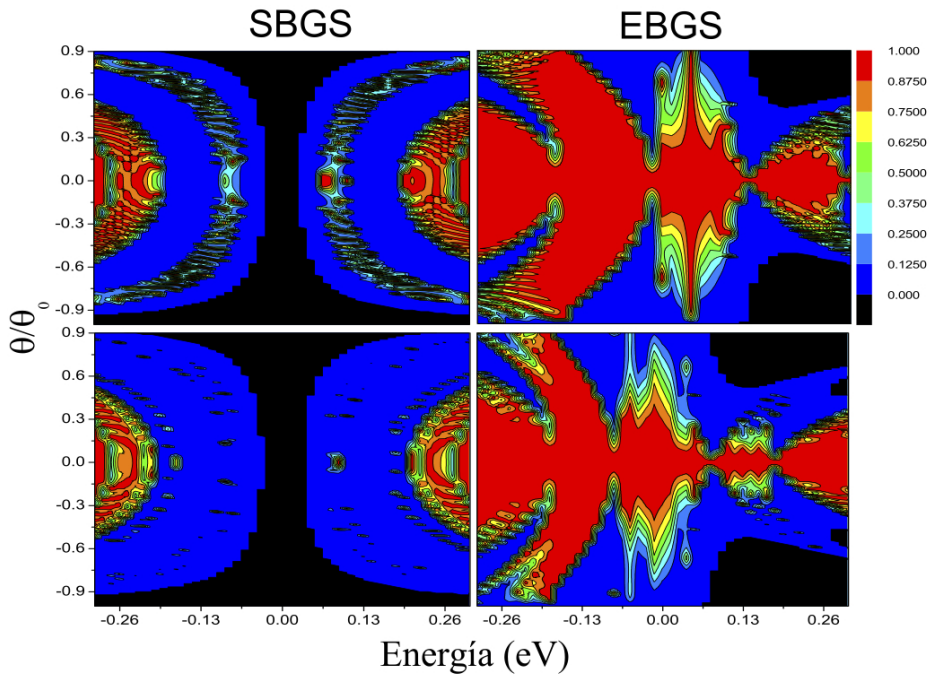


Fig. 7 Transmitancia vs energía y ángulo, para la generación 7, con sistemas periódicos (primer renglón) y aperiódicos (segundo renglón) que siguen la secuencia de Fibonacci, con **SBGS** y **EBGS**, manteniendo fijos el ancho de los pozos y las barreras $dB = 50a = dA$.

Finalmente mostraremos la generación 7, con los mismo datos de la figura 5, para terminar con la variación del primer parámetro que es la generación. Como ya hemos mencionado anteriormente al aumentar la generación el número de pozos y barreras es mayor y por consecuencia la disminución de la transmitancia. Entonces para **SBGS** se muestra un contorno de transmitancia simétrico entre electrones y huecos, así como, regiones de transmisión en forma semicircular. El caso periódico es mucho mejor estructura ya que presenta bandas grandes de transmitancia nula, la transmitancia perfecta sólo esta presente en ángulos pequeños, el sistema cuasiregular reduce mucho las regiones de transmitancia perfecta y algunas bandas casi desaparecen por completo, ésto debido a que fragmenta las bandas disminuyendo las ventanas de transmisión. En tanto, para **EBGS** se puede ver que la transmisión perfecta disminuye bastante, aunque ésta permanecerá para ángulo de incidencia normal debido al efecto Klein, también aparecen regiones de transmitancia nula. Ahora, para el sistema cuasiregular aparte de que la transmitancia se reduce la estructura se modifica mucho, puesto que al fragmentar las bandas aparece una banda más que en el caso periódico. Además, la estructura de los huecos cambia de manera considerable y se empiezan a formar pequeñas bandas de forma semicircular a pesar de que no hay barrera presente en ellos, figura 7.

3.4 Propiedades de transporte: Conductancia en el régimen lineal

La conductancia que se mostrará a continuación está dentro del régimen lineal lo que indica que la variación del potencial es baja. Enseguida, mostraremos la conductancia respecto de la energía, sus cambios al variar la generación. Sabemos que de acuerdo a las propiedades de transporte en grafeno se tienen oscilaciones en los dos sistemas, periódicos y cuasirregulares. Las líneas en color azul (sistema periódico) y rojo (sistema aperiódico) corresponden a **SBGS** y las líneas negra (sistema periódico) y verde (sistema aperiódico) corresponden a **EBGS**.

En la figura 8 se muestra la conductancia respecto de la energía, manteniendo fijos el ancho de los pozos y las barreras $dB = 50a = dA$,

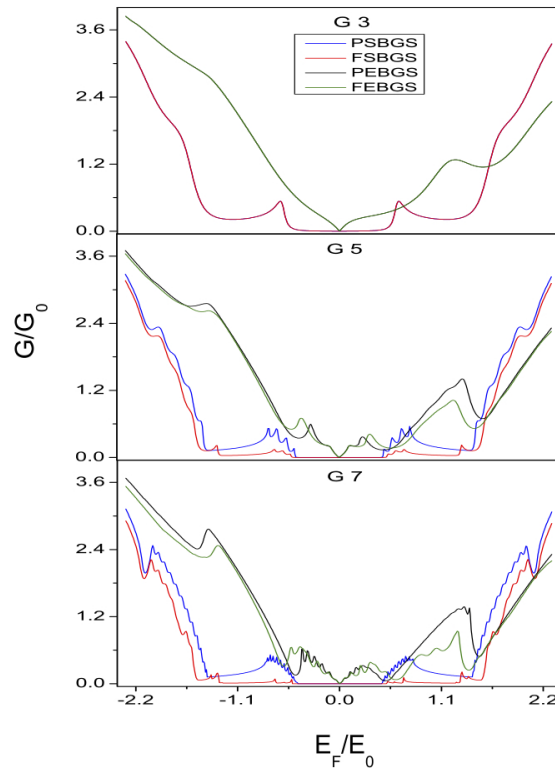


Fig. 8 Conductancia vs Energía, con sistemas periódicos (línea azul y negra) y aperiódicos (línea roja y verde) en **SBGS** y **EBGS**, manteniendo fijos el ancho de los pozos y las barreras $dB = 50a = dA$, variando la generación de 3, 5 y 7 según la secuencia de Fibonacci.

variando la generación de 3, 5, y 7, según la secuencia de Fibonacci. Para **SBGS** podemos observar en el primer renglón que, (generación 3) coinciden los dos sistemas usados, periódico y cuasirregular, debido a que es exactamente el mismo en cuanto a barreras. Se tiene simetría de conducción para las partes que corresponde a electrones y huecos, como es de esperar. Las oscilaciones son pequeñas formando bandas alrededor de una energía de 0.7, que es la más notoria. En el segundo renglón correspondiente a una generación 5, otra vez se tiene simetría para electrones y huecos, ahora se presentan dos bandas, la de 0.7 se conserva pero se fragmenta en pequeños picos y la otra banda aparece alrededor de una energía de 1.6 en la cual también hay fragmentación en el caso periódico. En el caso cuasirregular fragmenta éstos pequeños picos disminuyéndolos en número y la curva en gen-

eral está por debajo de la del caso periódico. Para el tercer renglón que corresponde a una generación 7, se sigue considerando la simetría y las bandas se siguen presentando más o menos a las mismas energías, sólo que ya se tiene más picos en las dos bandas presentes, el sistema cuasirregular fragmenta fuertemente estos picos suavizando la curva y se sigue manteniendo por debajo del caso periódico.

Ahora para **EBGS** en el primero renglón se tiene la formación de dos bandas diminutas alrederos de las energías 0.2 y 1.2, no se tiene presente simetría ya que sólo hay barrera para electrones, las gráficas correspondientes a **EBGS** están por encima de las correspondientes a **SBGS** debido al efecto Klein, ver contorno (E, θ) . Enseguida las oscilaciones aumenta en las dos bandas que se presentan en las mismas energías, las bandas se desdoblan dando lugar a pequeños picos, el sistema cuasirregular fragmenta estos picos suavizando la curva y además aparece estructura en la parte correspondiente a huecos a pesar que no se tiene barrera en ellos. También, con la formación de dos bandas menos intensas que la parte de electrones, todo esto en el renglón dos.

Finalmente, en la última fila las bandas se conservan en las mismas energías, las oscilaciones son mucho mayores dando lugar a más picos entre cada banda. Nuevamente, el sistema cuasirregular fragmenta los picos reduciendolos, ya cambia fuertemente la estructura presente en huecos a pesar que no hay barrera presente en ellos, otra vez con la formación de dos bandas pero con un número mayor de oscilaciones. Podemos concluir de esta figura que al variar la generación se presenta un número mayor de oscilaciones, las bandas se conservan en las mismas energías, la conductancia para energías bajas en **SBGS** es prácticamente nula y se tiene estructura para huecos en **EBGS** a pesar de que no hay barrera presente en ellos.

La conductancia en **SBGS** y **EBGS** muestran un comportamiento oscilatorio a medida que aumenta la generación según la secuencia de Fibonacci.

Aparte de varios informes destacando los efectos importantes que pueden afectar a las propiedades de transporte de estructuras basados en el grafeno, hasta donde nosotros sabemos, no hay informes dirigidos a explicar la oscilación de la conductancia en estructuras de grafeno. La mayoría de ellos, mencionan que el comportamiento oscilatorio de la conductancia se relaciona con resonancias, estados casi ligados y estados ligados consolidados, con independencia del mecan-

ismo para crear la estructura basada en grafeno [22-35]. Sin embargo, ninguno de ellos aclara cuál de las múltiples resonancias que subyacen en estas estructuras son los responsables de los picos de conductancia.

3.5 Estados Acotados

¿Qué determina las diferencias entre las características de transporte de **SBGS** y **EBGS**?. Para responder a estas cuestiones, se calcula el espectro de estados ligados de **SBGS** y **EBGS**. Estos resultados se muestran en las figuras (9) y (10), usando la ecuación $M_{11}^{BS}(E, k_y; q_x \rightarrow i\alpha_x) = 0$, donde se condiera el caso periódico y aperiódico. Aquí tenemos que imponer condiciones a la frontera de pared-dura, para los diferentes caso siguiendo la secuencia de Fibonacci. En ambas figuras la parte izquierda corresponde a un sistema periódico con 1, 4 y 12 pozos, la parte derecha es el sistema aperiódico de acuerdo a la secuencia de Fibonacci, generaciones 3, 5 y 7. En la 9 los pozos son creados por barreras rompiendo la simetría usando sustratos (**SBGS**) y en la 10 los pozos se generan con barreras electrostáticas (**EBGS**). Las líneas rojas delimitan la región permitida por los estados acotados. Como podemos ver en hay una serie de sub-bandas (o canales de electrones) de acuerdo al número de pozos presentes, que van de 1 en la primer fila, 4 en la segunda y 12 en la tercera en la parte izquierda correspondiente al sistema periódico. En la parte derecha el número de sub-bandas se ve reducido debido a la fragmentación que sufre el sistema con la cuasiperiodicidad. Estas sub-bandas son caracterizadas por un número cuántico, así como el vector de onda transversal, y para valores grandes de k_y son dados aproximadamente por $E_n(k_y) = \hbar v_F [(\frac{n\pi}{d_w})^2 + k_y^2]^{\frac{1}{2}}$. Estas sub-bandas representan ramas de dispersión, y es bien sabido que cuando se abre un canal de dispersión, las propiedades de transporte se ven disminuidas, con un efecto inverso, cuando un canal de dispersión se cierra. Estos fundamentos de las propiedades de transporte explican bastante bien, desde el punto cualitativo, el número de picos de conductancia para **EBGS** en las diferentes generaciones, desde un punto de vista cuantitativo, la correspondencia entre la ubicación de los picos y la apertura de los canales de dispersión, incluso cuando hay una diferencia natural entre condiciones de contorno blandas y duras.

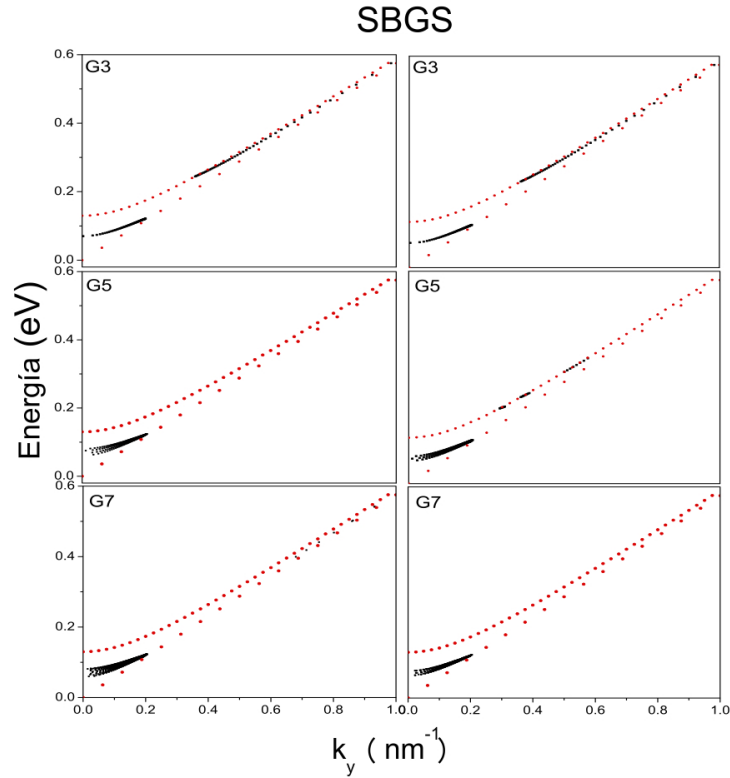


Fig. 9 Estados acotados en SBGS para el caso periódico (primera columna) y aperiódico (segunda columna). Las generaciones consideradas son 3, 5 y 7, primera, segunda y tercera filas, respectivamente.

Argumentos similares se aplican para **SBGS**, sin embargo, en este caso, la región permitida para estados ligados se reduce a medida que aumenta k_y , debido a la dependencia en particular entre las cantidades que delimitan esta región, $E^2 = \hbar^2 v_F^2 k_y^2 + t'^2$. Como resultado de esta reducción, se presenta un cierre sistemático de las ramas de dispersión, contrario de la apertura sistemática de los canales de electrones para **EBGS**. Esta apertura y cierre alternativo de los canales de dispersión explica el aumento pronunciado y la reducción en las propiedades de transporte, de lo cual resulta en picos agudos y estrechos de conductancia en comparación con **EBGS**.

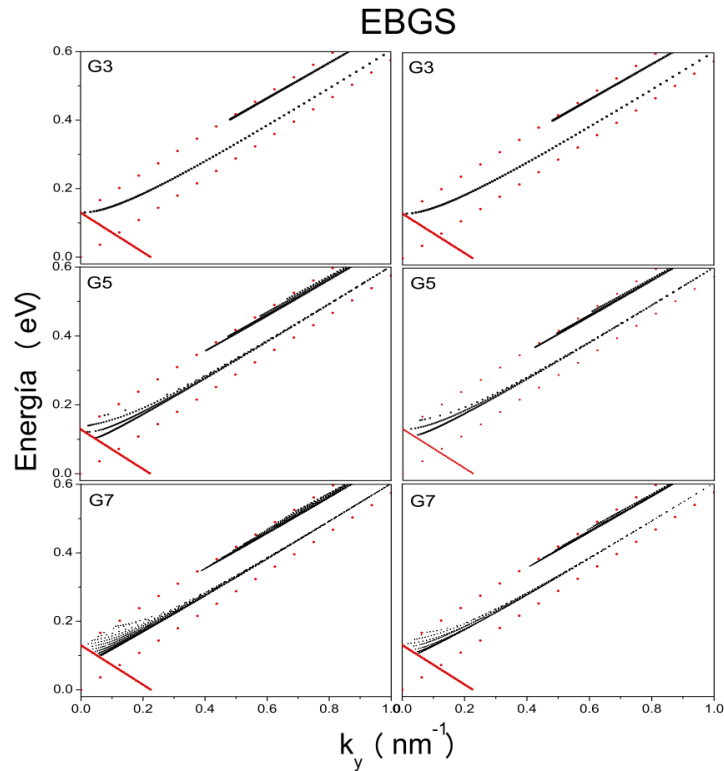


Fig. 10 Estados acotados en EBGS para el caso periódico (primera columna) y aperiódico (segunda columna). Las generaciones consideradas son 3, 5 y 7, primera, segunda y tercera filas, respectivamente.

4 Conclusiones

En resumen, se ha hecho un estudio de las propiedades de transmisión y transporte para sistemas multibarreras en grafeno. El sistema multibarrera considerado tiene carácter cuasirregular ya que se ha empleado la secuencia de Fibonacci para generarlo. Específicamente se consideran dos sistemas: 1) aquellos donde la barrera de potencial es generada por medio de potencial electrostático aplicado perpendicularmente a la sábana de grafeno, y 2) aquellos donde la barrera de potencial es obtenida a través de sustratos que interaccionan fuertemente con el grafeno. Dentro de las peculiaridades que acarrearán los sistemas mencionados se encuentran la no masividad de los electrones de Dirac y la presencia del tunelamiento de Klein para el primero (Barreras

Electrostáticas), y la apertura de brecha de energía prohibida o gap, la masividad de los electrones de Dirac y la supresión del efecto Klein en el segundo de ellos (Barreras con Sustratos). Estos sistemas se han considerado con la finalidad de desentrañar el rol que juega el efecto o tunelamiento de Klein sobre las propiedades mencionadas. Igualmente, se incluye la probabilidad de transmisión y conductancia para el caso periódico con el objetivo de resaltar de forma comparativa el efecto de la cuasirregularidad. Cabe mencionar que este estudio teórico está enmarcado dentro del contexto del método de matriz de transferencia, el cual permite con relativa facilidad estudiar la transmisión y el transporte, así como analizar el parámetro de generación de la secuencia de Fibonacci. Los principales resultados son:

1. La transmisión y conductancia para barreras electrostáticas presentan una asimetría respecto a la energía de los electrones de Dirac la cual no esta presente en el caso de barreras con sustratos.
2. El efecto principal de la cuasirregularidad, aumento en la generación de la secuencia de Fibonacci, es la fragmentación de las bandas de transmisión y la reducción de los picos presentes en la conductancia con respecto al caso periódico;
3. La transmitancia y la conductancia se ven fuertemente reducidas al aumentar el tamaño de la estructura para el caso electrones de Dirac masivos (barreras generadas por sustratos) contrario a los electrones sin masa, donde ambas propiedades se mantiene independientemente del tamaño de la estructura.
4. La distribución angular de la probabilidad de transmisión, esto es, la transmitancia como función del ángulo de incidencia para energía fija, presenta un comportamiento muy distinto para electrones sin masa con respecto al caso masivo, ya que el número de generación no tienen un efecto importante sobre ésta, siendo el tunelamiento de Klein (transmisión perfecta a incidencia normal) y el efecto de colimación (preferencia por ángulos pequeños) los dominantes en este caso.
5. La asimetría presentada en las propiedades de transmisión y transporte para el sistema con barreras electrostáticas se puede entender dado que el potencial aplicado únicamente genera barrera para electrones o huecos según sea la polaridad, mientras que para el caso de sustratos la brecha prohibida generada da como resultado barreras tanto para electrones como para huecos.

6. Especial atención se ha prestado a la naturaleza oscilatoria de la conductancia en el régimen lineal, que muestra que los picos de conductancia resultan de la apertura y cierre de las sub-bandas de energía de estados acotados. A este respecto, la agudeza de los picos de conductancia en **SBGS** proviene de la apertura-cierre de las sub-bandas de energía de estados acotados, por su parte para **EBGS**, una apertura sistemática de sub-bandas, así como el tunelamiento de Klein resulta de reducir picos de conductancia y una mejora global de la conductancia, respectivamente.

Agradecimientos Los autores agradecen el apoyo por parte del CONACYT a través del proyecto CB-2010-151713.

Bibliografía

1. . S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, *Electric field effect in atomically thin carbon films*, Science 306, 666 (2004).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature 438, 197-200 (2005).
3. Y. Zhang, Y. -W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*, Nature 438, 201-204 (2005).
4. A. K. Geim, and K. S. Novoselov. *The rise of graphene*, Nature Mater. 6, 183-191 (2007).
5. P. R. Wallace. *The band theory of graphite*, Phys. Rev. 71, 622-634 (1947).
6. A. H. Castro-Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim. *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys. 81, 109-162 (2009).
7. M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov and A. K. Geim. *Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene*, Nat. Phys. 2, 620-625 (2006).
8. P. E. Allain and J. N. Fuchs. *Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons*, Eur. Phys. J. B 83, 301-317 (2011).

9. E. Maciá. *The role of aperiodic order in science and technology*, Rep. Prog. Phys. 69, 397-441 (2006).
10. L. Esaki and R. Tsu. *Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors*, IBM J. Res. Develop. 14, 61-65 (1970).
11. R. Tsu and L. Esaki. *Tunneling in a finite superlattice*, Appl. Phys. Lett. 22, 562 (1973).
12. R. Pérez-Álvarez, F. García-Moliner and V. R. Velasco. *Some elementary questions in the theory of quasiperiodic heterostructures*, J. Phys. Condens. Matter 13, 3689-3698 (2001).
13. C. Bai and X. Zhang. *Klein paradox and resonant tunneling in a graphene superlattice*, Phys. Rev. B 76, 075430 (2007).
14. M. Barbier, F. M. Peeters, P. Vasilopoulos and J. M. Pereira Jr. *Dirac and Klein-Gordon particles in one-dimensional periodic potentials*, Phys. Rev. B 77:115446 (2008).
15. C. H. Park, Y. W. Son, L. Yang, M. L. Cohen and S. G. Louie. *Electron beam supercollimation in graphene superlattices*, Nano Lett. 8, 2920-2924 (2008).
16. M. Barbier, P. Vasilopoulos and F. M. Peeters. *Dirac electrons in a Kronig-Penney potential: Dispersion relation and transmission periodic in the strength of the barriers*, Phys. Rev. B 80, 205415 (2009).
17. M. Barbier, P. Vasilopoulos and F. M. Peeters. *Extra Dirac points in the energy spectrum for superlattices on single-layer graphene*, Phys. Rev. B 81, 075438 (2010).
18. Z. F. Liu, N. H. Liu and Q. P. Wu. *Electronic spin precession in graphene based superlattice with periodical gate and magnetic modulation*, Physica E 44, 609-613 (2011).
19. Z. F. Liu, Q. P. Wu and N. H. Liu. *Electronic energy band and transport properties in monolayer graphene with periodically modulated magnetic vector potential and electrostatic potential*, Commun. Theor. Phys. 57, 315-319 (2012).
20. L. Sun, C. Fang, Y. Song and Y. Guo. *Transport properties through graphene-based fractal and periodic barriers*, J. Phys.: Condens. Matter 22, 445303 (2010).
21. S. H. R. Sena, J. M. Pereira Jr., G. A. Farias, M. S. Vasconcelos and E. L. Albuquerque. *Fractal spectrum of charge carriers in quasiperiodic graphene structures*, J. Phys.: Condens. Matter 22, 465305 (2010).

22. S. Mukhopadhyay, R. Biswas and C. Shina. *Resonant tunneling in a Fibonacci bilayer graphene superlattice*, Phys. Status Solidi B 247, 342-346 (2010).
23. P. Zhao, and X. Chen. *Electronic band gap and transport in Fibonacci quasi-periodic graphene superlattice*, Appl. Phys. Lett. 99, 182108 (2011).
24. X. Chen, P. Zhao and Q. Zhu. *Double-periodic quasi-periodic graphene superlattice: non-Bragg band gap and electronic transport*, J. Phys. D: Appl. Phys. 46, 015306 (2013).
25. T. Ma, C. Liang, L. Wang and H. Q. Lin. *Electronic band gaps and transport in aperiodic graphene superlattices of Thue-Morse sequence*, Appl. Phys. Lett. 100, 252402 (2012).
26. Z. Zhang, H. Li, Z. Gong, Y. Fan, T. Zhang and H. Chen. *Extend the omnidirectional electronic gap of Thue-Morse aperiodic gapped graphene superlattices*, Appl. Phys. Lett. 101, 252104 (2012).
27. I. Rodríguez-Vargas, J. Madrigal-Melchor and O. Oubram. *Resonant tunneling through double graphene systems: A comparative study of Klein and non-Klein tunneling structures*, J. Appl. Phys. 112, 073711 (2012).
28. A. F. Young and P. Kim. *Quantum interference and Klein tunneling in graphene heterojunctions*, Nat. Phys. 5, 222-226 (2009).
29. A. Goldstein. *Tackling tyranny*, Sci. Am. 8, 80-81 (1997).
30. S. Y. Zhou, G. -H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D. -H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro-Neto, and A. Lanzara. *Substrate-induced bandgap opening in epitaxial graphene*, Nat. Mater. 6, 770-775 (2007).
31. P. Markos, and C. M. Soukoulis. *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*, (Princeton University Press, Princeton 2008).
32. S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, Cambridge 1995).

Electrones de Dirac bajo Potenciales Cantor Aperiódicos Basados en Grafeno

R. Rodríguez-González, J. Madrigal-Melchor, J. C. Martínez-Orozco and I. Rodríguez-Vargas.¹

Resumen

En este trabajo, se investigan las propiedades de transmisión, transporte y estructura de niveles a través de sistemas cuasirregulares basados en grafeno, en particular, el conjunto prefractal Cantor Triádico. La reciente investigación ha logrado encontrar diferentes mecanismos que modifican las propiedades del grafeno, particularmente, su relación de dispersión y su brecha prohibida. Los mecanismos que destacan son la aplicación de campo electrostático y los sustratos de ruptura de simetría, gracias a su simplicidad teórica y experimental, ambos mecanismos son capaces de generar barreras de potencial. Así pues, hacemos uso de estos mecanismos de forma tal que las barreras de potencial atiendan las reglas de la secuencia de nuestro sistema cuasirregular. Por tanto, llevamos a cabo un análisis comparativo entre estos dos sistemas: el caso electrostático y el caso de sustratos. Todo esto con la finalidad de averiguar como afecta la cuasirregularidad a las propiedades físicas mencionadas y descifrar el papel que desempeña el efecto o tunelamiento Klein en las propiedades de transmisión.

Dentro de las propiedades de transmisión, se computó la transmitancia en función de la energía para diferentes ángulos de incidencia y distintos números de generación. Resultando la presencia del efecto Klein para el caso electrostático y la ausencia del mismo para el caso de sustratos, aunado a esto se presenta una asimetría (electrostático) y

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad Esquina con Paseo la Bufa, S/N. C.P. 98060. Zacatecas, Zac. México.

simetría (sustratos) en los patrones de transmitancia. De igual manera, se calculó en ambos casos la distribución angular de la transmitancia para energías fijas y diferentes generaciones, encontrando rasgos de autosimilaridad con respecto a la generación, destacando el efecto Klein y el efecto de colimación para el caso electrostático, producto de la conservación del pseudo-espín, así como, del carácter evanescente y propagante propio de las funciones de onda dentro de esta clase de estructuras. Asimismo, se obtuvo la evolución de las curvas de contornos de transmisión en función de la generación, corroborando una vez más en el caso electrostático la presencia del efecto Klein independientemente del ancho de partida y de la generación. Además, cuando se incrementa la generación, las curvas cambian de asimétricas a simétricas (electrostático) mientras que las ventanas de transmisión disminuyen (sustratos).

Con respecto a las propiedades de transporte, se calcularon las curvas de conductancia para diferentes anchos de partida y distintas generaciones obteniendo para el caso electrostático una asimetría y una tendencia lineal en las curvas a medida que aumenta la generación para energías positivas. En el caso de sustratos, se presentan curvas simétricas y más interesante, aparecen patrones autosimilares con la generación. Para entender la naturaleza oscilante de la conductancia se procedió a calcular el espectro de los estados acotados o mejor dicho, la dinámica de formación y fragmentación de subbandas, debido a que la apertura y apertura-oclusión de éstas determinan el carácter oscilante (picos). Finalmente, obtenemos un agrupamiento de tres subbandas que se degeneran en el caso electrostático y ocluyen-degeneran en el caso de sustratos.

Dirac Electrons under Graphene-Based Aperiodic Cantor Potentials

Abstract

In this work, we investigate the transmission, transport and level structure properties through graphene-based quasiregular systems, in particular, the triadic Cantor pre-fractal set. The recent research has achieved to find different mechanisms that modify the graphene properties, particularly, its dispersion relation and forbidden gap. The

mechanisms that stand out are the application of electrostatic field and the breaking-symmetry substrates due to their theoretical and experimental simplicity, both mechanisms capable to generate potential barriers. So, we use these mechanisms such that the potential barriers attend the sequence rules of our quasiregular system. Therefore, we carried out a comparative analysis between these two systems: the electrostatic and substrate case. All this with the aim of find out how these mechanisms affects the quasi-regularity to the physical properties mentioned above and to decipher the role played by the Klein effect or tunneling in the transmission properties.

Within the transmission properties, we compute the transmittance as a function of the energy for different incident angles and generation numbers. Resulting the presence of Klein effect for the electrostatic case and the absence of it for the substrate case, combined to this is presented an asymmetry (electrostatic) and symmetry (substrate) in the transmission patterns. Likewise, we calculate in both cases the angular distribution of the transmittance for fixed energies and different generations, finding self-similarity features with respect to the generation, highlighting the Klein and collimation effects for the electrostatic case, as a result of the pseudo-spin conservation, as well as, the evanescent and propagating character typical of the wave functions in this kind of structures. We also obtain the evolution of the transmission contours as a functions of the generation, corroborating again in the electrostatic case the presence of Klein effect regardless of the starting width and generation. Moreover, when the generation increases the curves changes from asymmetrical to symmetrical (electrostatic) while the transmission windows decreases (substrate).

With respect to the transport properties, we calculate the conductance curves for different starting widths and generations, obtaining in the electrostatic case an asymmetry and a linear trend in the curves as the generations increases for positives energies. In the substrate case, symmetrical curves are presented and more interesting, we obtain self-similar patterns with the generations. To understand the oscillating nature of conductance we calculate the spectrum of bound states or rather, the dynamics of formation and fragmentation of subbands, because the opening and opening-occlusion of these determine the oscillating character (peaks). Finally, we obtain a grouping of three subbands that are degenerated in the electrostatic case and occluded-degenerated in the substrate case.

1 Introducción

De la punta de un lápiz se puede obtener algo nunca antes visto para la Física Teórica, un nuevo material de sólo dos dimensiones: el grafeno [1, 2]. Desde su descubrimiento este material ha despertado un gran interés en la comunidad científica tanto teórica como experimental debido a sus propiedades inusuales [3-9], ya que sirve como conexión entre la Física del Estado Sólido y la Electrodinámica Cuántica [10-12]. Otro de los aspectos interesantes es la gran gama de sus posibles futuras aplicaciones en diversos sectores, particularmente, en el ámbito tecnológico [13-16]. Altamente deseado por sus cuantiosos atributos prometedores, el grafeno resulta ser un arreglo de átomos de carbono densamente empaquetados en una red cristalina bidimensional en forma de hexágonos, de tan sólo un átomo de espesor.

Aparte del gran potencial tecnológico, la naturaleza relativista de los portadores de carga en el grafeno ofrece la oportunidad de tratar cuestiones relativistas exóticas y contra intuitivas dentro de la Física del Estado Sólido que no son accesibles en otros materiales. En particular, el fenómeno conocido hoy en día como *efecto túnel Klein* o *tunelamiento Klein* [7, 9, 17].

Por otro lado, cuando se hace mención a sistemas ordenados se entiende que ellos muestran cierto patrón de regularidad. Más aún, regularidad ha sido, por lo general, asociado a periodicidad. Sin embargo, existe otra forma de orden que se presenta en la naturaleza: el orden aperiódico. Eso significa que existen sistemas que siguen reglas bien definidas (orden) pero sin ser repetitivas (periodicidad). Es interesante indicar que en la naturaleza existen sistemas que siguen reglas de conformación complejas pero bien definidas; es decir, son ordenadas pero no son periódicas. A este tipo de sistemas se les conoce como sistemas aperiódicos o cuasirregulares.

En este sentido, los sistemas cuasirregulares consisten en una sucesión de capas construidas de acuerdo a cierta regla de sustitución, de manera que resulta un sistema no periódico pero con un algoritmo preciso de secuenciación (arreglo) de las distintas capas. De manera tal que estos sistemas juegan un papel fundamental en los distintos ámbitos de la ciencia y la tecnología, debido a la capacidad de introducir y explotar el orden aperiódico en el diseño de dispositivos

novedosos en heteroestructuras semiconductoras con potenciales aplicaciones prácticas, así como por las propiedades que ofrecen estos sistemas: autosimilaridad, fractalidad y criticalidad [18, 19].

Dos aspectos fundamentales son los que caracterizan a los sistemas cuasirregulares, por un lado, el espectro (que representa qué energías están permitidas o no en estas estructuras) es altamente fragmentado. Es decir, aparecen varias bandas permitidas que se dividen a su vez en varias subbandas, y éstas a su vez en otras subbandas menores, presentado así el espectro ciertos rasgos autosimilares. Por otro lado, el comportamiento de las funciones de onda se encuentra entre el comportamiento extendido (en el sentido de Bloch), propio de los sistemas periódicos y el localizado, propio de los sistemas desordenados, en su lugar éstas son críticas en la estructura cuasirregular. Es entonces razonable esperar que algunos enfoques de gran alcance introducidos recientemente en esta área contribuirán en definitiva a lograr una comprensión más profunda y útil sobre sistemas cuasirregulares en la naturaleza en los próximos años.

Por tanto, los sistemas multicapas periódicos y aperiódicos en grafeno, creados mediante los diferentes mecanismos: campos electrostático y magnéticos, ruptura de simetría con sustratos, tensión, parecen ser una elección crucial para modular las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac. En este contexto, se reportan los primeros estudios teóricos en sistemas aperiódicos [20-29], tal es el caso de la modulación aperiódica en sistemas basados en grafeno aplicando la secuencia Cantor [20, 24], Fibonacci [21-23], Thue-Morse [25-28] y Periodo-Doble [29].

La reciente aplicación de sistemas cuasirregulares para modular propiedades de transmisión y transporte se han convertido en una línea de investigación importante para la elaboración de novedosos dispositivos electrónicos, esto gracias a sus propiedades ofertadas [18-19]. Adicionalmente, estas estructuras cuasirregulares se pueden considerar como fractales, que son objetos geométricos homogéneos y autosimilares, los cuales pueden ser utilizados para describir muchos fenómenos físicos, tales como procesos estadísticos y estructuras naturales. En este entorno, se han reportado durante los últimos años varios resultados acerca del transporte electrónico y propiedades de modulación en sistemas cuasirregulares [20-29], a pesar de esos esfuerzos, existen pocos estudios acerca de sistemas cuasirregulares, en particular, sobre el conjunto Cantor Triádico [20, 24]. Razón por la

cual este trabajo está enfocado en explorar la relación entre la naturaleza de los portadores de carga y su comportamiento en esta clase de estructuras basadas en grafeno.

El interés de este trabajo radica en el estudio teórico de las propiedades de los sistemas multicapas cuasirregulares reflejadas en el comportamiento de las cuasipartículas en el grafeno, que a su vez se manifiestan en las propiedades de transmisión y transporte medidas a través de un arreglo de barreras de potencial generadas por medio de sustratos de ruptura de simetría o por la aplicación de campo electrostático. En concreto, el objetivo principal en este trabajo es estudiar, analizar y entender las peculiaridades de los sistemas cuasirregulares basados en grafeno, en particular, el sistema cuasirregular Cantor Trídico. Uno de los objetivos es estudiar teóricamente las propiedades de transmisión y transporte de los electrones de Dirac a través de sistemas multicapas de grafeno siguiendo el ordenamiento de la secuencia de nuestro sistema cuasirregular en cuestión, utilizando como método de cálculo el esquema de la Matriz de Transferencia.

2 Metodología

En este apartado se presenta el método matemático de la Matriz de Transferencia [30,31] implementado para el estudio de electrones de Dirac en medios multicapas basados en grafeno. Para tener una idea clara del problema a resolver considere un sistema a capas de grafeno o en otras palabras, un conjunto finito de barreras de potencial, que como se mencionó en el capítulo anterior se puede generar por diferentes mecanismos, para nuestro objeto de estudio consideramos solamente dos de ellos: el caso de sustratos y el caso electrostático.

2.1 Barreras generadas por medio de sustratos y por campo electrostático

En el caso de sustratos, se ha encontrado que los sustratos tales como el SiC no solamente genera una brecha prohibida en el espectro del grafeno sino que también cambia la relación de dispersión lineal a parabólica, característica sobresaliente en esta clase de estructuras. La

ecuación de Dirac correspondiente a este caso es:

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + t' \sigma_z] \psi(x, y) = E \psi(x, y), \quad (1)$$

donde v_F es la velocidad de Fermi de los electrones de Dirac en el grafeno del orden de $c/300$, $t' = mv_F^2$ es el término de masa, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ las matrices de Pauli, $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ el operador de momento y σ_z la componente z de la matriz de Pauli. Esta ecuación se resuelve dada la siguiente relación de dispersión parabólica,

$$E^2 = \hbar^2 v_F^2 q^2 + t'^2, \quad (2)$$

donde t' es proporcional al ancho de la brecha prohibida de valor $2t'$ (para todos nuestros cálculos numéricos elegimos $t'=0.13$ eV) y q es el vector de onda correspondiente a la región del SiC. Las funciones de onda se pueden escribir como:

$$\psi_{\pm}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ v_{\pm} \end{pmatrix} e^{\pm iq_x x + iq_y y}, \quad (3)$$

con

$$v_{\pm} = \frac{E - t'}{\hbar v_F (\pm q_x - iq_y)}. \quad (4)$$

En el caso electrostático, el principal efecto que surge al aplicar campo electrostático es el desplazamiento de los conos de Dirac con respecto al eje de la energía, el cual es proporcional a la intensidad del voltaje aplicado V_0 y además, depende de la polaridad del potencial generando así barreras para electrones cuando es positivo y barreras para huecos cuando es negativo. Este desplazamiento se puede obtener mediante la ecuación de Dirac sin el término de masa, en su lugar aparece un término propio del potencial aplicado tal que,

$$[v_F(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) + V(x)] \psi(x, y) = E \psi(x, y), \quad (5)$$

donde $V(x) = V_0$, es el potencial unidimensional a lo largo de la dirección x y ψ representa la función bi-espinor. Esta ecuación se puede resolver en forma directa dando la siguiente relación de dispersión lineal,

$$E - V_0 = \pm \hbar v_F q, \quad (6)$$

donde “ \pm ” representa a los electrones y huecos, respectivamente. La función de onda tiene la misma forma como en el caso de sustratos (ec. 3), con la diferencia de que el coeficiente del bi-espinor está dado como:

$$v_{\pm} = \frac{\hbar v_F (\pm q_x - i q_y)}{E - V_0}. \quad (7)$$

2.2 Formalismo matricial aplicado a sistemas multicapas

Tomando en cuenta las funciones de onda y relaciones de dispersión para ambos casos (sustrato y electrostático) es sencillo calcular las propiedades de transmisión, transporte y estructura de niveles de nuestro sistema en cuestión. El método de la Matriz de Transferencia consiste en establecer una relación entre los coeficientes de la onda incidente y reflejada del medio inicial (A_0 y B_0) con los coeficientes de la onda transmitida y reflejada del medio final (A_{N+1} y $B_{N+1} = 0$) mediante las condiciones de continuidad de las funciones de onda en cada una de las interfaces, entonces, resulta la relación:

$$\begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = D_0^{-1} \left[\prod_{j=1}^N D_j P_j D_j^{-1} \right] D_0 \begin{pmatrix} A_{N+1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

donde las matrices D_j 's y P_j 's son las matrices dinámicas y de propagación, respectivamente, de cada una de las regiones que componen el sistema multicapas definidas por,

$$D_j = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ v_{+j} & v_{-j} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

y

$$P_j = \begin{pmatrix} e^{-iq_{x,j}d_j} & 0 \\ 0 & e^{iq_{x,j}d_j} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

aquí $j = 1, 2, \dots, N$, $q_{x,j}$ y d_j es la componente x del vector de onda y el ancho de la región j el cual puede ser barrera o pozo dependiendo de la estructura multibarrera específica, y D_0 es la matriz dinámica de la región semi-infinita de izquierda a derecha, que en nuestro caso son las mismas. Definiendo la Matriz de Transferencia M como:

$$M = D_0^{-1} \left[\prod_{j=1}^N D_j P_j D_j^{-1} \right] D_0, \quad (11)$$

por tanto, la transmitancia está dada en términos del elemento matricial M_{11} ,

$$T = \frac{1}{|M_{11}|^2}. \quad (12)$$

Empleando y ajustando la fórmula de Landauer-Büttiker [32] para el caso del grafeno, resulta que la conductancia en el régimen lineal toma la forma,

$$G/G_0 = E_F^* \int_{-\pi/2}^{\pi/2} T(E_F^*, \theta) \cos \theta d\theta, \quad (13)$$

donde $E_F^* = E_F/E_0$ es la energía de Fermi adimensional con $E_0 = V_0 = t'$, $G_0 = 2e^2 L_y E_0 / h^2 v_F$ es el factor de conductancia fundamental con L_y el ancho del sistema en la coordenada transversal y θ es el ángulo de incidencia de los electrones con respecto a la coordenada x . Por último, el espectro de los estados acotados se calcula al cambiar de condiciones a la frontera blandas a duras, mediante la resolución de la ecuación trascendente entre la energía y el vector de onda transversal de electrones de Dirac como,

$$M_{11}^{BS}(E, k_y; q_x \rightarrow i\alpha_x) = 0, \quad (14)$$

donde q_x es el vector de onda a lo largo de la coordenada x definida a través de la ec. (2) y ec. (6), y M_{11}^{BS} es el elemento matricial (1,1) de

$$M^{BS} = D_1^{-1} \left[\prod_{l=2}^{N-1} D_l P_l D_l^{-1} \right] D_1. \quad (15)$$

Aquí, el superíndice “BS” indica el caso de estados acotados.

3 Resultados

A continuación se presentan los resultados numéricos acerca de las propiedades de transmisión, esto es, los patrones de transmitan-

cia como función de la energía, luego se muestran los patrones de la distribución angular con respecto a la transmitancia, asimismo, se dan a conocer los patrones de transmitancia como función del ángulo de incidencia y de la energía, denominados: contornos de transmisión. Por último, se abordan los resultados sobresalientes a las propiedades de transporte, es decir, los patrones de conductancia y finalmente, se presentan los espectros de estados acotados.

3.1 *Propiedades de Transmisión*

En esta sección se presentan los resultados numéricos más representativos acerca de las propiedades de transmisión a través de nuestro sistema cuasirregular en cuestión, tales como: transmitancia como función de la energía, distribución angular de la transmitancia y contornos de transmisión, todos los cálculos muestran patrones tanto para el caso de sustratos como para el caso electrostático, exponiendo además un análisis comparativo entre ambos casos.

3.1.1 *Transmitancia como función de la energía*

Una de las cantidades más ilustrativas sobre las propiedades de transmisión es la transmitancia como función de la energía, por consiguiente, este cálculo se efectúa al variar los siguientes parámetros fundamentales: el ángulo de incidencia θ , el número de generación de la secuencia N y el ancho de partida w . Este último se refiere a la longitud asignada a la primera generación, que después irá disminuyendo por un factor a 3 dependiendo de la generación seleccionada.

La Fig. 1 manifiesta la evolución de la transmitancia a través del número de generación, por consiguiente, cuando el número de generación toma el valor de 3 resultan los patrones ilustrados en el primer renglón y cuando toma el valor de 4 resultan los patrones ilustrados en el segundo renglón, además, la primera y segunda columna representan el sistema electrostático y el de sustratos, respectivamente. Otro parámetro fundamental es el ancho de partida que en esta ocasión toma el valor de $540a$, de igual manera, es importante señalar que ambos sistemas se basan en una sola capa de grafeno por lo que $E_0 = V_0 = t' = 0.13$ eV. Más aún, en los cuatro paneles de la Fig.

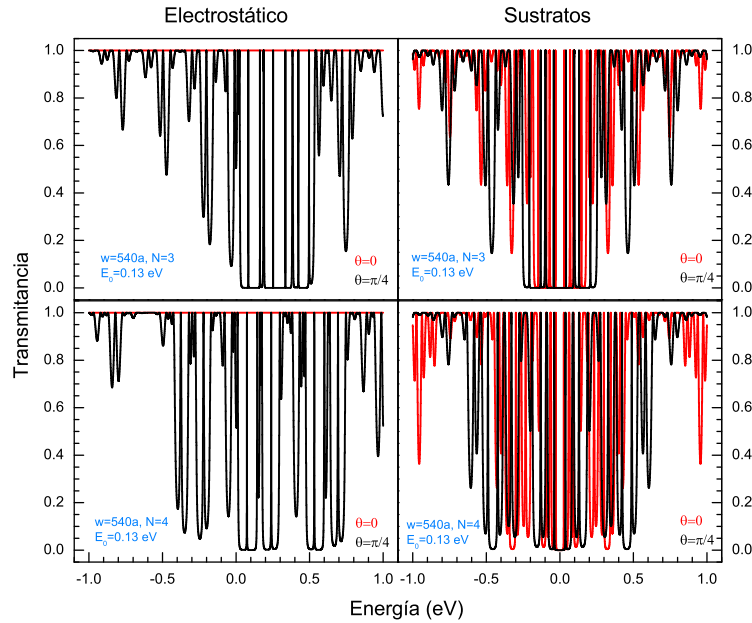


Fig. 1 Esquema comparativo de la transmitancia como función de la energía para el caso electrostático (columna izquierda) y el caso de sustratos (columna derecha), los parámetros utilizados son un ancho de partida $w = 180a$ y una altura de barrera $E_0 = 0.13$ eV para $N = 3$ (primer renglón) y $N = 4$ (segundo renglón). En todos los paneles la línea roja indica incidencia normal ($\theta = 0$) y la línea negra incidencia oblicua ($\theta = \pi/4$).

1 la línea roja representa electrones de Dirac incidiendo a $\theta = 0$ y la línea negra a electrones incidiendo a $\theta = \pi/4$. Por un lado (electrostático), se observa que al incrementar la generación (3 a 4) el espectro de transmisión a incidencia normal se mantiene siempre igual a la unidad (línea roja), es decir, los electrones perciben como si el arreglo de barreras y pozos fueran transparentes, por consiguiente, se puede afirmar que el efecto Klein está presente en esta clase de sistemas. Por otro lado (sustratos), es fácil notar que tanto para incidencia normal ($\theta = 0$) como para incidencia oblicua ($\theta = \pi/4$) los espectros de transmitancia tienen envolventes muy estructuradas, o en otras palabras, los electrones efectivamente perciben la presencia de barreras y pozos, por tanto, se puede decir que esta clase de sistemas carecen del efecto Klein.

3.1.2 Distribución angular de la Transmitancia

Continuando con las propiedades de transmisión es turno de ilustrar los patrones de transmitancia como función del ángulo de incidencia θ del electrón o también denominados usualmente como distribución angular de la transmitancia, aquí los parámetros primordiales son: el número de generación de la secuencia N , el ancho de partida w y la energía de incidencia del electrón E_i , ésta última representa la altura a la cual incide el electrón sobre la barrera de potencial.

La distribución angular de la transmitancia en función de la evolución de la generación se bosqueja en la Fig. 2, las generaciones involucradas en los cálculos son: 3 (primer renglón), 4 (segundo renglón), 5 (tercer renglón) y 6 (cuarto renglón), respectivamente. Todo lo anterior se llevó acabo para un ancho de partida $w = 540a$ y una energía de incidencia $E_i = 0.10$ eV y, de la misma manera que en las gráficas anteriores la columna izquierda representa el sistema electrostático y la derecha el sistema de sustratos. Considerando solamente los espectros de transmitancia ilustrados por la columna izquierda (electrostático), es fácil corroborar que el efecto Klein sigue presente para incidencia normal, sin importar el número de generación. En esta ocasión, los cuatro patrones de transmitancia correspondientes al caso electrostático conservan una envolvente muy similar a pesar de pasar de una generación a otra, por consecuente, es posible hablar de rasgos de autosimilaridad entre generaciones. Examinando ahora los espectros de transmitancia pertenecientes a la columna derecha (sustratos), se contempla la ausencia del efecto relativista interbandas (efecto Klein). Incluso, para las dos primeras generaciones (3 y 4) ocurre lo contrario, es decir, a incidencia normal la transmitancia tiende a cero, mientras que para las dos generaciones restantes (5 y 6) la transmitancia tiene un aumento, sin embargo, éste está muy alejado de la unidad. Asimismo, para cada uno de los cuatro paneles del lado derecho surgen seis regiones resonantes separadas por regiones no resonantes, que permanecen visibles a pesar de variar la generación y donde las regiones no resonantes se vuelven menos profundas a medida que aumenta la generación. En esta situación, las envolventes de los espectros de transmitancia están gobernadas por las seis regiones resonantes, por lo que emergen de manera natural características autosimilares, es decir, espectros de transmitancia que conservan sus en-

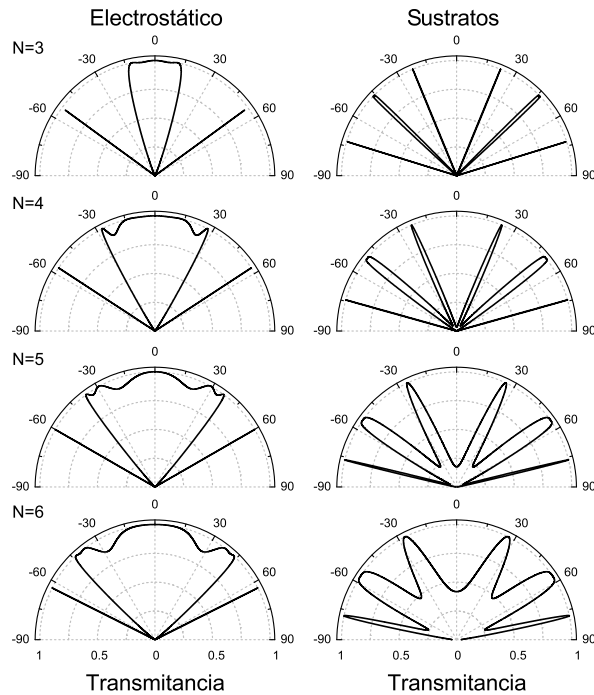


Fig. 2 Distribución angular de la transmitancia en coordenadas polares para el caso electrostático (columna izquierda) y el caso de sustratos (columna derecha), todas las curvas de transmitancia son calculadas para un ancho de partida $w = 540a$ y una energía de incidencia $E_i = 0.10$ eV. El primer, segundo, tercero y cuarto renglón corresponden a la generación 3, 4, 5 y 6, respectivamente.

volventes al variar algún parámetro fundamental, que en este caso, es el número de generación.

3.1.3 Contornos de Transmisión

Para tener una mejor visión acerca del comportamiento de la transmitancia a través de nuestro sistema cuasirregular, el conjunto prefractal Cantor Triádico, se procedió a calcular dicha propiedad en función tanto del ángulo de incidencia como de la energía, este tipo de gráficas se denominan como *contornos de transmisión*. El cálculo se efectuó para el caso electrostático y el caso de sustratos, además, para cumplir tal fin se variaron el ancho de partida w y el número de generación N .

Las curvas de contornos de transmisión para el caso electrostático (columna izquierda) y el caso de sustratos (columna derecha) se mues-

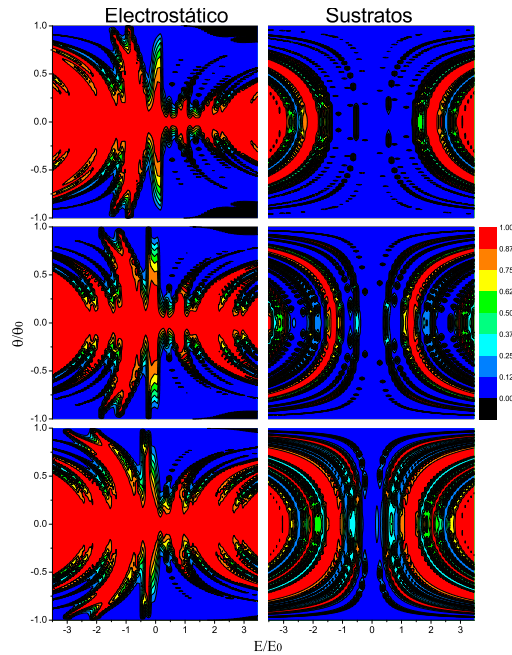


Fig. 3 Contornos de transmisión para el caso electrostático (columna izquierda) y el caso de sustratos (columna derecha), el primer, segundo y tercer renglón corresponden a la generación 3, 4 y 5, respectivamente. Todos los cálculos se efectúan para un ancho de partida $w = 540a$.

tran en la Fig. 3, estas curvas son calculadas con un ancho de partida igual a $540a$ y para las generaciones 3, 4 y 5 representadas por el primer, segundo y tercer renglón, respectivamente. A lo largo de este trabajo todas las curvas de contornos de transmisión presentadas están normalizadas a $E_0 = 0.13$ eV y $\theta_0 = \pi/2$. Al analizar el caso electrostático se puede apreciar que las curvas correspondientes a los huecos y electrones pasan a ser casi simétricas, asimismo, es importante señalar que a pesar de cambiar de generación, las curvas de contornos de transmisión conservan una estructura muy particular. Mientras tanto para el caso de sustratos prevalece la estructura simétrica de forma semi-circular con regiones alternadas de baja y alta transmitancia, de igual manera, es importante mencionar que efectivamente en esta clase de sistema se presenta una ausencia del efecto Klein, lo cual se aprecia fácilmente por las curvas correspondientes a la columna derecha de la Fig. 3.

3.2 *Propiedades de Transporte*

Después de mostrar en las secciones anteriores las propiedades de transmisión, es turno de analizar en la presente sección aquellas curvas sobresalientes con respecto a las propiedades de transporte, tales como: conductancia en el régimen lineal y el espectro de estados acotados, este último con la finalidad de entender el comportamiento de las curvas de conductancia, en especial atención, las oscilaciones que ahí se manifiestan.

3.2.1 **Conductancia en el Régimen Lineal**

A continuación se exhiben las curvas referentes a la conductancia dentro del régimen lineal como función de la energía, en esta ocasión los parámetros fundamentales son una vez más el ancho de partida y el número de generación de nuestro sistema cuasirregular, el conjunto prefactal Cantor Triádico.

La Fig. 4 corresponde a la evolución de las curvas de conductancia como función de la generación para el caso electrostático (primer renglón) y el caso de sustratos (segundo renglón), además todas las curvas son calculadas para un ancho de partida equivalente a $540a$. En los dos sistemas (electrostático y sustratos) las generaciones empleadas son 3, 4, 5 y 6 indicadas por las líneas en color negro, rojo, azul y verde, respectivamente. Para el sistema conformado por la aplicación de campo electrostático, es evidente la asimetría entre las curvas con respecto a la energía (Fig. 4 (izquierda-superior)), más aún, con la finalidad de analizar con más detalle el comportamiento de estas curvas se procedió a realizar una amplificación sobre una región en específico, ver Fig. 4 (derecha-superior). Con base a esta amplificación se puede ver como las oscilaciones o picos son menos intensos a medida que incrementa la generación, siendo la última curva ($N = 6$) casi lineal. Por otro lado, el sistema conformado por sustratos de ruptura de simetría muestra curvas de conductancia con un comportamiento simétrico en todo el intervalo de energía (Fig. 4 (izquierda-inferior)), asimismo, se presentan picos por debajo y encima de la altura de la barrera de potencial, los cuales siguen el mismo efecto que el caso electrostático al cambiar de generación. Otro característica sobresaliente y que es importante mencionar, es la autosimilaridad ma-

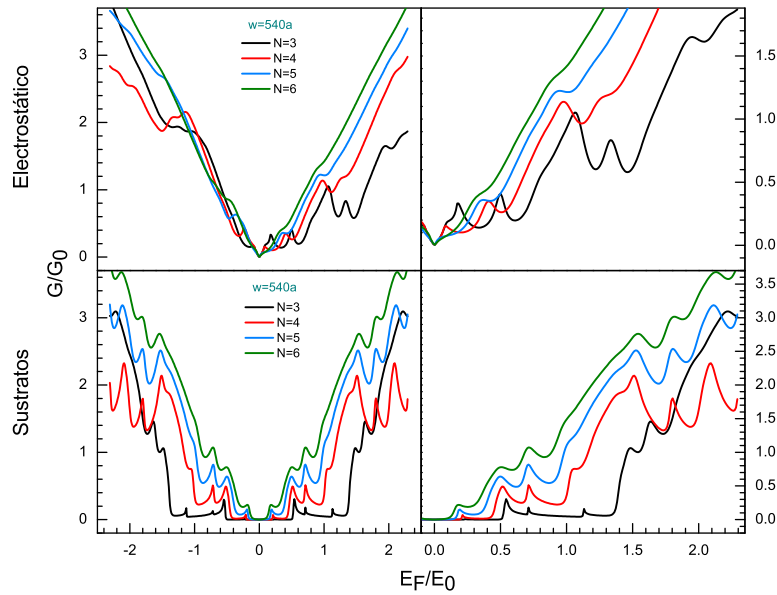


Fig. 4 Conductancia como función de la energía de Fermi para el caso electrostático (primer renglón) y el caso de sustratos (segundo renglón). La línea negra, roja, azul y verde corresponden a la generación 3, 4, 5 y 6 respectivamente. La segunda columna representa ampliaciones de las curvas del caso electrostático (derecha-superior) y del caso de sustratos (derecha-inferior), aquí el ancho de partícula toma el valor de $540a$.

nifestada entre las curvas oscilantes de las generaciones 4, 5 y 6, es decir, las estructuras de las curvas correspondientes a estas tres generaciones son muy semejantes solamente que a diferentes escalas, ver Fig. 4 (derecha-inferior). Igualmente, los picos característicos de estas tres curvas tienden a permanecer en el mismo rango de energía a pesar de cambiar de generación, ésto como resultado de la presencia de la autosimilaridad reflejada en las curvas de conductancia.

En términos generales, se puede afirmar que efectivamente las propiedades geométricas, como lo es la autosimilaridad, de nuestro sistema cuasirregular, el conjunto prefractal Cantor Triádico, se reflejan de alguna manera en las propiedades de transporte en particular en las curvas de conductancia.

3.2.2 Espectro de Estados Acotados

Finalmente, es turno de calcular y analizar el espectro de los estados acotados característicos de nuestro sistema cuasirregular en cuestión, el objetivo principal de dicho análisis es entender el comportamiento oscilatorio de las curvas de conductancia expuestas en la sección precedente o en otro contexto, entender el comportamiento de los electrones de Dirac a través de nuestro sistema. Por tanto, para llevar a cabo este cálculo es necesario que el ancho de la primera y última barrera tienda a infinito, tal y como se mencionó en la sección anterior, de modo que se asegure el confinamiento de la partícula.

En la Fig. 5 se muestra la evolución en función del número de la generación del espectro de los estados acotados para el caso electrostático y de sustratos representados por la columna izquierda y derecha, respectivamente. Las generación empleadas son 3 (primer renglón), 4 (segundo renglón), 5 (tercer renglón) y 6 (cuarto renglón), el ancho de partida utilizado es $w = 540a$ y una vez más las líneas punteadas en color rojo indican las zonas permitidas para los estados acotados en ambos casos. Con respecto al sistema formado por barreras de potencial generadas mediante campo electrostático, se observa claramente la apertura de tres subbandas por debajo del alto de la barrera (0.13 eV) indicadas por las flechas en color azul y a medida que aumenta el vector de onda éstas tiende a juntarse, enseguida, se genera otra subbanda por encima del alto de la barrera indica por las dos flechas en color rojo, luego, ocurre algo similar a lo descrito para energías por debajo de la barrera, es decir, nuevamente resulta la apertura de tres subbandas agrupadas indicando la apertura y la unión de éstas por medio de flechas verdes. Para una generación más alta ($N = 4$) suceden cosas muy similares, esto es, se manifiesta un agrupamiento de tres subbandas por debajo y encima del alto de la barrera. Tomando en cuenta la generación $N = 5$, observamos la apertura y agrupamiento de tres subbandas por debajo del alto de la barrera representadas por las flechas azules, seguido de una subbanda no agrupada indicada por flechas rojas, en esta ocasión, para energías por encima del alto de la barrera no solamente surge una sino dos regiones de agrupamiento conformadas cada una por tres subbandas, la primera región de subbandas está señalada por flechas verdes y la segunda por flechas moradas. Para la última generación ($N = 6$) se manifiesta un comportamiento de los estados acotados análogo al de

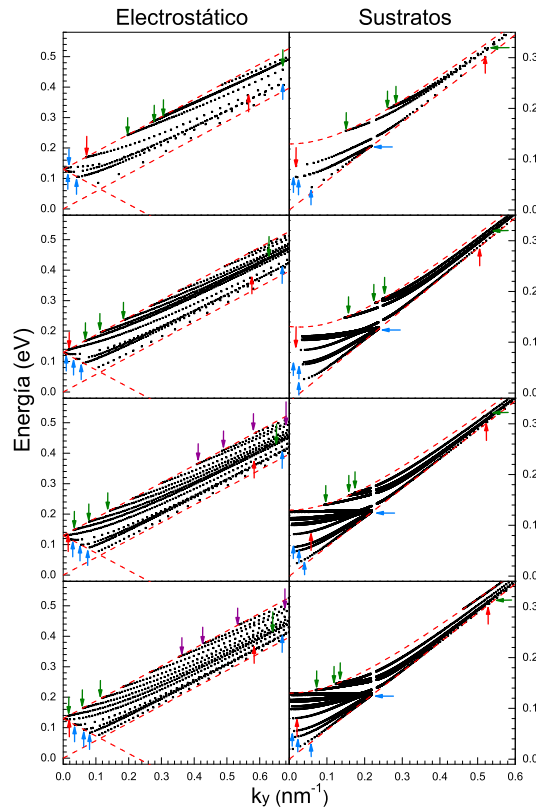


Fig. 5 Espectro de los estados acotados en función de k_y para el caso electrostático (columna izquierda) y el caso de sustratos (columna derecha). El primer, segundo, tercer y cuarto renglón representan la generación 3, 4, 5 y 6, respectivamente, el ancho de partida empleado es $w = 540a$. Las flechas en color azul, rojo, verde y morado indican la apertura y cierre de subbandas. Aquí las líneas punteadas en color rojo delimitan la región permitida para los estados acotados.

la generación anterior, solamente que la apertura de las curvas se encuentra desplazada hacia bajas energías, esto como resultado de la alta conductancia manifestada en la generación 6 en comparación con su generación precedente ($N=5$), ver Fig. 4.

Ahora es turno de analizar el sistema formado por barreras generadas por medio de sustratos de ruptura de simetría (columna derecha de la Fig. 5), de esta manera al considerar la generación $N = 3$ observamos claramente la apertura de tres subbandas por debajo de la energía correspondiente a la altura de la barrera, indicadas por flechas azules. Sin embargo, en este caso ocurre algo muy diferente al caso electrostático, es decir, aquí las subbandas aparte de unirse o agruparse en

tercias se ocluyen aproximadamente a la altura de la barrea, ésto como resultado del carácter evanescente en esta clase de sistemas. Después de estas tres subbandas aparece una subbanda que no se ocluye indicada por flechas rojas, seguido de esto, se observa una segunda región de agrupamiento de subbandas a tercias indicadas por flechas verdes, las cuales no se ocluyen en ningún momento sino que más bien tienden a degenerarse a medida que aumenta k_y . Para las generaciones 4, 5 y 6 sucede un comportamiento similar, con la única diferencia de que surgen y se desdoblan subbandas en la región comprendida entre la subbanda “central” (indicada por flechas rojas) y la segunda región de agrupamiento (indicadas por flechas verdes). Otra característica interesante y que llama la atención es la forma en que el espectro de estados acotados describe el comportamiento oscilatorio de la conductancia, en otras palabras, para las últimas tres generaciones (4, 5 y 6) el espectro de estados acotados presenta tres subbandas agrupadas por debajo de la altura de la barrea y otras tres subbandas por encima, y en la conductancia ocurre los mismo tres picos por debajo y por encima, ver Fig. 4.

Una observación importante y que vale la pena señalar se debe a la subbanda “central” indicada por las flechas en color rojo, la cual se manifiesta tanto en el caso electrostático como en el de sustratos (Fig. 5), la razón de este comportamiento es básicamente debido a la estructura central de cada generación, es decir, al pozo central de tamaño $w/3$ que está presente en todas las generaciones de nuestro sistema cuasirregular el conjunto prefractal Cantor Triádico.

En general, el espectro de los estados acotados describen de una manera cualitativa el comportamiento oscilatorio (picos) manifestado en las curvas de conductancia, asimismo, explican cuantitativamente la dinámica de apertura de subbandas en el caso electrostático y apertura-oclusión de las mismas en el caso de sustratos, por consiguiente, estas subbandas son las que determinan la localización y agudeza de los picos en las curvas de conductancia [33], resultando así un incremento o disminución en las propiedades de transporte medidas a través del sistema cuasirregular el conjunto prefractal Cantor Triádico.

4 Conclusiones

En el presente trabajo hemos estudiado las propiedades de transmisión, transporte y estructura de niveles en sistemas multicapas cuasirregulares basados en grafeno, en particular, en el conjunto prefractal Cantor Triádico. Asimismo, se efectuó un análisis comparativo entre dos clases de sistemas: el primer caso se refiere a la construcción de barreras de potencial creadas por medio de la aplicación de campo electrostático y el segundo caso, a barreras de potencial generadas a través de sustratos de ruptura de simetría. En ambos mecanismos las barreras están ordenadas de acuerdo a la secuencia de nuestro sistema cuasirregular en cuestión. Para poder llevar a cabo dicho estudio se recurrió a la implementación del método de la Matriz de Transferencia, ésto para el cálculo de propiedades de transmisión, mientras que para las propiedades de transporte se utilizó este último aunado al formalismo de Landauer-Büttiker.

Dentro de las propiedades de transmisión se calculó en primera instancia la transmitancia en función de la energía resultando que en el caso electrostático se manifiesta claramente el efecto Klein independientemente de la generación y ancho de partida seleccionados, mostrando además una asimetría en el espectro de transmitancia con respecto al eje de la energía. Por otro lado, en el caso de sustratos los patrones de transmitancia son vulnerables al número de la generación, ancho de partida y ángulo de incidencia. Además, es importante mencionar que esta clase de estructuras carece del tunelamiento Klein, no obstante, los patrones presentan en efecto una simetría con respecto al eje de la energía, ésto como consecuencia directa de la formación de barreras para electrones y huecos. Una característica en común entre ambos sistemas, es la aparición de rasgos autosimilares para ciertos parámetros fundamentales.

En la misma perspectiva, propiedades de transmisión, se computó la transmitancia en función del ángulo de incidencia o también conocida usualmente como la distribución angular de la transmitancia para energías fijas para ambos sistemas, electrostático y sustratos. Resultando una vez más el efecto Klein para el caso electrostático junto con el efecto de colimación, a diferencia del caso de sustratos donde no se manifiesta ninguno de estos dos efectos. Entre las similitudes en ambos casos, destaca la simetría con respecto al ángulo de inciden-

cia y las características fractales presentes en las curvas, es decir, la autosimilaridad que se hace más notoria en generaciones altas (4 y 5).

Asimismo, se determinaron las curvas de contornos de manera tal que corroboran con lo citado anteriormente, esto es, efecto Klein en barreras electrostáticas y ausencia de éste en barreras generadas mediante sustratos. Además, muestran claramente y reafirman la asimetría (electrostático) y simetría (sustratos) de las curvas de transmitancia. Una peculiaridad sobresaliente en el caso electrostático es el paso de patrones asimétricos a simétricos, lo cual ocurre cuando se incrementa la generación, que en el caso de sustratos tiene efecto la disminución del ancho de las ventanas de transmisión.

Con respecto a las propiedades de transporte, se calcularon las curvas de conductancia manifestando una asimetría y simetría para el caso electrostático y el de sustratos, respectivamente. En el caso electrostático, tanto las curvas como las oscilaciones o picos se vuelven más suaves cada vez que se incrementa la generación, resultando un comportamiento casi lineal a altas generaciones (5 y 6). Por el contrario, en lo referente al caso de sustratos las curvas de conductancia manifiestan un comportamiento (oscilaciones) bien definido o en otras palabras exhiben características autosimilares, lo cual significa que las curvas son semejantes (igual número de picos) a diferente escala. Finalmente, para comprender la naturaleza oscilatoria de las curvas de conductancia se computó el espectro de los estados acotados correspondientes a las curvas de conductancia, mostrando una peculiaridad que es necesario hacer hincapié. Ésto se refiere al agrupamiento en tercias de subbandas que enseguida tienden a unirse (degenerarse) en el caso electrostático y en el caso de sustratos adicionalmente se ocuyen.

En general, hemos corroborado que las propiedades geométricas ligadas al sistema cuasirregular, el conjunto prefractal Cantor Triádico, se manifiestan en las propiedades físicas, es decir, tanto en las propiedades de transmisión como en las propiedades de transporte. Adicionalmente, el espectro de los estados acotados se ve afectado por el un tercio involucrado en las estructuras de cada generación reflejándose de alguna manera en el agrupamiento a tercias de subbandas, las cuales corresponden a las oscilaciones presentes en las curvas de conductancia.

Agradecimientos Los autores agradecen el apoyo por parte del CONACYT a través del proyecto CB-2010-151713.

Bibliografía

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov. *Electric field effect in atomically thin carbon films*, Science 306, 666-669 (2004).
2. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*, Nature 438, 197-200 (2005).
3. Y. Zhang, Y. -W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*, Nature 438, 201-204 (2005).
4. V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. *Unconventional integer quantum Hall effect in graphene*, Phys. Rev. Lett. 95, 146801 (2005).
5. E. McCann and V. I. Falko. *Landau-level degeneracy and quantum Hall effect in graphite bilayer*, Phys. Rev. Lett. 96, 086805 (2006).
6. N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto. *Electronic properties of disordered two-dimensional carbon*, Phys. Rev. B 73, 125411 (2006).
7. A. Calogeracos and N. Dombey. *History and physics of Klein paradox*, Contemp. Phys. 40, 313-321 (1999).
8. C. Itzykson and J.-B. Zuber. *Quantum Field Theory*, (Dover, New York, 2006).
9. M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov and A. K. Geim. *Chiral tunneling and the Klein paradox in graphene*, Nat. Phys. 2, 620-625 (2006).
10. A. H. Castro Neto, F. Guinea, and N. M. R. Peres. *Drawing conclusions from graphene*, Phys. World 19, 33-37 (2006).
11. M. I. Katsnelson. *Zitterbewegung, chirality, and minimal conductivity in graphene*, Eur. J. Phys. B 51, 157-160 (2006).
12. M. I. Katsnelson, M. I., and K. S. Novoselov. *Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics*, Solid State Commun. 143, 3-13 (2007).
13. F. Schedin, A. K. Geim, S. V. Morozov, E. W. Hill, P. Blake, M. I. Katsnelson, and K. S. Novoselov. *Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene*, Nature Mater. 6, 652-655 (2007).

14. A. K. Geim, and K. S. Novoselov. *The rise of graphene*, Nature Mater. 6, 183-191 (2007).
15. E. W. Hill, A. K. Geim, K. Novoselov, F. Schedin, and P. Blake. *Graphene spin valve devices*, IEEE Trans. Magn. 42, 2694-2696 (2006).
16. M. Ohishi, M. Shiraishi, R. Nouchi, T. Nozaki, T. Shinjo, and Y. Suzuki. *Spin injection into a graphene thin film at room temperature*, Jpn. J. Appl. Phys. Part 2 46, L605-L607 (2007).
17. P. E. Allain and J. N. Fuchs. *Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons*, Eur. Phys. J. B 83, 301-317 (2011).
18. E. Maciá. *The role of aperiodic order in science and technology*, Rep. Prog. Phys. 69, 397-441 (2006).
19. R. Pérez-Álvarez, F. García-Moliner and V. R. Velasco. *Some elementary questions in the theory of quasiperiodic heterostructures*, J. Phys. Condens. Matter 13, 3689-3698 (2001).
20. L. Sun, C. Fang, Y. Song and Y. Guo. *Transport properties through graphene-based fractal and periodic barriers*, J. Phys.: Condens. Matter 22, 445303 (2010).
21. S. H. R. Sena, J. M. Pereira Jr., G. A. Farias, M. S. Vasconcelos and E. L. Albuquerque. *Fractal spectrum of charge carriers in quasiperiodic graphene structures*, J. Phys.: Condens. Matter 22, 465305 (2010).
22. S. Mukhopadhyay, R. Biswas and C. Shina. *Resonant tunneling in a Fibonacci bilayer graphene superlattice*, Phys. Status Solidi B 247, 342-346 (2010).
23. P. Zhao, and X. Chen. *Electronic band gap and transport in Fibonacci quasi-periodic graphene superlattice*, Appl. Phys. Lett. 99, 182108 (2011).
24. Y. Zhang, Y. Gao and H. Zhang. *Independent modulation of defect modes in fractal potential patterned graphene superlattices with multiple defect layers*, J. Phys. D: Appl. Phys. 45, 055101 (2012).
25. T. Ma, C. Liang, L. Wang and H. Q. Lin. *Electronic band gaps and transport in aperiodic graphene superlattices of Thue-Morse sequence*, Appl. Phys. Lett. 100, 252402 (2012).
26. Z. Zhang, H. Li, Z. Gong, Y. Fan, T. Zhang and H. Chen. *Extend the omnidirectional electronic gap of Thue-Morse aperiodic gapped graphene superlattices*, Appl. Phys. Lett. 101, 252104 (2012).

27. H. Huang, D. Liu, H. Zhang and X. Kong. *Electronic transport and shot noise in Thue-Morse sequence graphene superlattice*, J. Appl. Phys. 113, 043702 (2013).
28. Y. Xu, J. Zou and G. Jin. *Exotic electronic properties in Thue-Morse graphene superlattices*, J. Phys.: Condens. Matter 25, 245301 (2013).
29. X. Chen, P. Zhao and Q. Zhu. *Double-periodic quasi-periodic graphene superlattice: non-Bragg band gap and electronic transport*, J. Phys. D: Appl. Phys. 46, 015306 (2013).
30. P. Yeh. *Optical Waves in Layered Media*, (Wiley-Interscience, Hoboken, 2005).
31. P. Markos, and C. M. Soukoulis. *Wave Propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*, (Princeton University Press, Princeton 2008).
32. S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*, (Cambridge University Press, Cambridge 1995).
33. I. Rodríguez-Vargas, J. Madrigal-Melchor and O. Oubram. *Resonant tunneling through double graphene systems: A comparative study of Klein and non-Klein tunneling structures*, J. Appl. Phys. 112, 073711 (2012).

Acoustic transmittance of a multilayer system with a Lorentzian modulation of impedances

J. J. Rodríguez Pérez, R. A. Reyes Villagrana, A. Enciso Muñoz, and D. A. Contreras-Solorio

Resumen

Using the transfer matrix method we calculate the frequency dependence of the transmission of longitudinal elastic waves for a layered structure where the characteristic acoustic impedance of the layers with odd numbering follows a Lorentzian distribution. The central layer has the highest value of impedance while the end layers have the smallest ones. The inserted even layers have the same impedance as the incident medium, which is water. The structure presents intervals of stopbands and flat passbands. We compare the transmission with that of a regular structure where all the layers with odd numbering have the same value of impedance.

1 Introduction

Since many decades ago, the search for energy, electronic, optical and acoustic filters is an active field. In particular, there are proposals of energy band-pass filters using quantum superlattices with a Gaussian potential profile [1,2]. These structures allow the incident electrons to be nearly totally transmitted when the impinging electron energy is in the passband. Also, a complete reflection occurs when the impinging energy is in the stopband. The characteristics of the bands can be adjusted modifying the parameters of the superlattice and of the Gaussian distribution. On the other hand, following the preceding idea, there is also a proposal of a multilayer optical structure where the refractive index varies according to the envelope of a Gaussian function

Unidad Académica de Física de la Universidad Autónoma de Zacatecas. Apartado Postal C-580, 98060 Zacatecas, Zac., Mexico. e-mail: D. A. C. S.: dacs10@yahoo.com.mx

[3]. This structure acts as an omnidirectional mirror. For sound, the characteristic acoustic impedance is one of the main acoustical properties of a material. The difference of the impedance values between two media, causes reflection at the interface. Formerly a multilayer structure with Gaussian variation of the acoustic impedance was studied [4] and also a multilayer system with a linear modulation of the impedances [5]. In this work we propose a multilayer acoustic structure where the impedance values of the layers with odd numbering has a lorentzian profile. The central layer has the maximum value of impedance and the end layers have the minimum value. The acoustic impedance of the inserted layers with even number is the same as that of the incident medium. This type of variation provides a smoothly varying impedance for the layers, which can improve the transmission of the structure. We make a theoretical study of the frequency dependence of the transmittance for this structure following a formalism of transfer matrix used for electromagnetic waves, which we have adapted to acoustic waves [6]. We obtain stopbands with 100% reflectivity and flat passbands. We also calculate the transmission for a regular structure where all the layers with odd numbering have the same value of impedance. This type of structures can be constructed experimentally using layers with composite materials where the acoustic impedance can be tailored by varying the volume fractions of the components in the composite [7,8]. Another possible way to construct these structures is by using layers of porous silicon. This material has been widely used for the fabrication of optical devices, including optical filters where the refractive index can be varied through a variation of the porosity [3]. There are also studies of the variation of acoustical properties, including the acoustical impedance, due to the variation of the porosity [9,10]. Recently, acoustic multilayer mirrors have been made using porous silicon [11].

2 Theoretical model and calculation method

To calculate the transmittance, we use the theory of Refs.[11][12][13]. We consider a structure of N plane multilayers. The layers are perpendicular to the x axis. Each j layer has a width d_j and characteristic impedance Z_j given by

$$Z_j = \rho_j c_j \quad (1)$$

Where ρ_j and c_j are, respectively, the density and the sound speed for the j material. We consider longitudinal elastic plane waves propagating in the $x - z$ plane, coming from the left in a medium with impedance Z_0 . The plane wave is incident on the structure of N plane multilayers. At the right side of the structure, the wave propagates in a medium S with impedance Z_s . We can write the wave function for each layer in the following form

$$P_j = A_j e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r} - \omega t)} + B_j e^{i(\mathbf{k}'_j \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (2)$$

P_j represents the propagating pressure perturbation. The first and the second terms on the right-hand side of Eq. (2) represent propagation to the right and to the left, respectively, i.e. the forward and the backward waves. The index $j = 0$ represents the medium at the left side of the structure with impedance Z_0 . In the medium S with $j = N + 1$ we consider only propagation to the right, consequently $B_s = 0$. k_j y k'_j are the forward and backward wavevectors for medium j , t is the time, ω the angular frequency, and i the imaginary unit. A solid can support both longitudinal and transverse elastic waves, and a fluid only transmits elastic longitudinal waves. If a longitudinal wave in a fluid is incident obliquely on the interface with a solid, both type of waves can be transmitted in the solid. However, at normal incidence, the character of the longitudinal wave is preserved, without generation of transverse waves in the solid. Then, for oblique incidence, our theory is valid only for fluid layers. If the wave is incident at an angle θ_0 with the normal to the structure, the Law of Snell gives

$$\frac{1}{c_0} \sin \theta_0 = \frac{1}{c_1} \sin \theta_1 = \dots = \frac{1}{c_j} \sin \theta_j = \dots = \frac{1}{c_N} \sin \theta_N = \frac{1}{c_s} \sin \theta_s \quad (3)$$

The wave propagation from medium 0 to medium S through the multilayer structure is described by

$$\begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_s \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Where the (2×2) transfer matrix is given by

$$\begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = D_0^{-1} \left[\prod_{j=1}^N D_j P_j D_j^{-1} \right] D_S \quad (5)$$

The matrix D_j is called the dynamical or transmission matrix, and arises from the continuity conditions on the pressure and the displacement normal to the interface between media $j-1$ and j . The matrix P_j is the kinematical or propagation matrix inside the j layer. If it is supposed that the media are lossless, the matrices are given by

$$D_j = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{\cos \theta_j}{Z_j} & -\frac{\cos \theta_j}{Z_j} \end{bmatrix}, \quad P_j = \begin{bmatrix} e^{ik_j d_j \cos \theta} & 0 \\ 0 & e^{-ik_j d_j \cos \theta} \end{bmatrix} \quad (6)$$

We define the transmittance T as the transmitted power by the waves through the structure, normal to the structure, divided by the power of the incident waves, normal to the structure. It is given in terms of the transfer matrix by

$$T = \left| \frac{\langle V_t \rangle \cdot \hat{n}}{\langle V_i \rangle \cdot \hat{n}} \right| \quad (7)$$

Where V_t is the vector of transmitted power, V_i the vector of incident power, and \hat{n} the unit vector normal to the structure. The angle brackets denote average over time. V is similar to the Poynting vector in electromagnetism. Its temporal average is given by [14]

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} \frac{A^2}{Z} \hat{u} \quad (8)$$

Here, A is the amplitude of the pressure wave and \hat{u} the unit vector in the direction of propagation of the wave.

The transmittance T , in terms of the transfer matrix, is given by

$$T = \frac{Z_0 \cos \theta_s}{Z_s \cos \theta_0} \left| \frac{1}{M_{11}} \right| \quad (9)$$

The reflectance R is given by

$$R = T - 1 \quad (10)$$

The acoustic impedance for the layers with odd numbering is modulated by the Lorentz distribution

$$Z = Z_{max} \left[\frac{\gamma^2}{x^2 + \gamma^2} \right] \quad (11)$$

Where γ is the half-width at half-maximum (HWHM) of the curve.

3 Results

We consider that the structure is situated in water, with $Z = 1.5$ MRayl and $c = 1480$ m/s. For the layers with odd numbering we make a Lorentzian variation of the impedance values, following Eq. 11. The impedance profile of the structure is shown schematically in Fig. 1. We consider that the maximum value of the impedance is $Z_{max} = 3.5$ MRayl and the minimum value is $Z_{min} = 1.6$ MRayl. The central layer has the maximum value and the layers at the ends have the minimum value. The other odd layers have corresponding values between the maximum and the minimum impedances, corresponding to a Lorentzian profile. The layers with even numbering consist also of water.

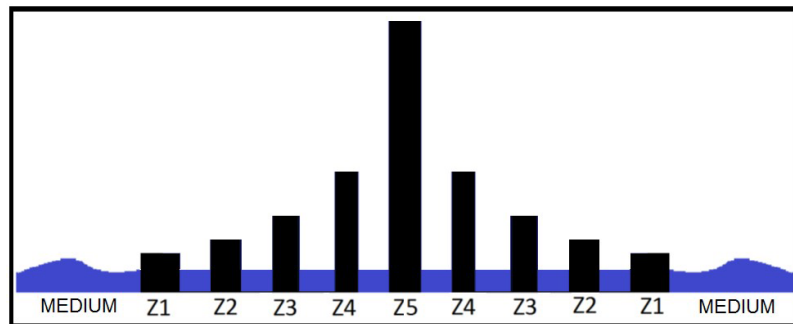


Fig. 1 Schematic impedance profile of the structure.

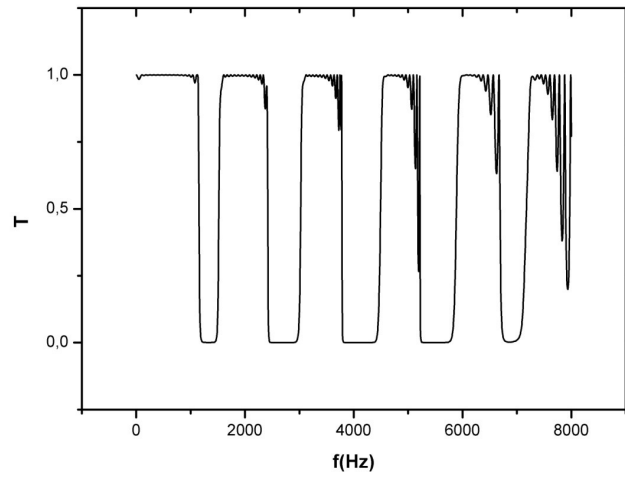


Fig. 2 Transmission for a structure of 33 layers, 17 odd layers with Lorentzian variation of impedance, $Z_{max} = 3.5$ MRayl for central layer, $Z_{min} = 1.6$ MRayl for end layers. Odd layers have 0.15 m thick, even layers of water have 0.45 m thick.

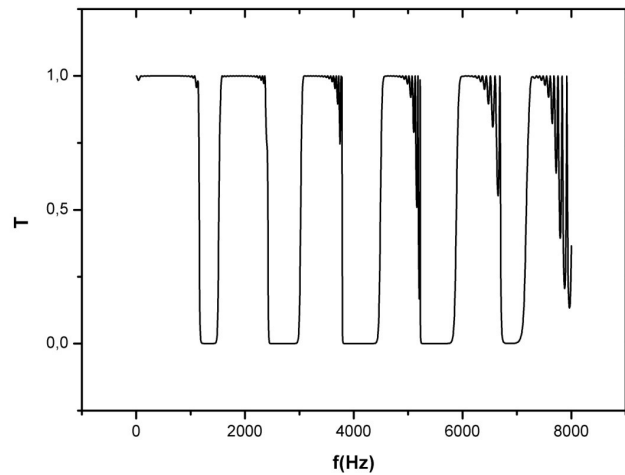


Fig. 3 Transmission for a structure of 41 layers, 21 layers with Lorentzian variation of impedance. Odd layers have 0.15 m thick, even layers of water have 0.45 m thick.

For the calculations, it is necessary to know for each value of Z , the corresponding value of the sound velocity c in order to calculate the matrix P . For that purpose, for the interval of impedances from 0.7 to 1.6 MRayl, we make an average of the density and the velocity

of sound for several liquids. For the interval of impedances from 1.6 to 2.5 MRayl we make the average of densities and sound velocities for plastics, and for the interval of impedances from 2.5 to 4.5 MRayl the average is made for solids. For each interval we construct a linear relationship between the density and the velocity of sound and find the proportionality constant. Finally we make an average of the three constants. We use the connection between the density and the sound velocity to obtain the relationships

$$\rho = 0.52, \quad Z = \rho c, \quad c = \sqrt{\frac{Z}{0.52}} \quad (12)$$

The values for the impedances, densities and sound velocities were obtained from Ref.[14]. The spectrum of allowed frequencies for the acoustical multilayer structure consists of quasi-bands of discrete values of eigenfrequencies or passbands, separated by gaps or stopbands, where there is no transmission of sound. In Fig. 2 we present the frequency dependence of the transmission T for normal incidence of the longitudinal waves for a structure of 33 layers, where 17 have Lorentzian variation of impedances. The layers thickness with variable impedance is 0.15 m and the layers of water in between have a thickness of 0.45 m. We observe several stopbands and passbands. The flatness of the passbands is conspicuous. Fig. 3 shows the transmission for 41 layers, with the same layers thicknesses as the preceding figure.

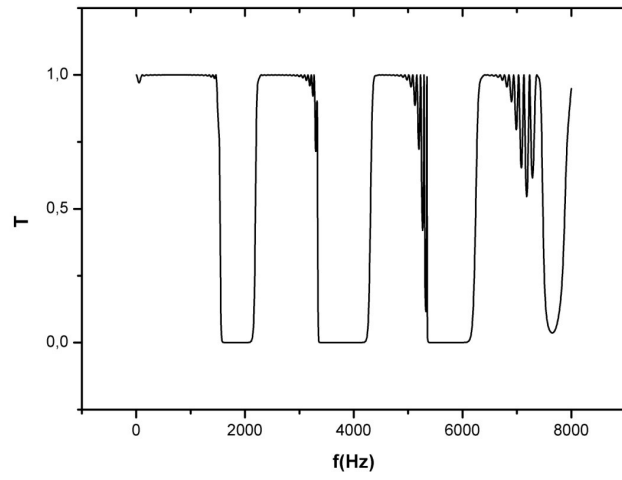


Fig. 4 Transmission for a structure of 45 layers. Layers with Lorentzian variation of impedance have 0.15 m thick, layers of water have 0.30 m of thickness.

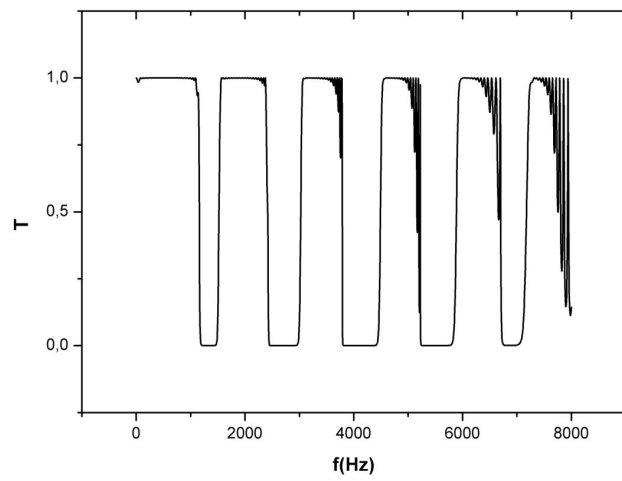


Fig. 5 Transmission for a structure of 45 layers. Layers with Lorentzian variation of impedance have 0.15 m thick, layers of water have 0.45 m thick.

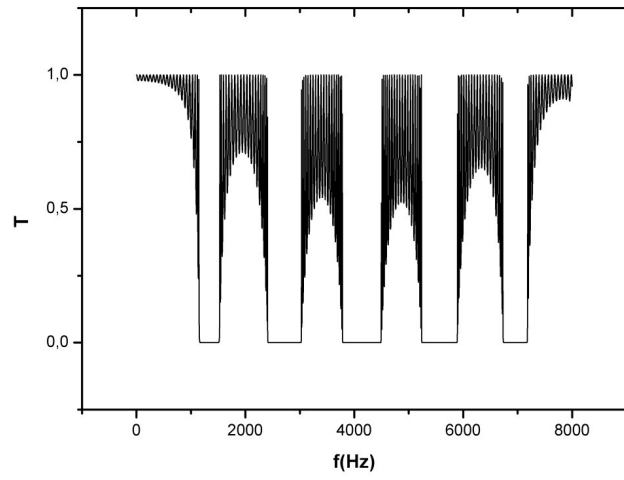


Fig. 6 Transmission for a regular structure of 41 layers. The odd 21 layers have the same value of impedance, $Z = 3.5$ MRayl. Odd layers have 0.15 m thick, even layers of water have 0.45 m thick.

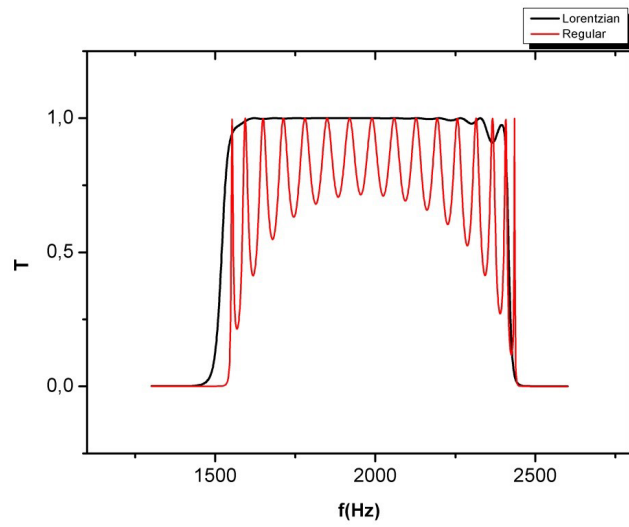


Fig. 7 Comparison of the first passband of the linear structure of Fig. 3 (in black) with that produced by a regular structure.

The Fig. 4 presents the transmission for 45 layers where the layers with Lorentzian variation have a thickness of 0.15 nm and the water layers have 0.30 nm. Fig. 5 also shows the transmission for 45 layers with the same thickness for the Lorentzian layers as the preceding figure and the water layers have a thickness of 0.45 nm. In Fig. 6 we make a comparison of the transmission for the second band of Fig. 2 to the transmission obtained for a regular structure where all the layers with odd numbering have the same value of impedance, $Z_{max} = 3.5 \text{ MRayl}$. For the regular structure, the thicknesses for the odd layers and that of the water layers are the same as for those of the Fig. 2. The regular structure has also well defined stopbands but it does not have flat passbands. The transmission in the passbands for the structure with regular profile is poorer due to the more abrupt change of impedances. The oscillations in the passbands correspond to the eigenfrequencies of the structure and are more prominent in the regular structure than that of the other structure with Lorentzian variable impedance

4 Conclusions

Using a method of transfer matrix, we have made studies in order to propose a layered structure where the characteristic impedance of the layers with odd numbers follows a Lorentzian profile of values and the inserted layers with even number have a constant value of acoustic impedance. Flat transmission bands and reflection bands are obtained by properly choosing the structure parameters. When a longitudinal plane wave of sound is incident on the layered structure, has very high transmittance if the frequency lies in a passband and completely reflected if the frequency lies in a stopband. This kind of structure can have potential applications, such as acoustic mirrors and filters allowing selected intervals of frequencies to pass through.

ACKNOWLEDGEMENTS

This work has been supported partially by Universidad Autónoma de Zacatecas and Consejo Zacatecano de Ciencia y Tecnología (COZ-CyT).

References

1. H. H. Tung and C. P. Lee. *An energy band-pass filter using superlattice structures*, IEEE J. Quantum Electron. 32, 507-512 (1996).
2. I. Gómez, F. Domínguez-Adame, E. Diez and V. Bellani. *Electron transport across a Gaussian superlattice*, J. Appl. Phys. 85(7), 3916-3918 (1999).
3. J. Arriaga and X. Saldaña, *Band structure and reflectivity of omnidirectional Si-based mirrors with a Gaussian profile refractive index*, J. Appl. Phys. 100, 044911 (2006).
4. J. Madrigal-Melchor, R. A. Reyes Villagrana, X. Saldaa, S. Jelev-Vlaev and D. A. Contreras-Solorio, *Acoustic layered filter with a Gaussian distribution of impedances*, SLAFES Book of Abstracts Iguaz, Argentina (2008).
5. J. Rodríguez Prez, R. A. Reyes Villagrana, A. Enciso Muoz, and D. A. Contreras-Solorio, *Acoustic transmittance of a multilayer system with a linear variation of impedances, Some current topics in condensed matter physics. Eds: M. E. Mora-Ramos, R. Pérez-Álvarez, L. M. Gaggero-Sager*, 19-28 (Autonomous University of the State of Morelos, 2012).
6. P. Yeh, *Optical waves in layered media*, (Wiley, New York, 1988).
7. K. K. Shung and M. Zipparo. *Ultrasonic transducers and arrays*, IEEE Eng. Med. Biol. Mag. 6, 20 (1996).
8. R. Zhang, W. Cao, Q. Zhou, JH Cha, KK Shung and Y Huang. *Acoustic properties of alumina colloidal/polymer nano-composite film on silicon*, IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr. 54, 467 (2002).
9. A. D. Y. Boumaiza, Z. Hadjoub and L. Deboub. *Porosity effects on different measured acoustic parameters of porous silicon*, J. Mat. Sci. Letts. 18, 295 (1999).
10. M. D. A. Doghmane, I. Hadjoub and Z. Hadjoub. *Prediction of elastic parameters of photoluminescent porous Si*, ICTON-MW, 1 (2007).
11. A. Reinhardt and P. A. Snow. *Theoretical study of acoustic band-gap structures made of porous silicon*, Phys. Stat. Sol. A 204, 1528 (2007).
12. W. C. Elmore and M. A. Heald. *Physics of waves*, (Dover, New York, 1985).
13. L. M. Brekhovskikh. *Waves in layered media*, (Academic Press, New York, 1960).
14. www.ondacorp.com consulted December 15, 2012.

Index

- óxido de silicio, 132
- índice de refracción, 133
- índice de refracción, 157, 184
- óptica no lineal, 181

- absorbance, 213
- absorción no lineal, 183
- acoplamiento espín-órbita, 69
- acoplamiento Rashba, 67
- acoustic impedance, 282
- acoustic transmittance, 281
- aproximación de la función envolvente, 4
- aproximación de masa efectiva, 3
- aproximación del cristal virtual, 20
- aproximación de masa efectiva, 175
- aproximación de Thomas-Fermi, 179
- autosimilaridad, 258

- banda prohibida fotónica, 151
- barreras electrostáticas, 235
- biaxial strain, 50
- biosensor, 156
- biosensores ópticos, 160
- Bragg reflector, 51

- cálculo autoconsistente, 185
- cambio relativo del índice de refracción, 173
- Cantor, 234, 257
- coeficiente de absorción, 183
- coeficiente de absorción óptica, 173
- coeficiente de reflexión, 16
- coeficiente de transmisión, 16
- compressive strain, 51
- conductancia, 112, 258
- conduction band, 56
- conjunto prefractal, 269
- cristal fotónico, 129

- cristal fotónico, 148
- criticalidad, 233, 261

- delta-doped system, 174
- density of states, 56
- dispositivos espintrónicos, 69
- dispositivos fotónicos, 155
- dopaje modulado, 77
- dopamiento tipo delta, 175

- ecuación de Dirac, 236
- ecuación de Von Neumann, 183
- efecto Klein, 229, 258
- efecto Rashba, 71
- elastic wave, 281
- emission rate, 54
- energía de Fermi, 235
- espín, 68
- espectros de reflectancia, 164
- espejo blanco, 141
- espejo dieléctrico, 149
- espejo omnidireccional, 135
- espejos de Bragg, 154
- Espintrónica, 68
- estructura de bandas, 81
- estructura de multicapas, 161
- estructura electrónica, 181
- estructuras aperiódicas, 233
- estructuras fotónicas, 152
- extinction coefficient, 215

- fractalidad, 233
- función de onda, 181

- generalized Snell's law, 213
- grafeno, 229, 257

- heteroestructura, 176
- heteroestructura, 2
- heteroestructura híbrida, 162
- heteroestructura semiconductor, 67
- huecos pesados, 67
- layered structure, 281
- método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, 3
- magnetorresistencia gigante, 68
- masa efectiva, 79
- matriz de transferencia, 7, 109, 132, 164, 238, 262
- matriz densidad, 183
- metamaterials, 216
- microcavidades ópticas, 154
- modelo de Kohn-Luttinger, 80
- modelo de Pidgeon-Brown, 76
- multilayer, 213, 281
- omnidireccionalidad, 157
- omnidireccionalidad reflectiva, 130
- onda plana, 133
- optical absorption, 213
- optical absorption coefficient, 174
- optical reflectivity, 127
- oscilaciones de Shubnikov-de Haas, 71
- particionamiento de Löwdin, 76
- passband, 281
- perfil de potencial, 23
- Periodo Doble, 234
- photon-recycling, 58
- polarización eléctrica, 182
- potencial electrostático, 177
- pozo cuántico, 173
- pozo delta-dopado, 176
- problema de Dirichlet, 40
- problema de Neumann, 40
- quantum efficiency, 61
- quantum well, 52, 174
- radiative recombination, 51
- reflectance, 213
- reflectancia, 128
- refractive index, 214
- relative refractive index change, 174
- respuesta óptica autosimilar, 157
- secuencia de Fibonacci, 229
- silicio poroso, 129, 151
- sistemas cuasirregulares, 229, 257
- stopband, 281
- subbanda de huecos, 75
- susceptibilidad dieléctrica, 182
- superlattice, 281
- Thue-Morse, 234
- transfer matrix, 213, 281
- transición intersubbanda, 181
- transmisión, 229
- transmitancia, 241, 257
- transmittance, 213