



Universidad Autónoma de Zacatecas

"Francisco García Salinas"

Unidad Académica de Física



---

**Propiedades ópticas lineales y no lineales en pozos cuánticos dobles  
con alturas de barreras asimétricas en sistemas AlGaN/GaN  
zincblenda**

**T E S I S**

Que para obtener el grado de  
**DOCTOR EN CIENCIAS BÁSICAS**  
(Orientación en Física)

PRESENTA

**M. en C. Flavio Manuel Nava Maldonado**

DIRECTORES DE TESIS

**Dr. Juan Carlos Martínez Orozco**

**Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos**

Zacatecas, México

Noviembre de 2019



Después de una larga travesía y de momentos desafortunados y difíciles he llegado al final de una nueva etapa en mi vida, la cual ha sido muy significativa y que culmina con la escritura y defensa de este pequeño pero muy importante trabajo. Este logro no hubiera sido alcanzado sin la mayor motivación que son mis hijos Sara Elia y Flavio Manuel.

Ahora quiero agradecer principalmente todo el apoyo brindado por mi familia, que de no ser por ellos no habría podido ser esto posible.

No puedo dejar de agradecer el apoyo y confianza incondicional hacia mi persona del Dr. Juan Carlos Martínez Orozco quien ha sido mi asesor en este proyecto.

Doy mi más sincero agradecimiento al Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos por todo su conocimiento que me ha compartido, además de la paciencia que ha mostrado hacia mi persona. **Finalmente me gustaría agradecer la discusiones y apoyo del Dr. José Guadalupe Rojas briseño tanto en la parte numérica como en las discusiones de los resultados.**

## Agradecimientos

Quiero agradecer a la Universidad Autónoma de Zacatecas por brindarme la oportunidad de realizar estudios de Doctorado en Ciencias Básicas que es uno de sus programas PNPB con número de registro 003911, en particular a la Unidad Académica de Física por las facilidades para realizar mi proyecto de tesis doctoral con orientación en física. Agradezco también al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por el soporte económico parcial a través de su Programa de becas nacionales con número **248979**, al Consejo Zacatecano de Ciencia y Tecnología (COZCyT) por los apoyos a distintos congresos.

Este trabajo de tesis doctoral forma parte del proyecto con número A1-S-8842 titulado *Estudio de propiedades optoelectrónicas básicas en pozos, puntos y anillos cuánticos de materiales III-V y II-VI y sus heteroestructuras* que es financiado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) a través del *Fondo sectorial de investigación para la educación* en su convocatoria de investigación Científica Básica 2017-2018.

# Resumen

En esta investigación doctoral realizamos el cálculo del coeficiente de absorción y del cambio relativo del índice de refracción lineal y su corrección no lineal, debida al efecto de láser intenso, para un pozo cuántico doble con asimetría en las barreras. El pozo cuántico doble asimétrico está formado por Nitruro de Galio en fase cúbica (c-GaN) en la región de los pozos y por Nitruro de Galio Aluminio, también en su fase cubica, en las barreras con una concentración de aluminio  $c\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Esta heteroestructura, por la diferencia en sus constantes de red, se encuentra tensionada, así que en este trabajo presentamos un estudio comparativo de las propiedades ópticas de interés con el fin de determinar la importancia de la tensión en el sistema, lo cual se hizo al implementar la Teoría del Sólido Modelo de Van der Walle. La estructura electrónica, una vez considerado el efecto de la tensión en la altura de las barreras, se hace mediante el método de diagonalización usando como base de la expansión la solución al pozo rectangular de barreras infinitas de ancho  $L$ , bajo la aproximación de masa efectiva y banda parabólica. Las propiedades ópticas se calculan con expresiones bien establecidas en la literatura que se obtienen mediante el formalismo de la matriz densidad compacta.



# Abstract

In this doctoral research thesis we perform the calculation of the absorption coefficient and the relative refractive index change for the linear and its non-linear correction, due to the intense laser effect, for a double quantum well with asymmetry in the barriers. The asymmetric double quantum well is formed by cubic-phase Gallium Nitride (c-GaN) in the wells regions and by Gallium Aluminum Nitride, also in its cubic-phase, in the barriers with an aluminum concentration  $c\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . This heterostructure, due to the difference in its lattice constants, is strained, so in this work we present a comparative study of the optical properties of interest in order to determine the importance of the strain in the system, this was done when implementing the Van der Walle's Model-Solid Theory. The electronic structure, once considered the effect of the strain on the height of the barriers, is done by means of the diagonalization method, using the solution for a rectangular well of infinite barriers of width  $L$  as the base of the expansion, all the computation was performed under the approximation of effective mass and parabolic band. The optical properties are calculated with well-established expressions in the literature in the frame of the formalism of the compact density-matrix.



# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>iv</b>
<b>Resumen</b>	<b>v</b>
<b>Abstract</b>	<b>vii</b>
<b>Lista de figuras</b>	<b>x</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Estado del Arte . . . . .	1
1.2. Justificación y motivación . . . . .	11
1.3. Organización de documento . . . . .	11
<b>2. Marco teórico</b>	<b>13</b>
2.1. Generalidades . . . . .	13
2.2. Estructura cristalina del sistema de estudio . . . . .	15
2.3. Teoría de Bandas . . . . .	17
2.4. Aproximación de Masa efectiva . . . . .	18
2.5. Ecuación unidimensional de masa efectiva . . . . .	19
2.6. Heterouniones . . . . .	23

2.7. Heteroestructuras . . . . .	24
2.8. Alineamiento de las bandas de energía . . . . .	27
2.9. Ley de Vegard y parámetro de Bowing . . . . .	29
2.10. Efecto de la tensión: Cálculo del <i>band offset</i> . . . . .	29
2.11. Propiedades ópticas . . . . .	35
<b>3. Resultados</b>	<b>39</b>
3.1. Generalidades . . . . .	40
3.2. Cálculo de estructura electrónica . . . . .	42
3.3. Cálculo de propiedades ópticas . . . . .	45
<b>4. Conclusiones y recomendaciones</b>	<b>61</b>

# Índice de figuras

1.1. Relación entre anchos de banda prohibida ( <i>Bandgap energy</i> (eV)) y la constante de red ( <i>Lattice constant</i> , $a$ (Å)) de una cantidad importante de los semiconductores conocidos. En esta figura se pueden encontrar semiconductores tan emblemáticos como el GaAs o el Si, pero en particular se encuentra también el GaN en sus dos fases, que es en el que se centra la presente tesis doctoral. . . . .	2
1.2. Representación gráfica las constantes de red ( <i>Lattice constant</i> ( Å )) y de los anchos de banda prohibida ( <i>Bandgap energy</i> (eV)), así como de los principales sustratos utilizados para crecer las heteroestructuras basadas en nitruros para las estructuras wurtzita (negro) y zinc blenda (azul). En esta se observa, que en función del semiconductor, se tienen sistemas que van desde el ultravioleta hasta el infrarrojo pasando por el espectro visible. . . . .	4
1.3. Celdas unitarias del GaN en sus fases: (a) wurzita (hexagonal) y (b) zincblenda (cúbica). En el caso del $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ alguno porcentaje de los átomos de Ga (grises) son sustituidos por un cierto porcentaje de aluminio dado por $x$ . . . . .	5
1.4. Diagrama esquemático de un sistema de crecimiento para materiales semiconductores por la técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE Por sus siglas en inglés) [1]. . . . .	8

2.1. Red de Bravais cúbica centrada en las caras. Se especifica el símbolo de la constante de red $A_0$ . . . . .	16
2.2. Energía <i>vs</i> curva del vector de onda para un electrón en la banda de conducción y un hueco en la banda de valencia de un semiconductor de gap directo. . . . .	17
2.3. Gráfica de la energía contra el vector de onda de un electrón en GaAs y el electrón en el vacío. . . . .	19
2.4. Dos materiales diferentes con diferente banda prohibida (Band gap) unidas para formar una heterounion, las curvas representan el movimiento paralelo irrestricto a la interfase. . . . .	23
2.5. Potencial $V(z)$ unidimensional en las bandas de conducción y de valencia para un pozo cuántico simple típico (izquierda) y un pozo cuántico de escalón (derecha). . . . .	24
2.6. Potencial unidimensional $V(z)$ en la banda de conducción y de valencia para un pozo cuántico simétrico y otro asimétrico. . . . .	25
2.7. Potencial unidimensional $V(z)$ en la banda de conducción y de valencia para el típico pozo cuántico múltiple o superred. . . . .	26
2.8. Potencial unidimensional $V(z)$ en la banda de conducción y de valencia para un pozo cuántico tipo I comparado con un sistema tipo II. . . . .	27
2.9. Bordes de las bandas entre dos materiales $A$ y $B$ . . . . .	28
2.10. Esquema de un sustrato con dos capas con diferentes constantes de red, en (a) las capas no están en contacto, es decir sin tensión y (b) las capas están en contacto con el sustrato y la superior sufre tensión compresiva en tanto que para la otra es de carácter tensil. . . . .	32
2.11. Representación esquemática de los principales procesos ópticos. En general para una onda incidente sobre un material se tiene que parte de la luz es reflejada, otra mas es transmitida y absorbida y también sufre proceso de refracción así como algunos procesos de segundo orden, no mostrados en la figura. . . . .	35

3.1. Representación del perfil de potencial y la densidad de probabilidad en un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  de estructura de zincblenda, con y sin efectos de tensión, así como los dos primeros estados ligados -representados por la línea roja para el estado básico ( $E_0$ ) y azul para el primer estado excitado ( $E_1$ ). En la configuración que se muestra, el ancho del pozo izquierdo es de  $L_{lw} = 4$  nm, el ancho de la barrera se ha establecido de 1 nm y el ancho del pozo de la derecha está fijo en 6 nm. Ver en el texto los detalles de los valores de la concentración de aluminio en las barreras . . . . . 44

3.2. a) El cuadrado de los elementos de matriz del momento dipolar,  $|M_{10}|^2$ , b) Factor de polarización de asimetría  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , c) Diferencia principal de energía inter-subbanda ( $E_{10}$ ); representados como funciones del ancho del pozo de la izquierda  $L_{lw}$ ; para un pozo cuántico doble asimétrico de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  tomando en cuenta las estructuras tanto tensionadas (línea segmentada) como sin tensionar (línea sólida). . . . . 47

3.3. Densidad de probabilidad electrónica del estado base y el primer estado excitado, para diferentes valores de ancho del pozo cuántico de la izquierda ( $L_{lw}$ ), considerando el efecto de tensión: a) 4 nm, b) 6 nm y c) 8 nm. El ancho del pozo de la derecha se mantuvo en 6 nm. . . . . 54

3.4. a) Cuadrado de los elementos de matriz dipolares no diagonales,  $|M_{10}|^2$ , asociados a la transición energética principal; b) factor de asimetría de polarización permanente  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , y c) la diferencia principal de energía ( $E_{10}$ ) para un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  con red tensionada (línea segmentada) y relajada (línea sólida). Las cantidades se reportan como funciones de la longitud de la barrera central  $L_b$ . . . . . 55

- 3.5. a) El coeficiente de absorción lineal  $\alpha^{(1)}(\omega)$ , b) la corrección de tercer orden  $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ , y c) coeficiente de absorción total  $\alpha^{(T)}(\omega, I)$  para un pozo cuántico doble asimétrico con tensión (línea segmentada)  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ , y sin tensión (línea sólida). Las cantidades se presentan como funciones de la energía del fotón incidente para varios valores del ancho del pozo cuántico de la izquierda,  $L_{lw}$ . . . . . 56
- 3.6. a) El coeficiente de cambio relativo del índice de refracción lineal,  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ , b) la corrección de tercer orden  $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n_r$ , y c) el cambio relativo del índice de refracción total  $\Delta n^{(T)}(\omega, I)/n_r$  para un pozo cuántico doble asimétrico doble  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  con tensión (línea segmentada) y sin tensión (línea sólida). Las cantidades se presentan como funciones de la energía del fotón incidente para varios valores del ancho del pozo cuántico de la izquierda,  $L_{lw}$ . . . . . 57
- 3.7. a) El coeficiente de absorción óptica lineal  $\alpha^{(1)}(\omega)$ , b) la contribución no lineal de tercer orden  $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ , y c) el coeficiente de absorción total  $\alpha^{(T)}(\omega, I)$  para la transición principal intersubbanda en un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  tensionado (línea segmentada) y sin considerar tensión (línea sólida). Las cantidades se reportan como funciones del ancho de la barrera central,  $L_b$ . . . . . 58
- 3.8. a) Parte lineal del coeficiente de cambio relativo del índice de refracción,  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ , b) contribución no lineal de tercer orden  $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n_r$ , y c) coeficiente de absorción total  $\Delta n^{(T)}(\omega, I)/n_r$  relacionado con la transición electrónica intersubbanda  $E_0 \rightarrow E_1$  en un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  tensionado (línea segmentada) y sin tensionar (línea sólida). Las cantidades se reportan como funciones del ancho de la barrera central,  $L_b$ . . . . . 59

# Introducción

En este primer capítulo daremos una breve introducción al tema de los semiconductores basados en nitruros, haciendo hincapié en las diferencias entre los nitruros en su fase cúbica (zincblenda) y los que poseen estructura hexagonal (wurzita), presentando algunas de sus principales características y aplicaciones en general, al revisar el estado del arte del sistema de estudio. Posteriormente se presentará la justificación y motivación de la presente tesis doctoral, finalmente se hará una descripción de la organización de la tesis.

## 1.1. Estado del Arte

La definición de semiconductor es un concepto bastante amplio debido a que los materiales que se definen como tal, ninguno de ellos cumple a cabalidad con alguno de los conceptos existentes. En algunos casos la definición va desde que estos materiales se comportan como aislantes, teniendo anchos de bandas prohibidas o *gap* angostas, por lo que al excitarse térmicamente provoca la migración de electrones de la banda de valencia hacia la banda de conducción, es decir que si el material es térmicamente excitado, este disminuirá su resistencia en el rango de  $10^{-5}$  a  $10^6 \Omega \text{ cm}$ , hasta la definición de que son materiales que poseen bandas prohibidas que van desde 0 a 4 eV con un rango de resistencia de  $10^{-2}$  a  $10^9 \Omega \text{ cm}$  [1, 2]. Sin embargo existen semi-



Los materiales semiconductores más importantes son los elementos que están ubicados principalmente a la derecha de la tabla periódica en el grupo IV, III-V y II-IV, formando compuestos binarios. Por ejemplo, pueden mencionarse materiales como Arseniuro de Galio (GaAs), Fosforo de Indio (InP), Arseniuro de aluminio (AlAs), Oxido de Zinc (ZnO) y Sulfuro de Zinc (ZnS), entre otros, incluyendo antimoniuros y telururos. De igual manera tenemos compuestos semiconductores ternarios que se obtienen mediante aleación de dos materiales binarios que comparten el mismo anión, como es el caso del  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , donde  $x$  representa la concentración de aluminio en este compuesto, o en este trabajo de tesis el  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Igualmente, se pueden formar compuestos cuaternarios al crear aleaciones de dos binarios sin anión común, como el  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ , donde  $x$  y  $y$  representan a las concentraciones de indio y arsénico respectivamente. El nombre de semiconductor para un material proviene de la física de los sólidos. Los materiales a los que hacemos referencia son sólidos cristalinos. Ellos presentan sus átomos dispuestos en una red que posee simetría traslacional, lo que significa que se pueden dividir en celdas unitarias, las cuales se caracterizan por poseer una constante de red que es la distancia igual a la longitud de una celda unitaria y esta, al trasladarse en el espacio, se mantiene constante mostrando una periodicidad que caracteriza al cristal. Esta periodicidad es la misma que posee el potencial -de origen electrostático- que corresponde a los átomos del sólido. Resulta de suma importancia el hecho de que los sólidos tengan un potencial periódico, ya que esto indica también la simetría traslacional de los estados de los portadores de carga que pueden moverse en los mismos al aplicarse un voltaje exterior. Los niveles energéticos de los electrones se encuentran en regiones continuas llamadas bandas, que se dividen en bandas de conducción y de valencia, entre las cuales existe un rango de energía prohibida llamado el *gap* que corresponde a valores energéticos de los portadores no permitidos [1].

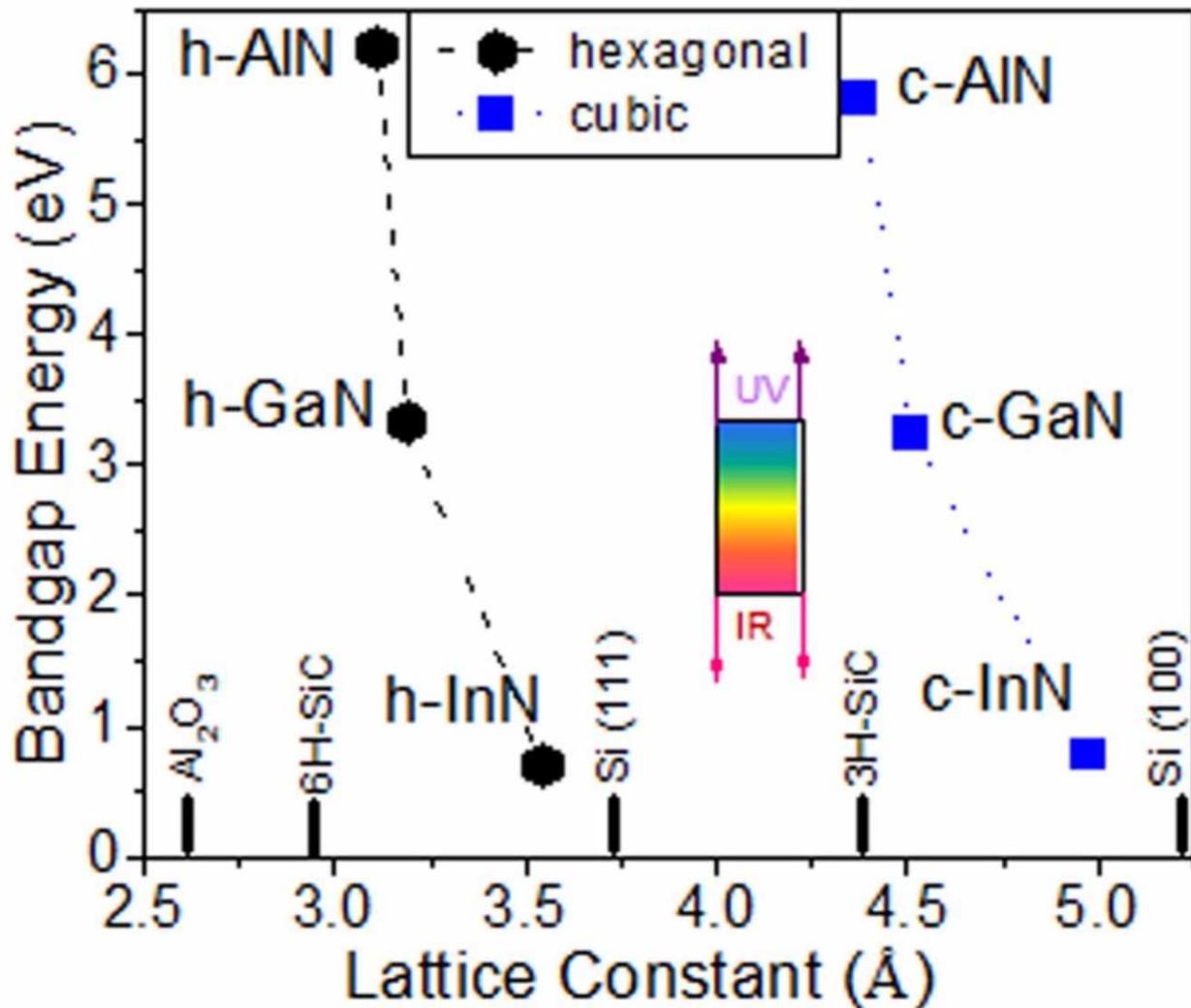


Figura 1.2: Representación gráfica las constantes de red (*Lattice constant* ( $\text{\AA}$ )) y de los anchos de banda prohibida (*Bandgap energy* ( $eV$ )), así como de los principales sustratos utilizados para crecer las heteroestructuras basadas en nitruros para las estructuras wurtzita (negro) y zinc blenda (azul). En esta se observa, que en función del semiconductor, se tienen sistemas que van desde el ultravioleta hasta el infrarrojo pasando por el espectro visible.

Dentro de la física de Semiconductores, uno de los elementos más trascendentales ha sido la fabricación de heteroestructuras que contienen dos o más de estos materiales dispuestos en capas limitadas por las llamadas intercaras. En este marco, las heteroestructuras constituidas por semiconductores III-V basados en nitruros y sus aleaciones se han estudiado de diferentes maneras por causa de las propiedades que estas poseen. Si tratamos con el caso particular de

los compuestos semiconductores III-V que tiene como anión al átomo de nitrógeno; es decir, los llamados nitruros III-V. En la figura 1.1 se muestra una excelente gráfica de la relación entre anchos de banda prohibida (*Bandgap energy* ( $eV$ )) y la constante de red (*Lattice constant*,  $a$  ( $\text{\AA}$ )) de una cantidad importante de los semiconductores mas estudiados, reportados en [4].

En particular en este trabajo de tesis estamos interesados en los semiconductores III-V basados en nitruros y sus aleaciones. En la figura 1.2 [5] se muestran solamente los materiales de interés que pueden ser utilizados en dispositivos optoelectrónicos que van desde el ultravioleta hasta el infrarrojo, pasando por el espectro visible, del espectro electromagnético, debido a la diferencia que existe entre sus *gaps* [4, 6–10].

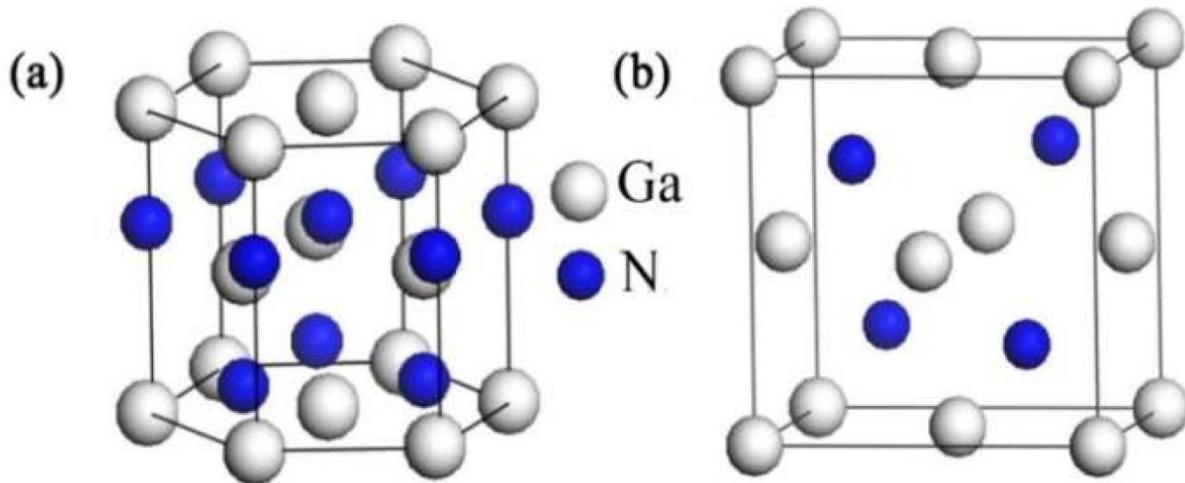


Figura 1.3: Celdas unitarias del GaN en sus fases: (a) wurzita (hexagonal) y (b) zincblenda (cúbica). En el caso del  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  alguno porcentaje de los átomos de Ga (grises) son sustituidos por un cierto porcentaje de aluminio dado por  $x$ .

Tanto el GaN como el  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  pueden cristalizar en dos fases, la primera de ellas, que es de hecho las más estable, es la wurzita (hexagonal) y la segunda, que también se ha logrado crecer experimentalmente, es la fase cúbica (zincblenda). En la figura 1.3 (a) se presenta la celda unitaria para una estructura hexagonal para el GaN, donde los átomos de galio (Ga) están representados de color gris y los átomos de nitrógeno de color azul, esta celda unitaria está definida por dos constantes de red, la primera de ellas es la distancia interatómica entre los

galios en el plano del hexágono ( $a = 3.19 \text{ \AA}$ ) y la segunda es la distancia entre los átomos de Ga en la dirección vertical ( $c = 5.19 \text{ \AA}$ ). En la figura 1.3 (b) se muestra la celda unitaria para la fase cúbica del nitruro de galio (GaN), cuya constante de red es  $a = 4.52 \text{ \AA}$ . Para el caso de la mezcla ternaria  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , donde se sustituye una cierta cantidad ( $x$ ) de átomos de galio por átomos de aluminio, la forma más adecuada de tratar este tipo de mezclas ternarias, sobre todo desde el punto de vista de los cálculos de primeros principios, es la aproximación de cristal virtual, la cual en nuestros cálculos en la aproximación de masa efectiva nos permite usar la ley de Vegard para interpolar los distintos parámetros de interés, en términos de la concentración de Al ( $x$ ).

El desarrollo de técnicas de crecimiento de materiales como el crecimiento por epitaxial de haces moleculares (MBE) y la deposición metal-orgánica de vapores químicos (MOCVD) han contribuido a la sintetización artificial de estructuras cristalinas como superredes y pozos cuánticos debido a que el crecimiento de los materiales por medio de estas técnicas es controlado y preciso. La técnica MBE fue utilizada por primera vez para el crecimiento de sistemas cuánticos semiconductores en capas atómicas por medio de uno o varios haces moleculares, utilizando un sustrato cristalino. Estos se hacen incidir sobre una superficie caliente dentro de una cámara de ultra-alto vacío ( $10^{-11}$  Torr). Los haces dentro de la cámara muestran baja densidad y se puede considerar nula la interacción entre los átomos del gas con los átomos residuales, depositándose sin problemas sobre el sustrato. La deposición de materiales a temperaturas bajas es posible gracias al desarrollo de las técnicas de alto y ultra-alto vacío, pudiendo así controlar la composición y pureza de los materiales, también se puede diferenciar exactamente entre la capa de un material y otra de uno distinto. Las deposiciones de estos materiales semiconductores se realizan de manera controlada colocando una monocapa del material sincrónicamente sobre otra. En la actualidad los equipos utilizados por la técnica de MBE nos dan la oportunidad de monitorear en tiempo real el espesor y la calidad de la estructura, por ejemplo la reflexión de los haces de electrones de alta energía difractados (RHEED por sus siglas en inglés) que es una técnica *in situ*, cumple con esta función. Existen también otras técnicas de caracterización de los

materiales crecidos en cuanto a pureza y composición, siendo una de ellas la espectroscopía de electrones Auger. La figura 1.4 representa gráficamente un equipo para crecimiento de materiales semiconductores por la técnica MBE en donde se encuentran celdas para la efusión en las que se incrementa la temperatura de dichos materiales para producir los haces moleculares, la salida de gas en estas celdas es controlada mediante obturadores para el control de espesores de las capas en crecimiento. El sustrato se encuentra en un soporte con temperatura controlada independientemente [11].

La vía mas común de crecer los nitruros III-V es por medio del procedimiento epitaxial, idealmente con MBE, sobre sustratos como el zafiro (principalmente para los materiales con estructura de wurtzita) y el Si, SiC y MgO, direccionados en distintas orientaciones, para su obtención en forma cúbica [12–14].

Como mencionamos, la estructura wurtzita es aquella que resulta termodinámicamente más estable [15–17]. No obstante, la forma alotrópica de la zincblenda tiene una configuración energética sólo ligeramente más alta, de modo que un sistemas de capas delgadas de los nitruros en fase cúbica también logran ser estables termodinámicamente [18–21]. En fechas recientes se han estado estudiando y buscando la obtención de sistemas a capas con fase cúbica debido a que, al ser cristales centrosimétricos, carecen de polarización espontánea y presentan muy bajos coeficientes de piezoelectricidad. lo cual elimina la aparición de campos eléctricos internos (*Built-in*) en las multicapas, cosa que sí ocurre cuando estas se fabrican con nitruros hexagonales. Tales campos inducidos por la polarización afectan la eficiencia óptica de los dispositivos optoelectrónicos [7, 13, 14, 22–25].

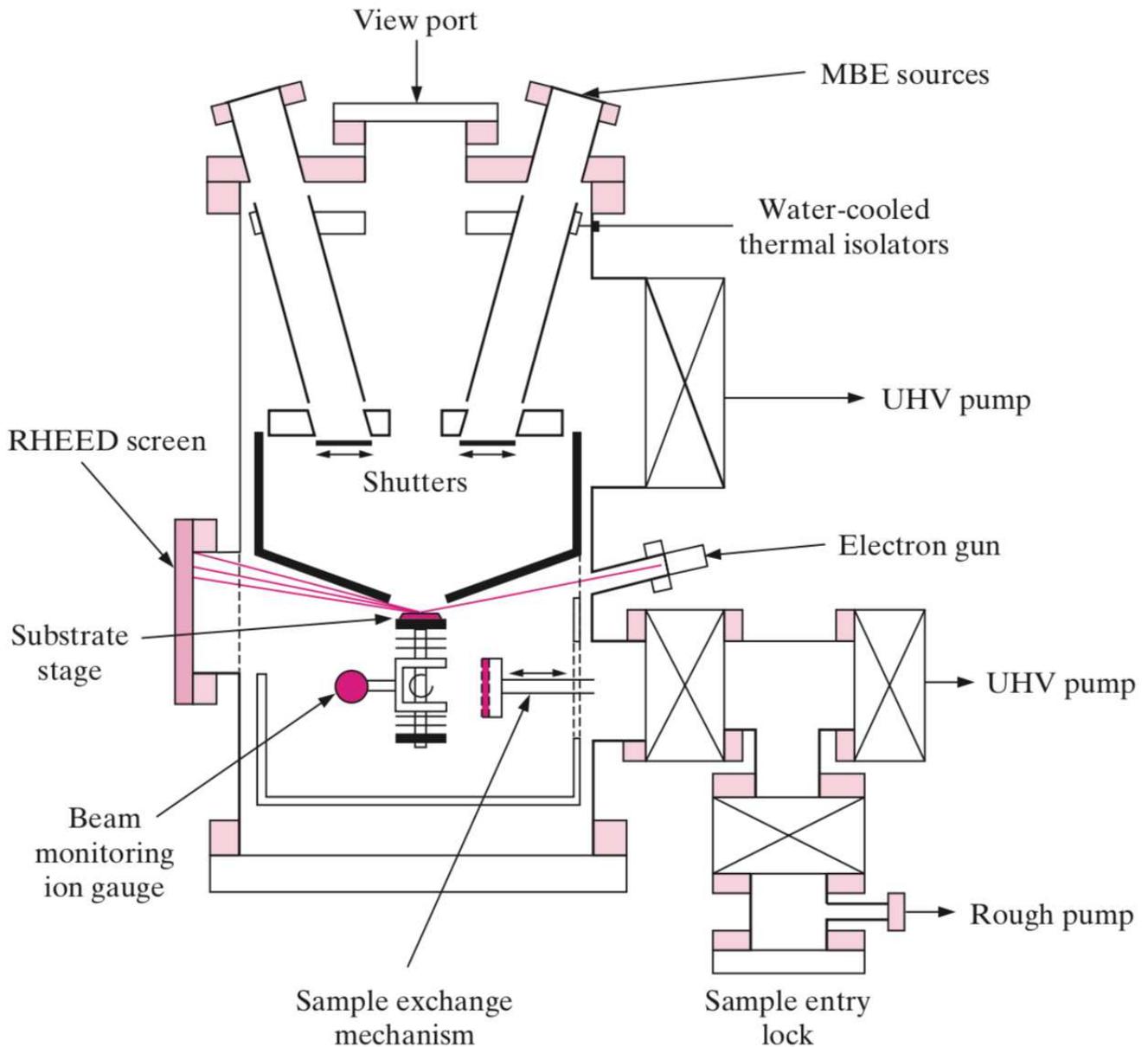


Figura 1.4: Diagrama esquemático de un sistema de crecimiento para materiales semiconductores por la técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE Por sus siglas en inglés) [1].

Por otro lado, también se han producido sistemas donde se introduce una pequeña cantidad de nitrógeno (N) en las aleaciones semiconductoras III-V basadas en otros materiales como el GaAs y el InAs (ver figura 1.1 para ver su *gap* y constante de red). Esta inclusión de nitrógeno altera la configuración electrónica de los materiales dando lugar a nuevas características. Estos

cristales de tipo Zinc-blenda son llamados nitruros diluidos, como es el caso del semiconductor  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}_y\text{As}_{1-y}$  [26, 27], en los cuales se ha determinado que poseen propiedades que permiten su aplicación en la fabricación de dispositivos fotovoltaicos y láseres, entre otros. Con todo, dentro del conjunto de publicaciones dedicadas a las propiedades de los nitruros semiconductores y sus aplicaciones, la proporción de trabajos que tratan con nitruros III-V de estructura cristalina cúbica es aun ínfima, aunque su número ha venido aumentando en la medida que se ha conseguido su obtención, tanto experimental como tecnológicamente. Sin embargo, muchas de las características básicas de estos cristales aún permanecen poco estudiadas o pobremente caracterizadas desde el punto de vista experimental, con muchos resultados provenientes de cálculos, fundamentalmente de primeros principios, y pocos resultados experimentales. Debido a esto, las investigaciones sobre sus propiedades o las de sus estructuras sintéticamente obtenidas han generado mucho interés, además de justificarse adecuadamente su estudio y el de sus propiedades, tanto estructurales como optoelectrónicas.

Es pertinente comentar que este tipo de compuestos se sintetizan, de hecho, desde principios del siglo XX. Es entonces cuando aparecen los primeros reportes de los compuestos binarios de nitruros III-V, los más estudiados son (AlN, BN, GaN e InN) [28–31]. Pero, como se comenta en la referencia [6], no fue sino hasta finales de los años 1960 que se comenzó a pensar en el GaN como posible fuente para obtener emisión fotoluminiscente en el rango azul del espectro visible, y solamente a fines de la década de 1980 se pudieron producir los primeros diodos emisores de luz (LED) en dichas longitudes de onda. En época más reciente, la heteroestructura GaN/InGaN ha ido ganando importancia en el área de las energías renovables, principalmente en el tema de las celdas solares [32, 33]. En la actualidad se siguen realizando estudios teóricos y experimentales sobre las diversas propiedades y parámetros fundamentales de estos materiales [18, 34–38].

En los últimos años los compuestos binarios como el nitruro de aluminio (AlN) y nitruro de galio (GaN) y su aleación ternaria  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  han recibido una cantidad importante de atención debido a la diferencia entre sus valores de ancho de banda prohibida (*gap*), ya que controlando la composición de aluminio ( $x$ ) en la aleación que ambos forman se pueden diseñar

aplicaciones electrónicas y optoelectrónicas, tanto en el caso hexagonal (wurtzita) [39, 40] como en el sistema cúbico (zincblenda) [41, 42]. Para darse una idea del amplio rango de valores del ancho de banda prohibida que puede abarcar la muestra ternaria de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , observamos de la figura 1.2 que el *gap* para el c-AlN es de aproximadamente 6 eV mientras que el valor de este para el c-GaN aproximadamente 3.5 eV, así que una interpolación tipo ley de Vegard nos un rango bastante amplio de alturas de barreras en la heteroestructura. Además, a diferencia de la fase alotrópica de wurtzita, el AlN de fase cúbica es que es un material de ancho de banda prohibida indirecta. Sin embargo, algo que contrasta por ejemplo con el extensivamente estudiado  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , de amplio uso en las últimas décadas, es que la aleación  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  mantiene su condición de material de *gap* directo para valores más altos de la fracción molar de Al ( $x \simeq 0,6$  contra  $x \simeq 0,4$  del  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ). De esta manera se puede aprovechar mejor esa diferencia de valores de la brecha prohibida como función de la concentración de aluminio, tanto para la descripción teórica como para su aplicación en dispositivos optoelectrónicos.

Finalmente, es bien conocido que cuando existe alguna diferencia entre las constantes de red de los materiales constituyentes puede aparecer tensión en las heteroestructuras basadas en dichos materiales, en este caso específico los nitruros cúbicos AlN, GaN poseen constantes de red distintas (ver figura 1.2) y por lo tanto también mezcla semiconductor ternaria  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . El efecto de la tensión en este tipo de heteroestructuras ya ha sido considerado en nitruros cúbicos, por ejemplo Rojas-briseño *et al.* estudió el estado de los excitones en perfiles de potencial dobles y de escalón c-GaN/InGaN considerando la aproximación de masa efectiva y la tensión [43, 44]. A pesar de que en el caso del sistema GaN/AlGaIn, tales diferencias en el parámetro de red no son tan grandes como en el caso del GaN/InGaIn, aun así deben de ser tomadas en cuenta para una mejor caracterización de los sistemas de estudio.

## 1.2. Justificación y motivación

Como conclusión de esta breve presentación del estado del arte de los nitruros III-V, la cual se complementará más adelante conforme el desarrollo del tema investigación y de la discusión de los resultados, queda de manifiesto que el desarrollo tecnológico ha llevado a la búsqueda de nuevos materiales semiconductores, con nuevas propiedades para el diseño y fabricación de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.

Lo cual justifica los estudios teóricos sistemáticos basados en parámetros experimentales o que se obtienen de cálculos de primeros principios, como los que se usan en este tipo de estudios, en conjunto con teorías bien establecidas como lo es la aproximación de masa efectiva que ha sido muy exitosa para la correcta caracterización de heteroestructuras cuánticas semiconductoras, e inclusive a logrado explicar bien algunas mediciones experimentales, lo cual permite el entender los principales aspectos de los sistemas de estudio e investigar la importancia de los distintos factores para poder proponer parámetros que pueden ser de interés para posibles aplicaciones. En este caso se pueden implementar estas teorías al estudio de las propiedades ópticas de semiconductores III-V basados en nitruros cúbicos.

La motivación fundamental para esta investigación es que el determinar cuál es el efecto de la tensión en las propiedades ópticas lineales y no lineales, en específico el coeficiente de absorción y el cambio relativo del índice refracción, para un pozo cuántico doble con alturas de barreras asimétricas de AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> en su fase cúbica, que constituyen fuentes promisorias de esas propiedades ópticas al ser combinados en la forma de heteroestructuras semiconductoras cuánticas dobles.

## 1.3. Organización de documento

En el siguiente capítulo se presentarán los aspectos fundamentales del marco teórico, los modelos de cálculo de la estructura electrónica, los parámetros del sistema, la teoría del sólido

modelo para considerar la tensión en las heteroestructuras, se definirán los conceptos de heteroestructuras así como las expresiones para el cálculo de las propiedades ópticas de interés. Posteriormente en el capítulo 3 se presentan y discuten los resultados, dando conclusiones finales en el capítulo 4.

## Marco teórico

En este capítulo se darán algunas definiciones básicas así como generalidades del sistema de estudio, para lo cual iniciaremos dando una breve descripción de las estructuras tipo diamante, zincblenda, así como wurzita, que son el tipo de sistemas de interés en esta tesis doctoral. Presentaremos los aspectos básicos relacionados a las heteroestructuras cuínticas como lo son el alineamiento relativo de las bandas (*Band-Offset*), y discutiremos el efecto de las tensiones de las interfaces en la heteroestructura. Presentaremos finalmente el método de cálculo de la estructura electrónica así como las expresiones usadas para el cálculo de las propiedades ópticas de interés.

### 2.1. Generalidades

Como lo presentamos en el capítulo anterior, los compuestos de GaN and AlN y su aleación el  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  han sido ampliamente estudiados por la importancia de sus propiedades ópticas y electrónicas, y en particular por que poseen una banda prohibida ancha, la cual los hace idóneos para aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos del rango visible [45–47]. Este tipo de materiales se encuentran en forma de cristales en dos diferentes formas alotrópicas, Hexagonal (Wurzita) y Cúbica (zincblenda). Esta última tiene la ventaja de no presentar polarizaciones

espontaneas electrónicas internas, y un perfil piezoeléctrico débil [45, 48, 49]. Debido a dichas características, las heteroestructuras formadas por los semiconductores cúbicos  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  debería estar libres de campos eléctricos dentro de la estructura. Estas heteroestructuras se producen y caracterizan por diferentes métodos [41, 42, 46, 47, 50–54].

Las principales características de los compuestos puros como el nitruro de galio (GaN) y el nitruro de aluminio (AlN), en el espectro electrónico, tales como la energía de la banda prohibida, constante dieléctrica, entre otras, permite con la ayuda de la relación de Vegard determinar, en dependencia de la composición de Al en la aleación ( $x$ ), los parámetros de del  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Dichos parámetros han sido determinadas experimental y teóricamente [53, 55–57]. Existe, además, una diferencia entre las constantes de red de estos dos materiales, la cual puede dar lugar a la aparición de tensión en las heteroestructuras basadas en nitruros. El efecto de red tensionada ha sido ya considerado en heteroestructuras cúbicas de nitruros, por ejemplo Rojas-Briseño *et al.* al calcular el espectro excitónico de pozos dobles de InGaN/GaN [43, 44] y Grady y Bayram reportaron una simulación de un transistor efecto de campo de alta movilidad electrónica en AlGaN/GaN cubico [58].

Las propiedades ópticas de sistemas cuánticos de baja dimensión basados en nitruros del grupo III se han estudiado ampliamente. No es posible mencionar en este documento la amplia lista de referencias relacionadas a este tema. De manera que sólo se mencionan como muestra ilustrativa la referencia de Kouhi [59], quien investigó la absorción óptica en puntos cuánticos esféricos tomando en cuenta el efecto de campo eléctrico. La emisión luminiscente en nanocables core-shell en un sistema AlGaN/GaN. En su fase wurzita, fue reportada por Namvari y colaboradores [54, 60]. Otros efectos han sido reportados tales como la no parabolicidad, orientación cristalina, polarización, entre otras [39, 40, 61].

La configuración de pozos cuánticos semiconductores dobles ha sido objeto de estudio durante mucho tiempo. En particular, la configuración de pozos cuánticos dobles asimétricos muestra que regiones de diferentes anchos dan la posibilidad de una respuesta óptica intersubbanda significativa debido a la presencia de polarizaciones no-permanentes, asociadas a las contribuciones

momento dipolar eléctrico distinto de cero fuera de la diagonal. En este fenómeno, la contribución no lineal puede tener un rol no despreciable, como se muestra en las referencias [62–64]. Por este motivo Sun *et al.*, proponen pozos cuánticos dobles asimétricos (ADQW, por sus siglas en inglés) de GaAs/AlGaAs [65] y con material en su fase wurzita de la heteroestructura GaN/AlGaN [66] como posibles regímenes de láseres de intersubbanda Raman y una ganancia aproximada de  $400 \text{ cm}^{-1}$ . H. R. Hamedi discutió la posición del electrón en pozos cuánticos dobles asimétricos de GaAs/AlGaAs impulsado por dos láseres ortogonales de onda estacionaria [67], mientras que F. Ungan *et al.* investigaron las propiedades eléctricas y ópticas de un pozo doble simétrico  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$  considerando efectos de láser intenso y campo eléctrico externo para inducir asimetría en un perfil de potencial [68]. T. Wecker *et al.* reportaron el crecimiento de c-AlGaN/GaN ADQ utilizando la epitaxia de haces moleculares de radiofrecuencia y plasma asistido y estudiaron los niveles de energía, por medio de espectrometría de excitación fotoluminiscente [41]. Poco tiempo después el mismo grupo de investigación reportó la fabricación de c-AlGaN/GaN ADQW, variando la longitud de la barrera entre pozos mientras se ajustan los anchos de los pozos cuánticos y midiendo la correlación el tiempo de decaimiento de portadores en el sistema [42].

En este trabajo de tesis doctoral reportamos la investigación de una configuración para para pozos cuánticos asimétricos dobles cúbicos en AlGaN/GaN, los cuales incluyen diferentes alturas de las barreras junto con distintos anchos de pozos cuánticos. Dentro de este mismo contexto evaluamos teóricamente los coeficientes de absorción y el cambio relativo del índice de refracción.

## 2.2. Estructura cristalina del sistema de estudio

Las estructuras cristalinas, en este caso particular, semiconductoras se obtienen cuando la base atómica, que puede ser un átomo, una molécula o una base más compleja, es colocada en los puntos de una red de Bravais. Por ejemplo en materiales tales como Si y Ge, los átomos

de la base son iguales en las subredes FCC (por sus siglas en inglés) aniónica y cationica, por lo tanto la estructura cristalina será equivalente a la del diamante. En la figura 2.1 se muestra una red FCC con todos los átomos iguales. La estructura tipo diamante consiste en dos redes FCC interpenetradas un respecto de la otra un cuarto de la distancia a lo largo de la diagonal principal y su red recíproca es un octaedro truncado.

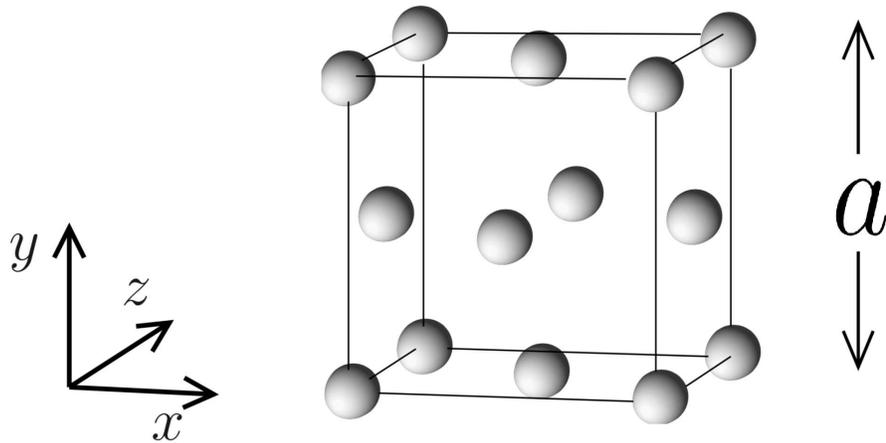


Figura 2.1: Red de Bravais cúbica centrada en las caras. Se especifica el símbolo de la constante de red  $A_0$ .

Por otro lado, para materiales del grupo III-V así como II-VI como lo son el GaAs, AlAs, InP, HgTe, CdTe, sólo por mencionar algunos, los cationes están situados en los sitios  $(-\frac{1}{8}, -\frac{1}{8}, -\frac{1}{8})$  y los aniones en los sitios  $(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8})$  de la estructura zincblenda (*Zinc-Blende*) la cual consiste de dos subredes FCC, como la que se muestra en la figura 2.1, desplazadas una respecto de la otra un cuarto de la distancia a lo largo la diagonal principal. La estructura *zinc blenda* es la estructura que corresponde al ZnS. Sin embargo no todos los cristales III-V y II-VI son zincblenda, ya que por ejemplo el GaN, y sus aleaciones más importantes como el  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , pueden tener además de la estructura de zincblenda, una estructura tipo wurzita, que corresponde a una red cristalina hexagonal, como ya lo hemos mencionado antes, las cuales han tenido mucha importancia los últimos años debido a la gran utilización de estos semiconductores en la fabricación de láseres y diodos emisores de luz en el verde y en el azul.

## 2.3. Teoría de Bandas

En este trabajo consideramos únicamente dos bandas de energía para el sistema, la banda más baja, casi llena de electrones, que además puede conducirlos por el movimiento de estados vacíos, esta banda se origina de los estados de valencia electrónicos los cuales constituyen los enlaces covalentes que mantienen unidos a los átomos en el cristal. La carga eléctrica de un sólido se asemeja, de muchas maneras, a un fluido y la analogía para esta banda la cual esta etiquetada como la *banda de valencia* es de que los estados vacíos se comportan como burbujas dentro de un fluido llamados *huecos*. En particular los huecos alcanzan el punto más alto de la banda de valencia ver figura 2.2.

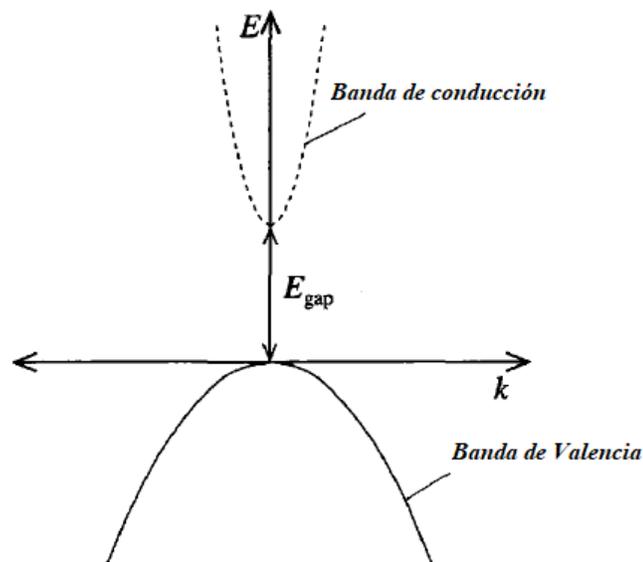


Figura 2.2: Energía *vs* curva del vector de onda para un electrón en la banda de conducción y un hueco en la banda de valencia de un semiconductor de gap directo.

En un semiconductor, la banda superior esta casi vacía de electrones, y representa el estado excitado del electrón, la cual puede ser ocupada por electrones que ascienden de enlaces covalentes localizados dentro de estados extendidos en el cuerpo del cristal. Estos electrones son acelerados rápidamente por un campo eléctrico aplicado y contribuye al flujo de corriente, esta banda es llamada *banda de conducción*.

La diferencia de energía entre la banda de valencia (máximo) y la banda de conducción (mínimo) es conocido como el *Band-Gap* o ancho de banda prohibida, etiquetado por  $E_{gap}$ . Las curvaturas descritas en ambas bandas son determinadas experimentalmente para GaAs y otros materiales semiconductores, y en el caso específico del GaAs las masas efectivas se aproximan a  $0.067 m_0$  para un electrón en la banda de conducción y  $0.6 m_0$  para un hueco pesado en la banda de valencia. Típicamente se coloca el cero de energía en la parte alta de la banda de valencia. De hecho hay más de una banda de valencia y se distinguen por sus diferentes masas efectivas, las masas efectivas para el GaN así como para el AlN son de 0.193 y de 0.316 [56] respectivamente, la masa efectiva del AlGaIn es calculada por la ley de Vegard y el parámetro de bowing.

## 2.4. Aproximación de Masa efectiva

Desde el punto de vista electrostático, el potencial cristalino consiste en redes potenciales tridimensionales de núcleos iónicos simétricos esféricos cubiertos por capas electrónicas internas (electrones del *core*), las cuales son además rodeadas por distribuidores de carga de enlace covalente (electrones de valencia), las cuales mantienen todo unido.

Por ende el potencial cristalino es muy complejo más que su análogo en el cristal ideal, ya que el electrón además de sentir el potencial cristalino está sometido a otros potenciales que no poseen periodicidad y por lo tanto utilizando el principio de simplicidad este puede ser aproximado a una constante utilizando la ecuación de Schrödinger para un electrón en el vacío, aunque sabemos que un cristal no se encuentra en este, nos permite utilizar un parámetro empírico adecuado llamado *masa efectiva*  $m^*$ , quedando la ecuación de Schrödinger para un electrón en el espacio libre independiente del tiempo de la siguiente manera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi = E\psi \quad (2.1)$$

y la solución para las energías será:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.2)$$

Esto es a lo que se le conoce como aproximación de masa efectiva, la cual es apropiada para encontrar el momento del electrón como ocurre con campos eléctricos bajos, aunque es común utilizar la parametrización en física de semiconductores. En trabajos experimentales se ha encontrado que la masa efectiva es, en general, anisotrópica, debido a que el potencial cristalino nos muestra que el eje  $[0, 0, 1]$  es diferente al eje  $[1, 1, 1]$ . Por ejemplo, la masa efectiva del GaAs esta reportada en  $0.067 m_0$ , en la que  $m_0$  es la masa en reposo del electrón. En la figura 2.3 se muestra la curva de dispersión para esta masa efectiva, comparada con la masa de un electrón en el vacío.

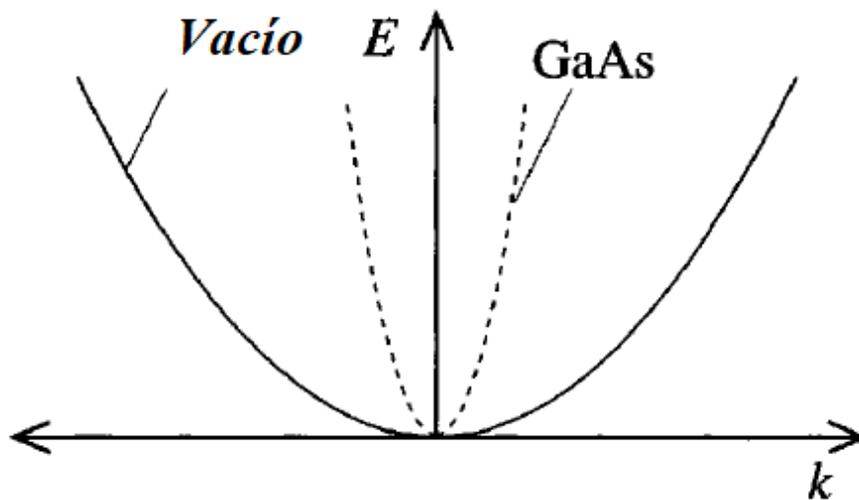


Figura 2.3: Gráfica de la energía contra el vector de onda de un electrón en GaAs y el electrón en el vacío.

## 2.5. Ecuación unidimensional de masa efectiva

Para calcular los estados electrónicos en nuestro sistema debemos obtener los estados del electrón mediante la teoría de masa efectiva.

Empleando la aproximación parabólica, para el punto  $\Gamma$  de la zona de Brillouin del espacio recíproco correspondiente al movimiento “libre” en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento (que se asumen, respectivamente, como el plano  $(x, y)$  y el eje  $z$ ), los estados del movimiento confinado se determinan mediante la solución de la siguiente ecuación diferencial tipo Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m_\kappa^*(z)} \frac{d}{dz} \right] \Psi(z) + V_\kappa(z) \Psi(z) = E_{n,\kappa} \Psi(z) \quad (2.3)$$

En (2.19)  $V_\kappa(z)$  es la función que describe el perfil de la energía potencial en la banda  $\kappa$ , correspondiente al alineamiento en la estructura ,

$$V_\kappa(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z \in \text{barrera} \\ -V_0 & \text{si } z \in \text{pozo,} \end{cases} \quad (2.4)$$

en tanto  $m_\kappa^*(z)$  es la función masa efectiva

$$\frac{1}{m_\kappa^*(z)} = \begin{cases} \frac{1}{m_b^*} \Theta(z - z_i) \Theta(z_f - z) & \text{si } z_i, z_f \in \text{barrera} \\ \frac{1}{m_w^*} \Theta(z - z_i) \Theta(z_f - z) & \text{si } z_i, z_f \in \text{pozo,} \end{cases} \quad (2.5)$$

que describe el valor de esta cantidad como dependiente de la posición, dada la presencia de materiales diferentes en las distintas capas semiconductoras del sistema. Con las características de un problema como el que se nos presenta, la ecuación 1D de masa efectiva se escribe como

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m_\kappa^*(z)} \right] \frac{d}{dz} + \frac{1}{m_\kappa^*(z)} \frac{d^2}{dz^2} \right\} \Psi(z) + V_\kappa(z) \Psi(z) = E_{n,\kappa} \Psi(z). \quad (2.6)$$

La consideración de la masa efectiva como una función de la posición a lo largo de la dirección de crecimiento es un elemento que busca una descripción más cercana a la realidad. Diferencias cuantitativas importantes nos surgen en el caso en que los valores de las masas efectivas en los materiales involucrados sean próximos. Sin embargo, en el caso de los nitruros III-V, los valores

de estos parámetros pueden llegar a estar bastante distantes y puede detectarse una diferencia cuantitativa apreciable en las propiedades calculadas, como se puede concluir al observar el trabajo de la referencia [43], en el cual reportamos las propiedades excitónicas de pozos cuánticos dobles de c-GaN/InGaN.

Normalmente, en casos simples como los que nos ocupan, las soluciones de la ecuación 1D de masa efectiva se obtienen analíticamente en términos de funciones simples. Sin embargo, cuando los perfiles del potencial se encuentran afectados, por ejemplo, por la presencia de campos externos, las soluciones que se pueden encontrar de manera analítica son funciones especiales, bastante más complejas de trabajar o, como ocurre en el caso de campos de láser intenso, solamente se pueden determinar de forma numérica. Por esta razón, hemos elegido resolver la ecuación (2.22) mediante un procedimiento de diagonalización de la matriz hamiltoniana que resulta de proponer la solución en la forma de un desarrollo de Fourier.

Entonces, el esquema de cálculo supone que a una distancia  $L$  del origen se ubican unas paredes de potencial de altura infinita. Esta distancia ha de ser mucho mayor que la extensión típica en la que pueda considerarse no despreciable la densidad de probabilidad asociada con la menos localizada de las funciones de onda del espectro discreto para el movimiento de los portadores en el pozo de potencial. De esta manera, al exigirse que las funciones de onda se anulen en las barreras situadas en  $z = \pm L$ , se está, al mismo tiempo, reflejando el problema de Dirichlet relativo a las condiciones de contorno reales. Como condición matemática aproximada se puede escribir que  $L \gg L_W$ , donde  $L_W$  es el ancho del pozo cuántico.

Esta construcción nos permite utilizar como base funcional para el desarrollo de la función de onda en (2.22) al conjunto completo de autoestados del pozo infinito de potencial de ancho  $2L$ , y podemos escribir

Ahora sea la función de onda dada por

$$\psi(z) \rightarrow \Psi_p(z) = \sum_{p=1}^{\infty} C_p \sin \left[ \frac{p\pi(L + 2z)}{2L} \right] \quad (2.7)$$

Para obtener los elementos de la matriz Hamiltoniana, se sustituye esta solución en la (2.22), se multiplica por la izquierda  $\psi_q$  y se integra sobre todo el eje  $z$ . De manera, término a término, resultan las siguientes matrices para las contribuciones de la energía cinética y la energía potencial que sumadas dan como resultado la matriz Hamiltoniana  $H_{q,p}$ .

$$T_{q,p} = \int_{-L/2}^{L/2} \left\langle \Psi_q^*(z) \left| -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m_\kappa^*(z)} \frac{d}{dz} \right] \right| \Psi_p(z) \right\rangle dz \quad (2.8)$$

$$U_{q,p} = \int_{-L/2}^{L/2} \langle \Psi_q^*(z) | V_\kappa(z) | \Psi_p(z) \rangle dz \quad (2.9)$$

El proceso de diagonalización de esta matriz nos produce los eigenvectores y eigenvalores del sistema de nuestro interés cuando nos restringimos a considerar los autovalores que se encuentran por debajo del valor de la barrera de potencial del pozo cuántico.

## 2.6. Heterouniones

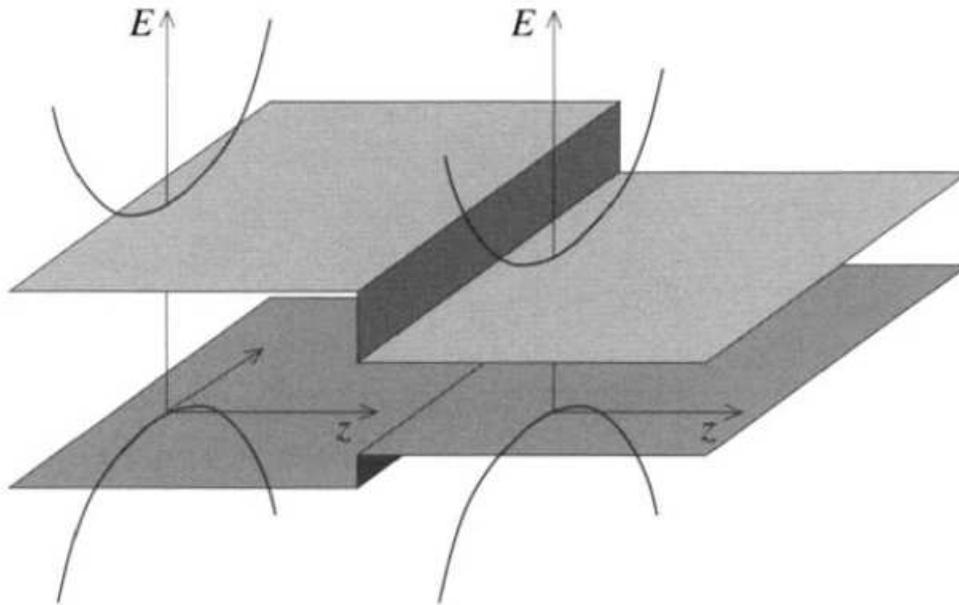


Figura 2.4: Dos materiales diferentes con diferente banda prohibida (Band gap) unidas para formar una heterounión, las curvas representan el movimiento paralelo irrestricto a la interfase.

La aproximación de masa efectiva es para un cristal en bulto, lo que significa que el cristal es muy grande con respecto a la función de onda del electrón, la cual es infinita. En la aproximación de masa efectiva la ecuación de Schrödinger es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi(z) = E\psi(z) \quad (2.10)$$

Cuando dos materiales son colocan uno sobre otro para formar una heterounión, esta ecuación será válida para esto, recordando por supuesto que la masa efectiva puede ser función de la posición, de cualquier manera las bandas prohibidas, pueden ser también diferentes. La discontinuidad en cualquiera de las dos bandas, la de conducción o la de valencia, pueden ser representadas por un término potencial constante. De esta manera la ecuación de Schrödinger

para cada una de las bandas, tomando las masas efectivas para ser la misma en cada material, sería generalizada a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \psi(z) + V(z)\psi(z) = E\psi(z) \quad (2.11)$$

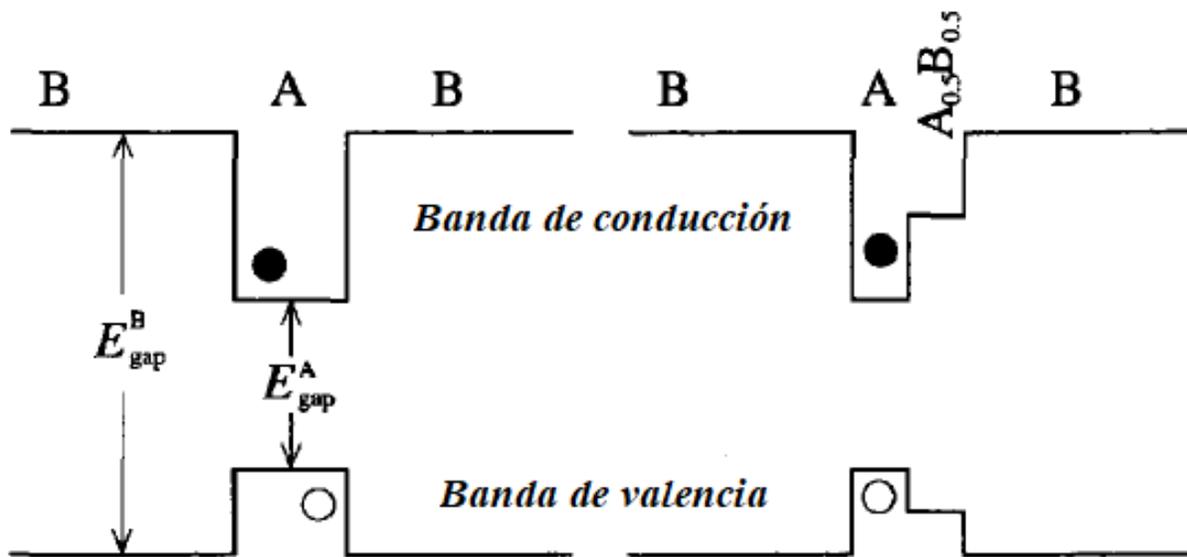


Figura 2.5: Potencial  $V(z)$  unidimensional en las bandas de conducción y de valencia para un pozo cuántico simple típico (izquierda) y un pozo cuántico de escalón (derecha).

En el ejemplo anterior el potencial unidimensional  $V(z)$  representa la discontinuidad de las bandas en la heterounión.

## 2.7. Heteroestructuras

Las heteroestructuras están formadas por múltiples heterouniones, existiendo un gran número de posibilidades. Si una capa muy delgada de material con una banda prohibida muy estrecha A se coloca entre dos capas de un material B con banda prohibida amplia, como se muestra en

la figura 2.5, formando una doble heterounion. Sí la capa  $A$  es lo suficientemente delgada para mostrar propiedades cuánticas, de tal forma que hay un alineamiento de de bandas (Banda de conducción y Banda de valencia) se le llama pozo cuántico simple.

Como podemos ver en 2.5, sí existe un portador de carga en el sistema que sea producido térmicamente de manera intrínseca o extrínseca como resultado de un dopado, este intentara bajar sus energías. Por lo tanto algunos electrones (círculos solidos) o huecos (círculos abiertos) se colectaran en el pozo cuántico. Se pueden incluir capas de semiconductores adicionales en la heteroestructura, por ejemplo, se puede formar un pozo escalón o un pozo asimétrico cuando se incluye una aleación entre los materiales  $A$  y  $B$ .

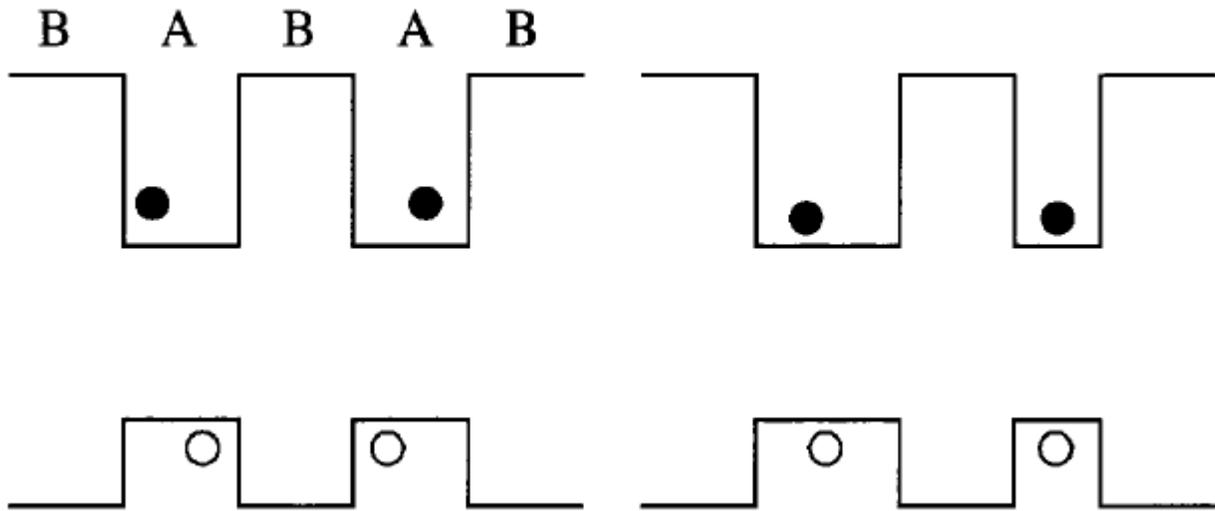


Figura 2.6: Potencial unidimensional  $V(z)$  en la banda de conducción y de valencia para un pozo cuántico simétrico y otro asimétrico.

Pueden llegar a formarse estructuras más complejas, tales como un pozo cuántico doble asimétrico o simétrico y un pozo cuántico múltiple o superred. La diferencia de la última es el grado de interacción entre los pozos cuánticos. En particular un pozo cuántico múltiple muestra la propiedad de unir varios pozos cuánticos simples aislados, mientras que en una superred los pozos cuánticos interactúan.

El motivo por el cual se introducen estructuras complicadas, es por intentar ajustar la pro-

propiedades ópticas y electrónicas de estos materiales para su explotación en diversos dispositivos optoelectrónicos.

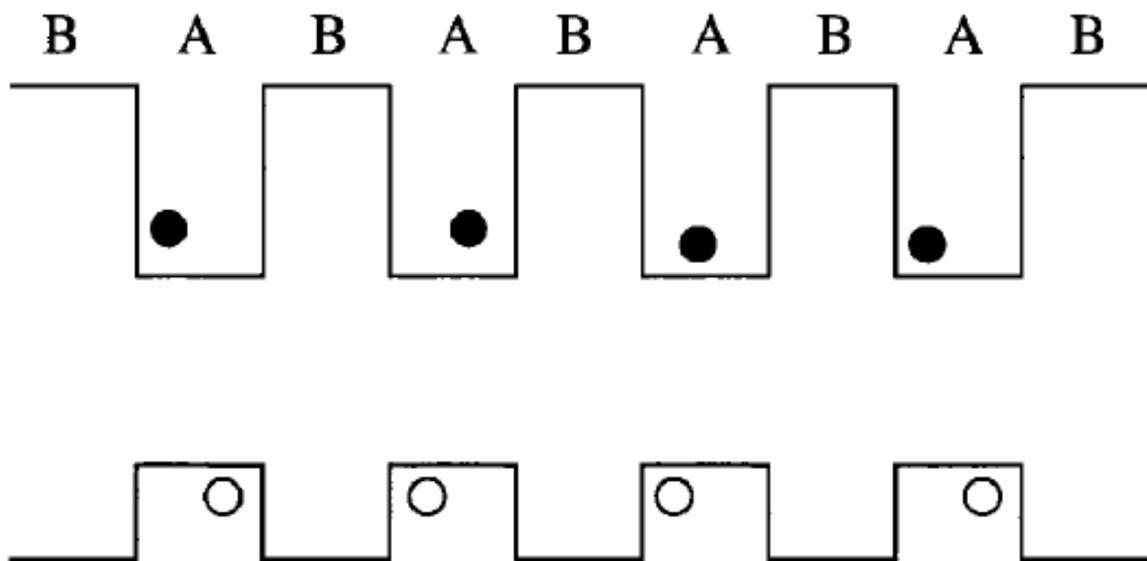


Figura 2.7: Potencial unidimensional  $V(z)$  en la banda de conducción y de valencia para el típico pozo cuántico múltiple o superred.

Todas las figuras ilustradas han sido tipo I, en este tipo de estructuras la banda prohibida de un material se encuentra ubicada enteramente dentro de la banda prohibida más amplia del otro material, la consecuencia de esto es que ningún electrón o hueco cae dentro del pozo cuántico, el cual está dentro de la misma capa del material. De esta manera ambos tipos de portadores de carga, localizados en la misma región de espacio, los cuales hacen una eficiente recombinación. En los sistemas tipo II, las bandas prohibidas de los materiales A y C están alineados de tal manera que un pozo cuántico formado en la banda de conducción y de valencia están en diferentes materiales, esto lleva a los electrones y huecos a ser confinados en diferentes capas de un semiconductor. La consecuencia de esto es que los tiempos de recombinación de electrones y huecos son muy grandes.

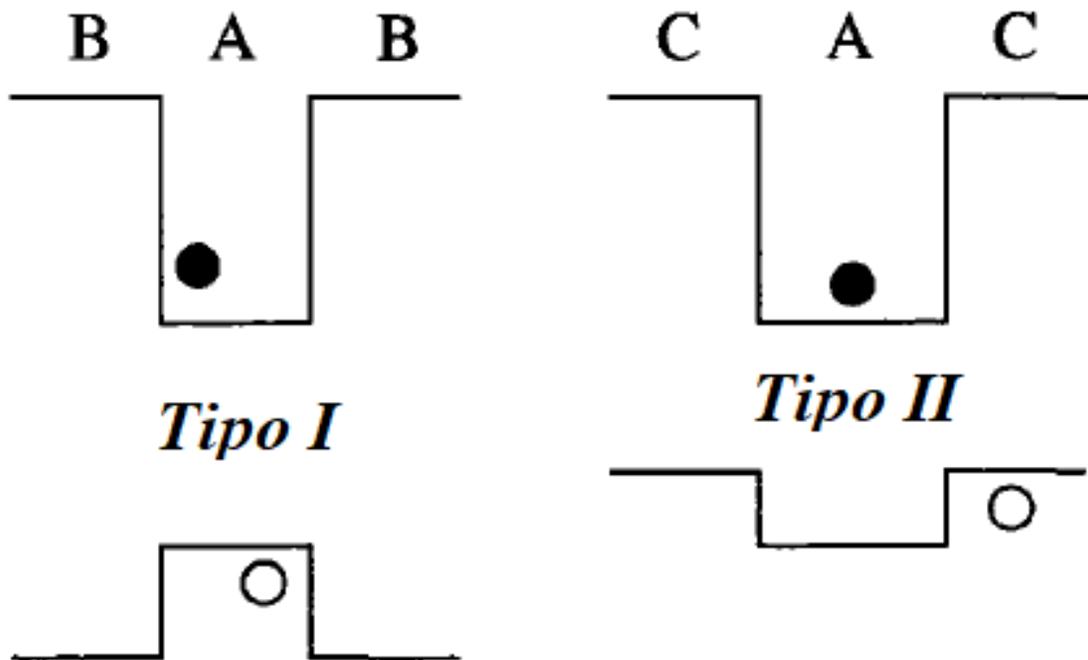


Figura 2.8: Potencial unidimensional  $V(z)$  en la banda de conducción y de valencia para un pozo cuántico tipo I comparado con un sistema tipo II.

## 2.8. Alineamiento de las bandas de energía

Cuando se forman heteroestructuras a partir de poner en contacto materiales semiconductores diferentes surge el problema de determinar la manera en que se disponen las bandas de valencia y de conducción de los mismos una vez que el sistema se encuentra en equilibrio. Claramente, esta disposición debe corresponder a una configuración que minimice la energía libre de la estructura. Se ha definido como *band offset* al coeficiente que determina qué proporción de la diferencia entre los *gaps* de ambos materiales corresponde a la altura de la barrera de potencial que se forma al quedar alineadas las respectivas bandas de valencia, medida en un cierto punto de la zona de Brillouin (típicamente el centro de la misma). De esta forma, la barrera de potencial que se asocia al alineamiento de las bandas de conducción corresponderá a la proporción complementaria. Es decir, si la diferencia energética entre las dos bandas de

valencia alineadas es un 20 % de la diferencia de los gaps, entonces la diferencia energética entre las bandas de conducción alineadas será de un 80 % del valor de la diferencia entre los gaps de los materiales. Se recomienda ver la figura 2.9 [69], que corresponde con una heteroestructura de tipo I que es aquella en la que la alineación de las bandas produce en la misma región de la estructura un pozo de potencial en la banda de conducción y un pozo de potencial en la banda de valencia [70]. Esta es la clase de sistema que nos ocupará de aquí en adelante, considerando que, por la naturaleza de los cristales involucrados, el punto de trabajo en la zona de Brillouin es, precisamente, el centro de la misma.

La determinación del *band offset* es de especial importancia para el estudio del espectro de electrones y huecos en las heteroestructuras. Uno de los enfoques más empleados para la determinación teórica de esta cantidad es la llamada Teoría del Sólido Modelo (con siglas en inglés MST) propuesta por Chris G. Van de Walle [71].

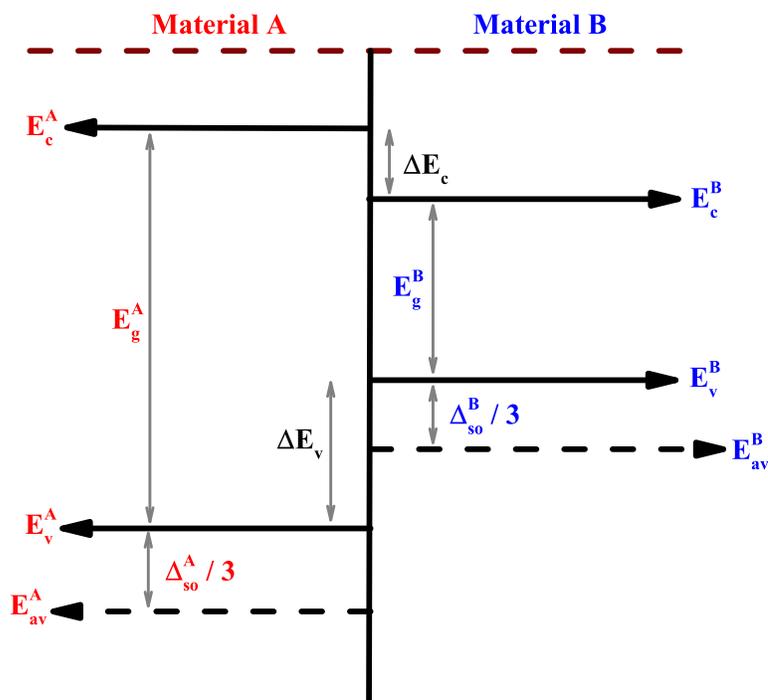


Figura 2.9: Bordes de las bandas entre dos materiales  $A$  y  $B$ .

## 2.9. Ley de Vegard y parámetro de Bowing

Debido a su importancia tecnológica, una correcta predicción de las propiedades ópticas de las aleaciones de nitruros del grupo III es realmente necesaria. Por medio de la ley de Vegard, siendo esta una aproximación o una regla empírica de aproximación, la cual postula, que existe una relación lineal, a temperatura constante, entre la constante de red de una aleación y las concentraciones de los elementos constituyentes. El parámetro de bowing  $b$ , determina la desviación de la predicción de la tendencia lineal, por la ley de Vegard, mediante la ecuación:

$$E_g^{(Al_xGa_{1-x}N)} = E_g(AlN)x + (1 - x)E_g(GaN) - bx(1 - x). \quad (2.12)$$

## 2.10. Efecto de la tensión: Cálculo del *band offset*

Se conoce de la Física de Semiconductores que si un material de esta clase se somete al tensión en su estructura cristalina, la posición de los bordes de las bandas sufre una renormalización, de manera que se modifica el valor del gap energético. En el caso de una heteroestructura, el crecimiento de un material sobre otro que tenga una constante de red diferente provoca una deformación que causa tensiones en el sistema. Estas tensiones son mayores para valores más altos de la diferencia entre las constantes de red. Esto quiere decir, además, que se debe producir una modificación en el alineamiento de las bandas de energía y, por consiguiente, se afectará la determinación del *band offset*.

Los efectos de la tensión pueden ser despreciados en el caso en el que se suponen dos materiales con la misma constante de red o con valores muy cercanos de la misma (aproximadamente con 1 – 3 % de diferencia). En estas circunstancias, la TSM permite determinar el *band offset* de la manera que comentamos a continuación:

Tratando con materiales de simetría de zincblenda, los bordes de las bandas de huecos pesados y ligeros en el punto  $\Gamma$  son degenerados y su posición energética está dada por,

$$E_v = E_{v,av} + \frac{\Delta_{so}}{3} \quad (2.13)$$

donde  $E_{v,av}$  es la energía promedio de la banda de valencia (usualmente determinada por métodos de primeros principios) y  $\Delta_{so}$  es el corrimiento de energía asociado a la interacción espín-órbita (*so*: spin-orbit split-off). Por otra parte, para el borde de la banda de *so* se tiene

$$E_{so} = E_v - \Delta = E_{v,av} - \frac{2\Delta_{so}}{3}. \quad (2.14)$$

El borde de la banda de conducción está dado por,

$$E_c = E_v + E_g \quad (2.15)$$

donde  $E_g$  es el gap de energía. Los valores de la mayoría de estos parámetros se pueden tomar de datos experimentales reportados, excepto el valor de  $E_{v,av}$ . Las discontinuidades del borde de las bandas están expresadas por las relaciones siguientes,

$$\Delta E_v = E_v^B - E_v^A \quad (2.16)$$

$$\Delta E_c = E_c^A - E_c^B \quad (2.17)$$

$$\Delta E_v + \Delta E_c = \Delta E_g \quad (2.18)$$

y las proporciones para las banda de conducción y de valencia, respectivamente, relacionadas con el *band offset* están determinados por las expresiones,

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_g} \quad (2.19)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_g} = 1 - Q_c, \quad (2.20)$$

Si una capa delgada de un semiconductor que forma el pozo de potencial para los portadores es crecida sobre otra capa (de un sustrato que forma la barrera), donde cada una tiene una constante de red distinta entre ellas ( $\alpha_l, \alpha_0$ ), la constante de red de la capa epitaxial tiende a igualarse a la del sustrato buscando reproducir la estructura del mismo. Esto trae como consecuencia la aparición de una tensión biaxial en la zona del pozo (capa epitaxial) en el plano de la dirección de crecimiento. Al observar la figura 2.9, nos damos cuenta que si la constante de red de la capa epitaxial es menor que la del sustrato, se produce en la misma una tensión elongativa o tensil, en tanto que si la constante de red de la capa epitaxial es mayor que la del sustrato, la tensión biaxial en la capa será de tipo compresivo.

La tensión neta en el plano ( $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ ) esta dada por,

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\alpha_0 - \alpha_l}{\alpha_l} \quad (2.21)$$

en tanto que a lo largo de la dirección de crecimiento, la componente de la tensión (valor uniaxial) está dada por  $\varepsilon_{zz}$ ,

$$\varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \quad (2.22)$$

donde  $C_{12}$  y  $C_{11}$  son las constantes de elasticidad. Por otra parte, el sistema sufre una deformación en todo el volumen de la celda unitaria que se expresa como,

$$\varepsilon = \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz} = 2 \left( 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{xx}. \quad (2.23)$$

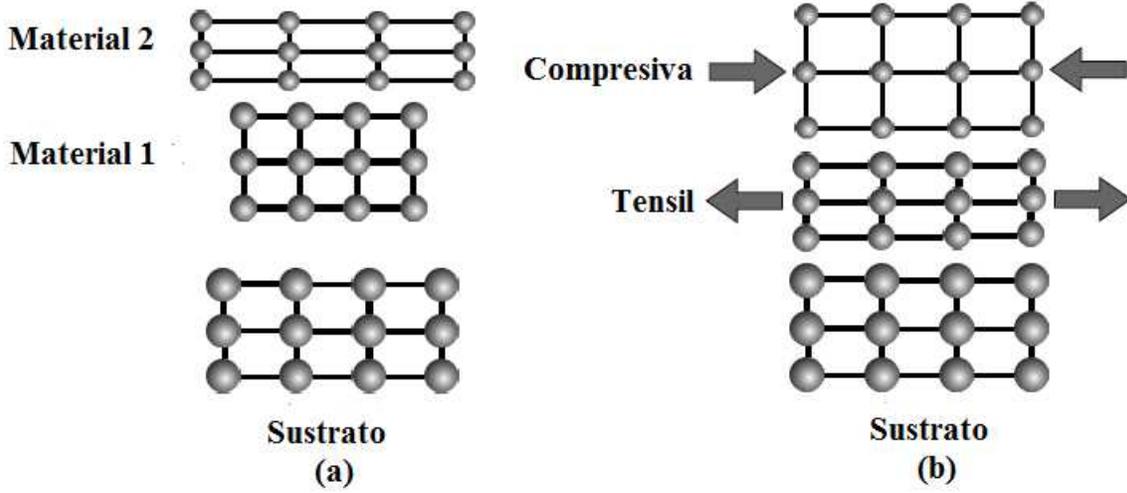


Figura 2.10: Esquema de un sustrato con dos capas con diferentes constantes de red, en (a) las capas no están en contacto, es decir sin tensión y (b) las capas están en contacto con el sustrato y la superior sufre tensión compresiva en tanto que para la otra es de carácter tensil.

En presencia de una tensión biaxial en la capa, el valor del borde de la banda de valencia del material que la constituye se obtiene mediante,

$$E_v = \begin{cases} E_{av} + \frac{\Delta_{so}}{3} + \delta E_{hh}, \varepsilon < 0 \\ E_{av} + \frac{\Delta_{so}}{3} + \delta E_{lh}, \varepsilon > 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

con

$$\delta E_{hh} = 2a_v \left( 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{xx} + b \left( 1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{xx} \quad (2.25)$$

$$\delta E_{lh} = 2a_v \left( 1 - \frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{xx} - b \left( 1 + 2\frac{C_{12}}{C_{11}} \right) \varepsilon_{xx} \quad (2.26)$$

donde  $a_v$  es el llamado potencial de deformación hidrostática de la banda de valencia (*hydrostatic deformation potential*), mientras que  $b$  es el potencial de deformación por corte o cizalladura (*shear deformation potential*) de esa banda. Cuando  $\varepsilon = 0$ , se recupera el máximo de la banda

de valencia del material sin tensión ya discutido arriba (las constantes  $C_{12}$  y  $C_{11}$  ya fueron definidas anteriormente).

Para determinar el valor del borde de la banda de conducción bajo tensión se emplea la expresión,

$$E_c = E_v + E_g + \delta E_c \quad (2.27)$$

donde  $E_g$  es la energía del gap y  $\delta E_c$ , que representa el cambio inducido por la tensión, está dada por,

$$\delta E_c = a_c \varepsilon = 2a_c \left(1 - \frac{C_{12}}{C_{11}}\right) \varepsilon_{xx}, \quad (2.28)$$

donde  $a_c$  es el potencial de deformación de la banda de conducción. Con estas expresiones, las proporciones correspondientes al *band offset* se determina por las mismas expresiones.

Experimentalmente, cuando se crece un sistema con varios pozos cuánticos, se necesita evitar ciertos desajustes generados por las diferencias de los parámetros de las capas, en especial, las constantes de red. Para ello, se utiliza un procedimiento de compensación de la tensión, lo cual hace que la energía elástica en las interfaces disminuya. Esto se logra escogiendo de manera adecuada las concentraciones y los sustratos que se emplean [72]. Sin embargo, en sistemas de uno o dos pozos, no demasiado anchos, y para materiales con diferencias no demasiado grandes en la constante de red, las heteroestructuras se mantienen tensionadas, de ahí la necesidad de un tratamiento como el que desarrollamos aquí.

Otro elemento que debe tenerse en cuenta al tratar de simular sistemas reales es el hecho de que estos son espacialmente finitos. Esto quiere decir que tanto la capa del pozo como las de las barreras sufren los efectos de la tensión. En este caso, el valor de la tensión biaxial en la capa  $\kappa$  viene dado por,

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\alpha_{eq} - \alpha_\kappa}{\alpha_\kappa}, \quad (2.29)$$

donde  $\alpha_\kappa$  es la constante de red de las capas (pozo y barrera) y  $\alpha_{eq}$  es una constante de red equivalente determinada por el ancho y las respectivas constantes de red de las capas presentes en el sistema,

$$\alpha_{eq} = \frac{\sum_{\kappa=1}^{nl} l_\kappa \alpha_\kappa}{\sum_{\kappa=1}^{nl} l_\kappa} \quad (2.30)$$

donde  $nl$  es el número de capas involucradas en la estructura. En el caso de que los sustratos sean muy largos (barreras de los costados), la constante de red equivalente resultará ser la misma que la de los sustratos o barreras.

Con todo esto, la Teoría del Sólido modelo nos da la proporción de las discontinuidades de bordes de banda para la banda de conducción y de valencia.

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_g}; \quad (2.31)$$

$$Q_v = 1 - Q_c, \quad (2.32)$$

con

$$\Delta E_c = \frac{E_c^{barrera} - E_c^{pozo}}{E_g^{barrera} - E_g^{pozo}}, \quad (2.33)$$

y  $E_c^{barrera(poza)}$  Eq. (2.27).

Además, a través de la altura de la barrera de la banda de conducción correspondiente una interface pozo-barrera estará dado por la multiplicación de  $Q_c$  veces la diferencia entre la energía de banda prohibida de la barrera y la del pozo de los materiales.

## 2.11. Propiedades ópticas

Las bandas prohibidas de energía fundamentales de la mayoría de los semiconductores poseen un rango de energía desde 0 hasta 6 eV. Los fotones que poseen suficiente energía son capaces de excitar electrones de la banda de valencia a la banda de conducción. Como resultado de este fenómeno obtenemos un espectro óptico del semiconductor, el cual nos ofrece amplia información de sus propiedades electrónicas. La mayoría de los semiconductores los fotones interactúan con las vibraciones de red y con los electrones que se encuentran localizados en algunos defectos, en consecuencia realizar técnicas ópticas, es útil para el estudio del fenómeno de excitación. Las propiedades ópticas son la base de muchas aplicaciones importantes de los semiconductores, tales como láseres, fotodetectores y LEDs (diodos emisores de luz).

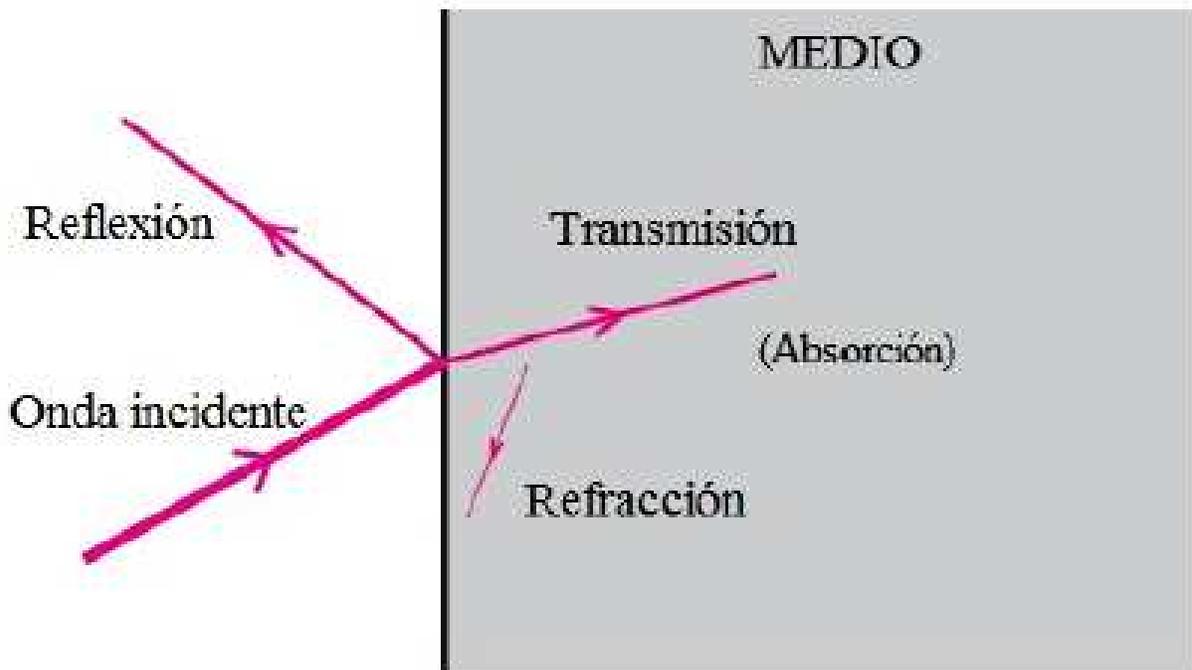


Figura 2.11: Representación esquemática de los principales procesos ópticos. En general para una onda incidente sobre un material se tiene que parte de la luz es reflejada, otra más es transmitida y absorbida y también sufre proceso de refracción así como algunos procesos de segundo orden, no mostrados en la figura.

En 2.11 podemos ver algunos de los procesos ópticos que pueden ocurrir cuando un medio es iluminado por luz. En la superficie de este medio, una fracción de la luz incidente es reflejada y el resto transmitida. Dentro de este medio la radiación puede ser adsorbida o dispersada y también sufre proceso de refracción así como algunos procesos de segundo orden. Algunas de las ondas electromagnéticas absorbidas, pueden ser disipadas como calor o reemitida con diferente frecuencia. Este último proceso es conocido como *Fotoluminiscencia*. En general los procesos ópticos más fuertes son la reflexión y la absorción ya que en estos se involucra el orden más bajo de interacción entre el fenómeno de excitación y las ondas electromagnéticas dentro del medio.

Como lo hemos dicho anteriormente, el objetivo es investigar la respuesta óptica asociada con transiciones ópticas intersubbanda en un sistema de pozo cuántico doble asimétrico. [73, 74] reportaron que es posible buscar la solución de la ecuación de Von Neumann con valores pequeños de intensidad de luz incidente ( $I$ ) para la matriz de densidad,  $\hat{\rho}$ , en términos de una expansión de orden no lineal. Por ejemplo, tal como una aproximación permite obtener expresiones para el coeficiente de absorción óptico intersubbanda de primer y tercer orden, los cuales están dados por:

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega e^2 \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}} \left[ \frac{\rho \hbar \Gamma_{10} |M_{10}|^2}{(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \right], \quad (2.34)$$

y

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = - \sqrt{\frac{\mu_0}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}} \left( \frac{\omega I}{2n_r \varepsilon_0 c} \right) \frac{\rho \hbar \Gamma_{10} |M_{10}|^2}{[(E_{10} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2]^2} \times \left\{ 4|M_{10}|^2 - \frac{|M_{11} - M_{00}|^2 [3E_{10}^2 - 4E_{10}\hbar\omega + \hbar^2(\omega^2 - \Gamma_{10}^2)]}{E_{10}^2 + (\hbar\Gamma_{10})^2} \right\}, \quad (2.35)$$

así, el coeficiente de absorción total resulta de:

$$\alpha^{(T)}(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I). \quad (2.36)$$

La expresión para la contribución lineal del cambio relativo en el índice de refracción es:

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{e^2 \rho |M_{10}|^2}{2 n_r^2 \varepsilon_0} \frac{E_{10} - \hbar \omega}{(E_{10} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2}, \quad (2.37)$$

mientras que la corrección de tercer orden está dada por:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} = & - \frac{|M_{10}|^2}{4 n_r^3 \varepsilon_0} \frac{\rho \mu_0 c I}{[(E_{10} - \hbar \omega)^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2]^2} \\ & \left[ 4(E_{10} - \hbar \omega) |M_{10}|^2 - \frac{(M_{11} - M_{00})^2}{(E_{10})^2 + (\hbar \Gamma_{10})^2} \left\{ (E_{10} - \hbar \omega) \right. \right. \\ & \left. \left. [E_{10}(E_{10} - \hbar \omega) - (\hbar \Gamma_{10})^2] - (\hbar \Gamma_{10})^2 (2E_{10} - \hbar \omega) \right\} \right], \quad (2.38) \end{aligned}$$

siendo la suma de estas dos contribuciones el cambio relativo total del índice de refracción,  $\Delta^{(t)}n(\omega, I)/n_r$ .

En estas expresiones  $E_{10} = E_1 - E_0$  representa la transición de la diferencia de energía entre la inicial  $E_0$  y la final  $E_1$  de los estados permitidos,  $e$  es la carga elemental,  $\mu_0$  es la permeabilidad magnética en el vacío,  $\varepsilon_0$  es la permitividad dieléctrica del espacio libre; y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío.  $\Gamma_{10}$  es la transición asociada de la razón de amortiguamiento,  $\rho$  es la densidad de portadores involucrados en la transición y  $n_r = \sqrt{\varepsilon_r}$  es el índice de refracción del material en la región activa de la estructura. Las cantidades  $M_{ij} = \langle \psi_i | z | \psi_j \rangle$  son los elementos de matriz de dipolo correspondientes a una polarización en dirección  $z$ .



# Capítulo 3

## Resultados

En este capítulo presentamos los resultados del cálculo de los estados de portadores de carga en pozos cuánticos dobles asimétricos de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  en su fase cúbica, para lo cual consideramos los efectos de tensión en la red cristalina con la intención de investigar la importancia de estos, tanto en la estructura electrónica como en propiedades ópticas de interés tales como el coeficiente de absorción y el cambio relativo del índice de refracción. En estos casos, se determinarán las contribuciones lineales y las no lineales de tercer orden, asociadas al efecto de radiación resonante de láser incidente. Para este fin presentamos primero el *estado del arte* o las generalidades del problema; el efecto de considerar, o no, la tensión en la estructura electrónica del sistema, con énfasis en el estado base  $E_0$  y el primer estado excitado  $E_1$ , los cuales determinan la magnitud de la transición energética fundamental. Presentamos el modelo de cálculo y los parámetros empleados según aparecen en la literatura. Así mismo, reportamos los resultados del cálculo de los elementos de matriz del momento dipolar eléctrico, tanto el de la polarización no permanente asociado a la transición principal  $|M_{10}|^2$ , como del factor de asimetría  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , ambos variando como funciones del ancho del pozo de la izquierda  $L_{lw}$  y del ancho de la barrera central  $L_b$ . Con esta información se establecerán las características de las propiedades ópticas de interés.

### 3.1. Generalidades

Como se comentó en el capítulo introductorio, los compuestos de GaN and AlN y sus aleaciones  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  han sido ampliamente investigados dada la importancia de sus propiedades electrónicas, en particular por la presencia de una banda prohibida ancha, la cual los hace idóneos para aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos del rango visible [45–47]. Este tipo de materiales se encuentran en forma de cristales en dos diferentes formas alotrópicas, las cuales son: Wurzita (Hexagonal) y zincblenda (cúbica). Esta última tiene la ventaja de dar origen a dispositivos de respuesta óptica en los cuales la eficiencia cuántica interna no se ve reducida por los campos eléctricos asociados con las polarizaciones espontánea y piezoeléctrica [45, 48, 49]. Debido a dichas características, las heteroestructuras de baja dimensión formadas por el sistema semiconductor cúbico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  poseen una ventaja desde el punto de vista tecnológico. Estas nanoestructuras se producen y caracterizan por diferentes métodos [41, 42, 46, 47, 50–54].

Las principales características del espectro electrónico de los compuestos puros GaN y AlN tales como la energía de la banda prohibida y la relación de Vegard que establece su dependencia con la composición de Al en la aleación ( $x$ ), han sido determinadas experimental y teóricamente [53, 55–57]. Además, existe una diferencia entre las constantes de red de estos dos materiales, la cual puede dar lugar a la aparición de tensión en las heteroestructuras basadas en los mismos. Debe mencionarse que el efecto de red tensionada ha sido ya considerado en heteroestructuras cúbicas de nitruros. Por ejemplo Rojas-Briseño *et al.* estudiaron las propiedades de los excitones para perfiles de potencial de pozos dobles escalonados, teniendo en cuenta también la masa efectiva dependiente de la posición [43, 44]. Por otra parte, Grady y Bayram reportaron una simulación de un transistor efecto de campo de alta movilidad electrónica basado en  $c\text{-AlGa}\text{N}/\text{GaN}$  [58].

Las propiedades ópticas de sistemas cuánticos de baja dimensión basados en nitruros del grupo III se han investigado ampliamente. No es posible mencionar en este documento la amplia

lista de referencias relacionadas con este tema. De manera que sólo se mencionan como muestra ilustrativa la referencia de Kouhi [59], quien investigó la absorción óptica en puntos cuánticos esféricos tomando en cuenta el efecto de campo eléctrico. La emisión luminiscente en nanocables core-shell en un sistema AlGaIn/GaN, fase wurzita, fue reportada por Namvari y colaboradores [54, 60]. Un número de efectos que tienen influencia sobre estas propiedades, tales como la no parabolicidad, orientación cristalina, polarización, entre otros; también han sido reportados [39, 40, 61].

La configuración de pozos cuánticos semiconductores dobles ha sido objeto de estudio durante mucho tiempo. En particular, la configuración de pozos cuánticos dobles asimétricos muestra que regiones de diferentes anchos dan la posibilidad de una respuesta óptica intersubbanda significativa debido a la presencia de polarizaciones no-permanentes, asociadas a las contribuciones no nulas al momento dipolar eléctrico de los elementos de matriz no diagonales, como resultado de la ausencia de paridad definida de las correspondientes funciones de onda. En este contexto, la contribución proveniente de la respuesta no lineal puede tener un rol no despreciable, como se reporta en las referencias [62–64]. Por este motivo Sun *et al.*, proponen pozos cuánticos dobles asimétricos (ADQW, por sus siglas en inglés) de GaAs/AlGaAs [65] y con material en su fase wurzita de la heteroestructura GaN/AlGaIn [66] como posibles fuentes de regímenes láser asociados a transiciones Raman intersubbanda, con una ganancia aproximada de  $400 \text{ cm}^{-1}$ . Por otro lado, H. R. Hamedi discutió la dinámica del electrón en pozos cuánticos dobles asimétricos de GaAs/AlGaAs impulsado por dos láseres ortogonales de onda estacionaria [67], en tanto F. Ungan *et al.* investigaron las propiedades eléctricas y ópticas de un doble pozo simétrico  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{N}_y\text{As}_{1-y}/\text{GaAs}$  considerando efectos de láser intenso y campo eléctrico externo para inducir asimetría en un perfil de potencial [68].

T. Wecker *et al.* reportaron el crecimiento de c-AlGaIn/GaN ADQW utilizando la epitaxia de haces moleculares de radiofrecuencia y plasma asistido y estudiaron los niveles de energía por medio de espectrometría de excitación fotoluminiscente [41]. Poco tiempo después el mismo

grupo de investigación reportó la fabricación de c-AlGaN/GaN ADQW, variando la longitud de la barrera entre pozos mientras se ajustan los anchos de los pozos cuánticos y midiendo la correlación del tiempo de decaimiento de portadores en el sistema [42]. Esta clase de sistemas es, precisamente, el objeto de nuestro interés en esta tesis doctoral. Así, nos dedicaremos a reportar la investigación teórica de la estructura de niveles de energía de varias configuraciones de pozos cuánticos asimétricos dobles de tipo c-AlGaN/GaN, los cuales incluyen diferentes alturas de las barreras, junto con distintos anchos de los pozos de potencial. Como derivación directa de esta investigación seremos capaces de evaluar elementos de la respuesta óptica intersubbanda en la forma de los coeficientes de absorción y del cambio relativo del índice de refracción.

### 3.2. Cálculo de estructura electrónica

Los estados cuánticos de la banda de conducción en el sistema bajo estudio se determinan a partir de la solución de la ecuación de masa efectiva para la función envolvente de variación suave, asociada al Hamiltoniano,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[ \frac{1}{m_{e,\kappa}^*(z)} \frac{d}{dz} \right] + V(z), \quad (3.1)$$

Donde  $m_{e,\kappa}^*(z)$  y  $V(z)$  son la masa efectiva del electrón -dependiente de la posición- y el potencial de confinamiento asociado al alineamiento relativo de las bandas de los materiales constituyentes (GaN en los pozos y  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en las barreras), dado por la siguiente expresión (ver Fig. 3.1 para la descripción):

$$V(z) = \begin{cases} V_{x_l}, & -L_\infty/2 \leq z < -L_{wl} - L_b/2 \\ 0, & -L_{wl} - L_b/2 \leq z < -L_b/2 \\ V_{x_b}, & -L_b/2 \leq z < L_b/2 \\ 0, & L_b/2 \leq z < L_b/2 + L_{rw} \\ V_{x_r}, & L_b/2 + L_{rw} \leq z \leq L_\infty/2, \end{cases} \quad (3.2)$$

En nuestro esquema de cálculo, las soluciones de la ecuación diferencial mencionada arriba se obtienen a partir de proponer la función de onda como un desarrollo de Fourier sobre un conjunto completo de funciones  $\phi_n(z)$  que, en nuestro caso, corresponden al problema de un pozo cuántico rectangular de barreras infinitas con un ancho  $L_\infty$  -suponiendo que  $L_\infty$  es mucho más grande que la región del pozo cuántico-, como lo proponen Xia and Fan [75]. De esta manera, la solución se escribe en la forma

$$\Psi(z) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{L_\infty}} \sin \left[ \frac{n\pi}{L_\infty} z + \frac{n\pi}{2} \right]. \quad (3.3)$$

Plantear la solución en la forma (3.3) implica la necesidad de realizar la diagonalización de una matriz Hamiltoniana. Este procedimiento proporciona los autovalores de energía, que son los que buscamos para la energía, así como los coeficientes del desarrollo que determinan los estados ligados de interés. Aunque en el caso de los perfiles de potencial seccionalmente constantes las soluciones se pueden dar en forma analíticas exacta para  $\Psi_n(z)$ , estos métodos numéricos han probado ser rápidos, baratos y fáciles de implementar, además de ser indicados cuando a nuestros perfiles rectangulares se les superponen funciones de energía potencial asociadas a fuentes externas, casos en los cuales las soluciones analíticas o son complicadas (en la forma de funciones especiales) o simplemente no existen. Aquí se pueden mencionar, por ejemplo, los efectos de campos aplicados: eléctricos, magnéticos o de láser intenso no resonante. Por demás, buscando garantizar una eficiencia computacional, hemos logrado un buen grado de exactitud cuando la sumatoria se extiende hasta  $m = 1, \dots, 200$  [64].

En la figura (3.1) se presentan a modo de ilustración el perfil de potencial, la posición energética de los dos primeros niveles y las correspondientes densidades de probabilidad en un pozo cuántico doble asimétrico del sistema considerado. Los resultados con efecto de tensión incluido y sin tensión aparecen combinados en el mismo gráfico con el propósito de comparar. Es significativo notar que para esta configuración, que contempla composiciones de Al en las barreras izquierda, central y derecha de 0,4, 0,3, y 0,45 respectivamente, aunque las diferencias

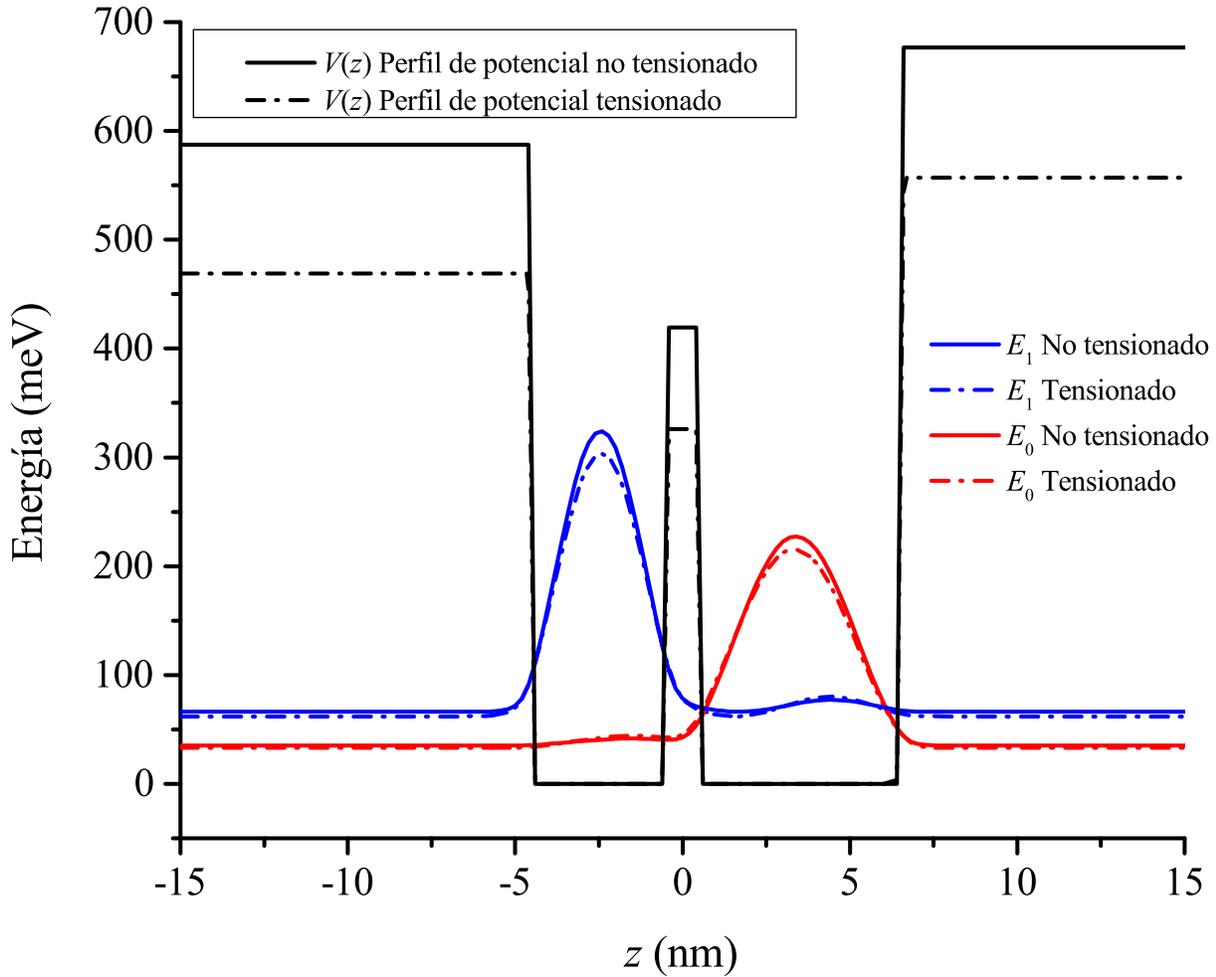


Figura 3.1: Representación del perfil de potencial y la densidad de probabilidad en un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  de estructura de zincblenda, con y sin efectos de tensión, así como los dos primeros estados ligados -representados por la línea roja para el estado básico ( $E_0$ ) y azul para el primer estado excitado ( $E_1$ ). En la configuración que se muestra, el ancho del pozo izquierdo es de  $L_{lw} = 4$  nm, el ancho de la barrera se ha establecido de 1 nm y el ancho del pozo de la derecha está fijo en 6 nm. Ver en el texto los detalles de los valores de la concentración de aluminio en las barreras

Cuadro 3.1: *Parámetros utilizados en este trabajo del material semiconductor zinc blenda GaN and AlN.*

Parámetro	GaN	AlN	Parámetro	GaN	AlN
$a_0$ (nm)	0.452 <sup>a</sup>	0.437 <sup>b</sup>	$\varepsilon$	9.44 <sup>c</sup>	8.07 <sup>c</sup>
$E_g$ (eV)	3.302 <sup>d</sup>	5.99 <sup>c</sup>	$C_{11}$ (GPa)	293 <sup>c</sup>	304 <sup>c</sup>
$\Delta_0$ (eV)	0.017 <sup>e</sup>	0.019 <sup>e</sup>	$C_{12}$ (GPa)	159 <sup>c</sup>	160 <sup>c</sup>
$a_v$ (eV)	-5.20 <sup>a</sup>	-4.90 <sup>e</sup>	$m_e^*$ ( $m_0$ )	0.193 <sup>b</sup>	0.316 <sup>b</sup>
$b$ (eV)	-2.20 <sup>a</sup>	-1.70 <sup>e</sup>	$E_{v,av}$ (eV)	0.00 <sup>f</sup>	-0.80 <sup>f</sup>

Referencias: <sup>a</sup> [76], <sup>b</sup> [56], <sup>c</sup> [41], <sup>d</sup> [13], <sup>e</sup> [77], <sup>f</sup> [78]

entre las constantes de red de las aleaciones (se tiene  $a_{eq} \approx 0,445$ ) y el GaN arrojan una variación compresiva de esta última de apenas un 1,5 %, las diferencias en las alturas de las barreras con y sin tensión son significativas. Sin embargo, esto no se traduce en cambios similares para los valores de las energías de los dos niveles más bajos, confirmando en este caso una influencia débil de la tensión en el sistema. No obstante, veremos más adelante que esta situación se puede modificar cuando tratamos con pozos de anchos más pequeños.

### 3.3. Cálculo de propiedades ópticas

La óptica no lineal es el estudio de los fenómenos que ocurren como consecuencia de la modificación de las propiedades ópticas de un material por la presencia de luz. Típicamente, la luz de un láser es suficientemente intensa como para modificar dichas propiedades. El inicio de la óptica no lineal se toma como el descubrimiento de la generación del segundo armónico por Franken *et. al* (1961). El fenómeno se llama “No lineal” en el sentido de que ocurre cuando la respuesta del material a un campo óptico aplicado depende de manera no lineal sobre la fuerza del campo óptico. Por ejemplo la generación del segundo armónico se da como resultado de la respuesta atómica que se adapta cuadráticamente con la intensidad del campo óptico aplicado. Por consecuencia, la intensidad de la luz generada en la frecuencia del segundo armónico tiende a incrementar en forma proporcional al cuadrado de la intensidad de la luz del láser aplicado,

al tiempo que el máximo de esa intensidad se localiza a una frecuencia que es el doble de la incidente. De manera que para hacer una mejor descripción de la no linealidad óptica, consideraremos que el momento dipolar por unidad de volumen, o la polarización  $\tilde{P}(t)$  depende de la intensidad  $\tilde{E}(t)$  de un campo óptico aplicado. En el caso de la óptica convencional (lineal) la polarización inducida depende linealmente de la intensidad del campo eléctrico de manera que puede describirse como:

$$\tilde{P}(t) = \epsilon_0 \chi^{(1)} \tilde{E}(t), \quad (3.4)$$

donde la constante de proporcionalidad  $\chi^{(1)}$  se conoce como susceptibilidad lineal y  $\epsilon_0$  es la permitividad dieléctrica en el espacio libre. Pero en la óptica no lineal la respuesta óptica puede describirse expresando la polarización como una serie de potencias de la amplitud del campo incidente:

$$\tilde{P}(t) = \epsilon_0 [\chi^{(1)} \tilde{E}(t) + \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t) + \chi^{(3)} \tilde{E}^3(t) + \dots], \quad (3.5)$$

$$\equiv \tilde{P}^1(t) + \tilde{P}^2(t) + \tilde{P}^3(t) \quad (3.6)$$

Las cantidades  $\chi^{(2)}$  y  $\chi^{(3)}$  son las susceptibilidades no lineales de segundo y tercer orden respectivamente. En general estas dependen de la frecuencia de los campos aplicados, y bajo la suposición de una respuesta instantánea, se tomarían como constantes.

Así,  $\tilde{P}^{(2)}(t) = \epsilon_0 \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t)$  es la contribución no lineal de segundo orden y  $\tilde{P}^{(3)}(t) = \epsilon_0 \chi^{(3)} \tilde{E}^3(t)$  la contribución no lineal de tercer orden a la polarización eléctrica. En los materiales de bulto, las interacciones ópticas no lineales de segundo orden se presentan solamente en cristales no-centrosimétricos, por lo que materiales centrosimétricos tipo zincblenda no presentan estas de interacciones ópticas. Por otro lado las interacciones ópticas no lineales de tercer orden pueden ocurrir tanto en materiales centrosimétricos como en materiales no-centrosimétricos.

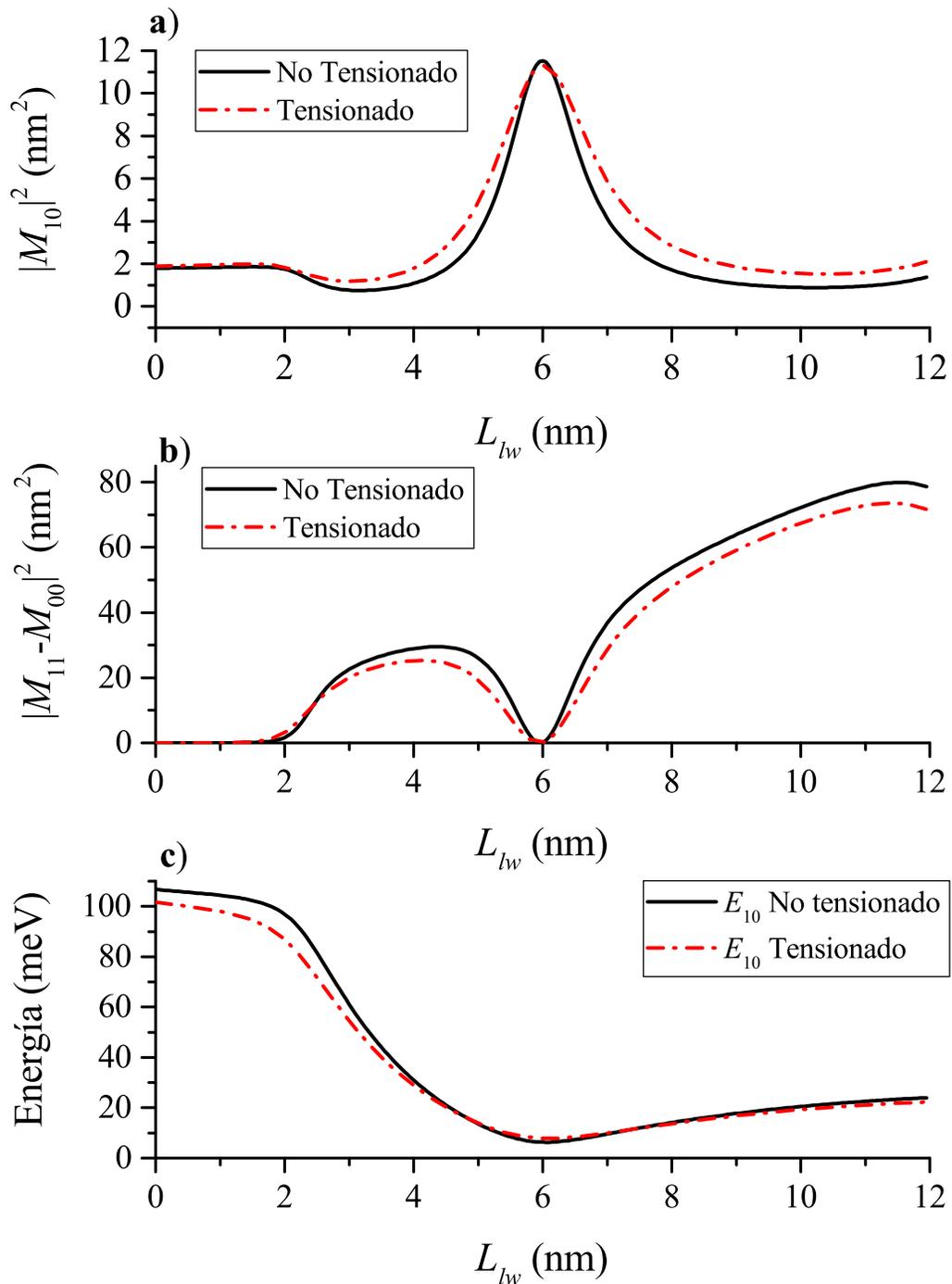


Figura 3.2: a) El cuadrado de los elementos de matriz del momento dipolar,  $|M_{10}|^2$ , b) Factor de polarización de asimetría  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , c) Diferencia principal de energía intersubbanda ( $E_{10}$ ); representados como funciones del ancho del pozo de la izquierda  $L_{lw}$ ; para un pozo cuántico doble asimétrico de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  tomando en cuenta las estructuras tanto tensionadas (línea segmentada) como sin tensionar (línea sólida).

Sin embargo, en el caso de las heteroestructuras la respuesta no lineal puede presentarse independientemente de si los materiales constituyentes son centro-simétricos o no, debido a la ruptura de la invariancia traslacional causada por la presencia de intercaras. Si el proceso de fabricación de sistema tales intercaras se disponen de modo tal que la función envolvente de variación suave  $\Psi(z)$  carezca, a su vez, de alguna simetría invalidante, se garantizará que para ciertas polarizaciones de la luz incidente la respuesta óptica de la estructura tenga componentes no lineales de segundo orden significativas. Entonces, nosotros presentaremos aquí una investigación teórica de los efectos de tensión en los coeficientes de absorción y de cambio relativo del índice de refracción para pozos cuánticos dobles asimétricos fabricados de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  en su fase zincblenda. Buscamos establecer una comparación de los resultados obtenidos incorporando la tensión con aquellos en los que el sistema se supone completamente relajado. Como podemos notar de la figura (3.1), la asimetría en el sistema está presente a lo largo de toda la estructura. Esto ocurre para los anchos del pozo y para las alturas de las barreras. Como dijimos arriba, las concentraciones de aluminio Al ( $x$ ) utilizadas para el lado izquierdo, derecho y central son  $x = 0.4, 0.3,$  and  $0.45$ ; y se mantienen de esa manera durante todo el trabajo. Cabe señalar que todas las concentraciones de Al están dentro del régimen de banda prohibida directa.

Para los compuestos binarios, la masa efectiva del electrón y los parámetros necesarios restantes para AlN y GaN cúbicos aparecen en la Tabla 1 [42, 53], y los valores correspondientes para concentraciones particulares de Al para compuestos ternarios se calculan por medio de la ley de Vegard [79]. En particular, en el caso de de la energía de banda prohibida del  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , la relación cuadrática modificada incluye el parámetro de bowing  $B = 0.7$  eV [57]. Los restantes valores seleccionados para ser los parámetros de entrada en la evaluación de los coeficientes ópticos son:  $\Gamma_{10} = 1/T$  dado por  $T = 0,15 \times 10^{-12}$  s, y la densidad de bulto de portadores es  $\rho = 1,0 \times 10^{24} \text{ m}^{-3}$  [59]. La intensidad del láser incidente se toma como  $I = 0,2 \times 10^{10} \text{ W/m}^2$ .

Primeramente, analicemos las características de las energías de transición y de las contribuciones del momento dipolar eléctrico. Estas cantidades constituyen, como se comentó en el

capítulo anterior, los elementos necesarios para evaluar los coeficientes ópticos. Inicialmente, se fija el ancho del pozo cuántico de la derecha en 6 nm y el ancho de la barrera central en 1 nm y se procede a variar el ancho del pozo cuántico de la izquierda,  $L_{lw}$ . La figura 3.2 presenta los cuadrados de los elementos de matriz dipolares eléctricos  $|M_{10}|^2$ , correspondientes a la transición intersubbanda principal (desde el estado base hasta el primer estado excitado), así como el factor  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , asociado a la polarización permanente neta. También se muestra la diferencia de energía principal ( $E_{10}$ ); todas estas cantidades como funciones de  $L_{lw}$  considerando y despreciando los efectos de tensión en el sistema.

Para el caso de  $|M_{10}|^2$  observamos un máximo en  $L_{lw} = 6$  nm, el cual se obtiene cuando las funciones de densidad de probabilidad están casi simétricamente localizadas, como se muestra en la figura 3.3 b). Cuando los efectos de tensión son considerados este máximo cambia de posición ligeramente hacia  $L_{lw} = 6,3$  nm y su magnitud se incrementa. En términos generales, esta contribución no permanente a la polarización resulta ser más alta en el caso tensionado con la excepción de pequeños intervalos de valores de  $L_{lw}$ .

Con respecto a  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , el comportamiento es contrario al de  $|M_{10}|^2$ . Su valor se incrementa cuando las funciones de onda se alejan de la simetría como se observa en las figuras 3.3 a) 3.3 c). Esto está relacionado claramente con la tendencia de las funciones de onda a tener paridad definida cuando la distribución espacial del perfil del potencial lo es. Al calcular, en esos casos, la integral del momento dipolar, el integrando tiende a ser una función impar y de ahí la reducción hacia cero de los elementos de matriz diagonales. La asimetría del potencial previene tal situación. Observamos que para  $L_{lw} < 2$  nm la estructura se comporta como un solo pozo cuántico y cuando  $L_{lw} \sim 6$  nm se comporta como si los electrones estuvieran igualmente localizados en el pozo cuántico y por esta razón las densidades de probabilidad son casi simétricas y la magnitud de  $|M_{11} - M_{00}|^2$  decrece aunque no llega a ser cero. Cuando la tensión se hace presente, los valores obtenidos son menores, con la excepción de un pequeño intervalo de valores de  $L_{Lw}$  por debajo de 2,5 nm.

La diferencia energética  $E_{10}$  disminuye conforme aumentamos  $L_{lw}$  hasta que los anchos de

ambos pozos cuánticos llegan a ser prácticamente iguales salvo un ligero incremento cuando el ancho del pozo cuántico de la izquierda se hace mayor. El valor mínimo ocurre precisamente cuando ambas longitudes son iguales. Esta configuración asemeja el comportamiento de un pozo cuántico doble simétrico, aunque en realidad permanece siendo asimétrica dadas las diferentes alturas de la barreras de potencial derecha e izquierda. Como se esperaba, la influencia de la tensión es más fuerte para estructuras de pozos más estrechos. La diferencia entre los valores con tensión y sin tensión pueden alcanzar los 10 meV, el cual implica algunos THz, cuando hablamos de una respuesta óptica.

Una configuración distinta corresponde a la que mantiene fijo el ancho del pozo cuántico de la izquierda en 4 nm y el ancho del pozo cuántico de la derecha de 6 nm y procede a cambiar el ancho de la barrera central,  $L_b$ . En la figura 3.4 presentamos la correspondiente variación del cuadrado del elemento de matriz no diagonal  $|M_{10}|^2$ , del momento dipolar eléctrico, así como del factor  $|M_{11} - M_{00}|^2$  y de la diferencia de energía principal ( $E_{10}$ ) como funciones de  $L_b$  con y sin inclusión de efectos de tensión en la red cristalina de la heteroestructura. Como discutimos anteriormente, el comportamiento de  $|M_{10}|^2$  y  $|M_{11} - M_{00}|^2$  está estrechamente relacionado con las características del confinamiento espacial de los portadores en los estados de la banda de conducción del pozo cuántico doble asimétrico. La cantidad  $|M_{10}|^2$  exhibe la variación de decremento prevista; es decir, en este caso las funciones de onda de los estados tienden a localizarse dentro de la región de cada pozo -con contribuciones contrarias en signo que tienden a anular el valor total de la integración a lo largo de la dirección  $z$ , acercándose al caso límite de dos pozos cuánticos no correlacionados cuando  $L_b$  es suficientemente grande. Vale la pena resaltar que, en este caso, los valores obtenidos con la inclusión de tensión en la red son mayores que aquellos que se obtienen bajo condiciones no tensionadas, para el rango considerado de  $L_b$ .

Con respecto al factor  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , tiene lugar el comportamiento opuesto. Esta cantidad crece como resultado del incremento de la longitud de la barrera central, lo cual refleja el hecho de que el primer estado excitado se extiende a lo largo de toda la estructura en comparación

con el estado base, que se localiza en el pozo más ancho. Aquí, los cálculos que involucran a la tensión producen valores ligeramente más pequeños, fundamentalmente porque fijar los anchos y variar el espesor de la barrera central implica un crecimiento continuo del ancho total de la estructura. Por otro lado, la dependencia de  $E_{10}$  muestra un decrecimiento monótono relacionado precisamente con el comportamiento de los estados involucrados y el efecto reductor de la tensión se acentuó para mayores valores de  $L_b$ . Tal disminución termina en un valor estable que corresponden a la diferencia asociada con la transición del sistema hacia una estructura con dos pozos cuánticos simples desacoplados. Vale la pena decir aquí que la influencia de la tensión es más notoria en estas circunstancias dado que en la medida que los pozos comienzan a desacoplarse, el sistema electrónico resultante va asemejándose a pozos aislados, con un menor ancho efectivo y ya hemos constatado que la tensión en la red causa mayores modificaciones en las capas más estrechas.

En las figuras 3.3 y 3.6 presentamos las contribuciones lineal y de tercer orden al coeficiente de absorción óptica intersubbanda asociado con la transición energética fundamental y al coeficiente de cambio relativo del índice de refracción, respectivamente, como funciones de la energía del fotón incidente para varios valores del ancho del pozo cuántico de la izquierda. En ambos casos, también se presentan los valores totales de estas cantidades. Es posible observar un comportamiento de corrimiento hacia el rojo en la posición de la energía de los picos de absorción resonante y mínimos y máximos de  $\Delta n/n_r$  hasta  $L_{lw} = 6$  nm. Así mismo, se aprecia un ligero corrimiento hacia el azul para valores mayores de dicha longitud. Todo esto es congruente con la variación antes discutida de la energía de transición  $E_{10}$  que se muestra en la figura 2(c). Como puede verse también en la misma figura, la influencia de la tensión es más fuerte en el caso de pozos cuánticos más estrechos, con un corrimiento prominente hacia el rojo en la repuesta correspondiente a  $L_{lw} = 2$  nm.

La amplitud del coeficiente de absorción óptica está determinada por la competencia entre la variación de la frecuencia resonante  $\omega_{10} = E_{10}/\hbar$  y -principalmente- la de los elementos dipolares de matriz no diagonales, con respecto a  $L_{lw}$ . Así, el incremento de  $|M_{10}|$  compensa la reducción

en  $\omega_{10}$ . De acuerdo con esto, el valor más alto de la contribución no lineal está dominado por el máximo en  $|M_{10}|$  observado para  $L_{lw} = 6$  nm en la figura 3.1 a). Una discusión análoga puede hacerse en relación con los resultados para el coeficiente del cambio relativo del índice de refracción que aparece en la figura 3.6.

El efecto de la variación del ancho de la barrera de energía potencial central  $L_b$  -para los arreglos de tamaños de pozo fijos sobre el coeficiente de absorción óptica y de cambio relativo del índice de refracción se muestra en las figuras 3.7 y 3.8. Ahí, las respuestas ópticas fueron graficadas como función de la energía del fotón incidente para situaciones con efectos de tensión y sin efectos de tensión. La dependencia discutida anteriormente de  $E_{10}$  (Fig. 3.4 c)) es la razón por la que existe un ligero corrimiento hacia el rojo de ambas señales, así como el elemento para justificar una influencia pronunciada de la tensión para barreras centrales más anchas. Es significativo también el reforzamiento relativo de las contribuciones no lineales debido a la inclusión de efectos de redes tensionadas, para los valores mayores del ancho de dicha barrera. Ese fenómeno puede entenderse con la ayuda de la variación correspondiente del elemento de matriz de dipolo eléctrico,  $|M_{10}|^2$ , representada en la figura 3.4 a). De cualquier manera, es resaltable que el incremento en  $L_b$  causa la reducción total de la contribución no lineal con o sin tensión, la cual se debe a la ya mencionada variación del factor  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , como se muestra en la figura Fig. 3.4 b). Igualmente, las propiedades que se observan para el cambio relativo del índice de refracción relativo en la figura 3.8 pueden ser explicadas bajo los mismos argumentos discutidos arriba.

Finalmente, es necesario comentar acerca de las características cuantitativas de los coeficientes ópticos calculados. En promedio, hemos obtenido valores para el máximo de amplitud del pico de absorción por debajo de  $10 \text{ m}^{-1}$  (siendo en la mayoría de los casos mas pequeño que  $3 \text{ m}^{-1}$ ). Estos valores están por debajo de los reportados anteriormente por Ungan *et al.* para un pozo cuántico doble GaAs-AlGaAs (utilizando un valor de la intensidad incidente dos veces mayor a la nuestra) [80]. Aunque se requerirá una exploración más detallada, es posible concluir a partir de nuestros resultados que la absorción de luz intersubbanda por electrones en

estructuras cúbicas GaN/AlGaN de tipo ADQW puede ser más débil comparada con otras que no están constituidas por semiconductores III-N con el mismo tipo de red cristalina.

Además, hemos mostrado que el efecto de la tensión en la red es más pronunciado para pozos cuánticos estrechos, con lo cual induce una reducción de la amplitud de la respuesta óptica en general. Sin embargo, esta influencia es más débil para estructuras de pozos cuánticos de mayor extensión espacial y, en estos casos, pasa lo contrario: el efecto de la tensión nos lleva a un ligero incremento de la amplitud del pico de absorción resonante. En el caso de tener fijas las dimensiones de las regiones de los pozos de potencial, se encontró que la inclusión de la tensión en los cálculos nos lleva a un incremento de la amplitud de las propiedades ópticas investigadas. Así, la tensión es un elemento que no se debería excluir si se desea obtener descripciones cuantitativas precisas de la respuesta óptica en sistemas cúbicos ADQW basados en nitruros.

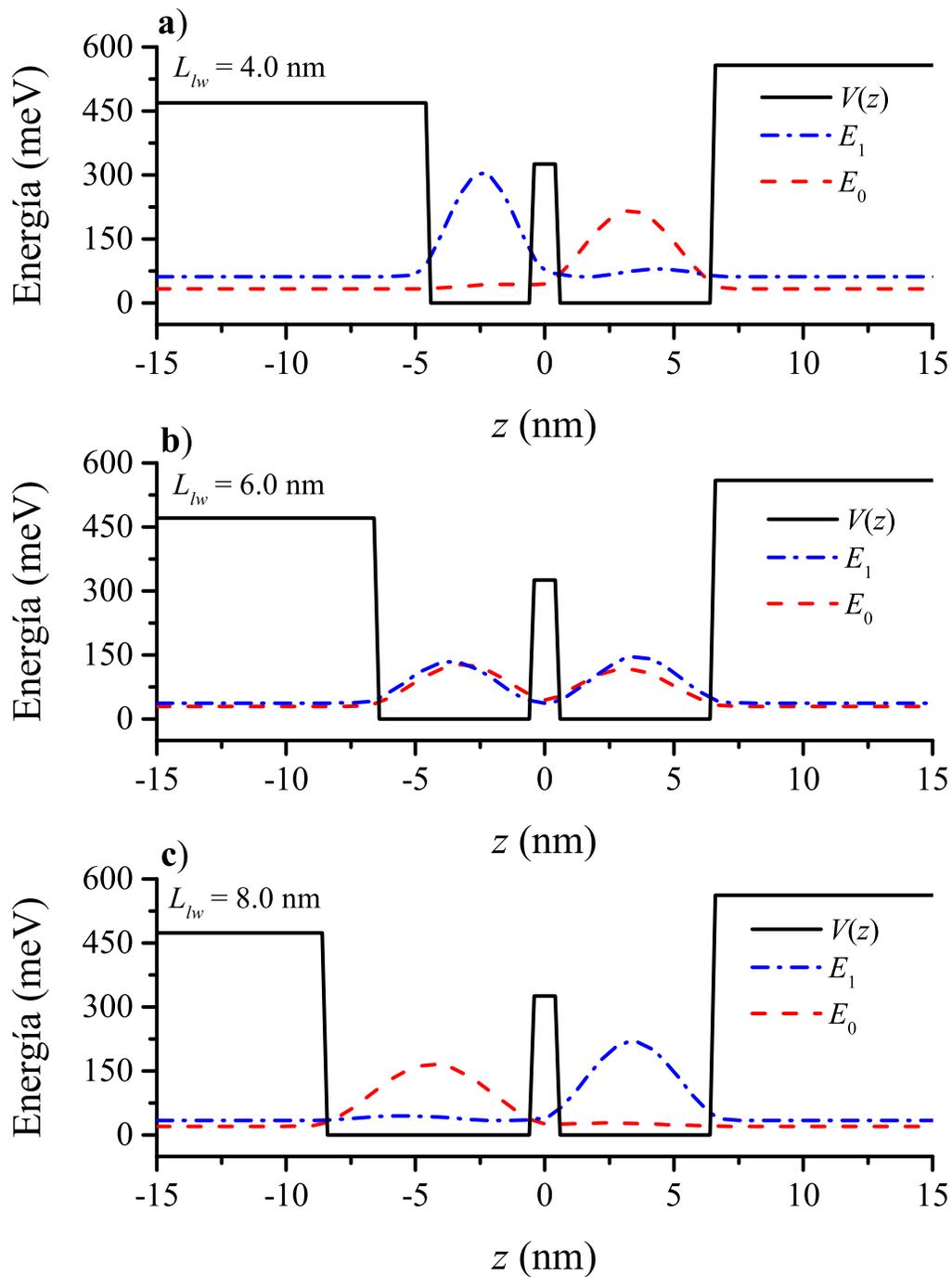


Figura 3.3: Densidad de probabilidad electrónica del estado base y el primer estado excitado, para diferentes valores de ancho del pozo cuántico de la izquierda ( $L_{lw}$ ), considerando el efecto de tensión: a) 4 nm, b) 6 nm y c) 8 nm. El ancho del pozo de la derecha se mantuvo en 6 nm.

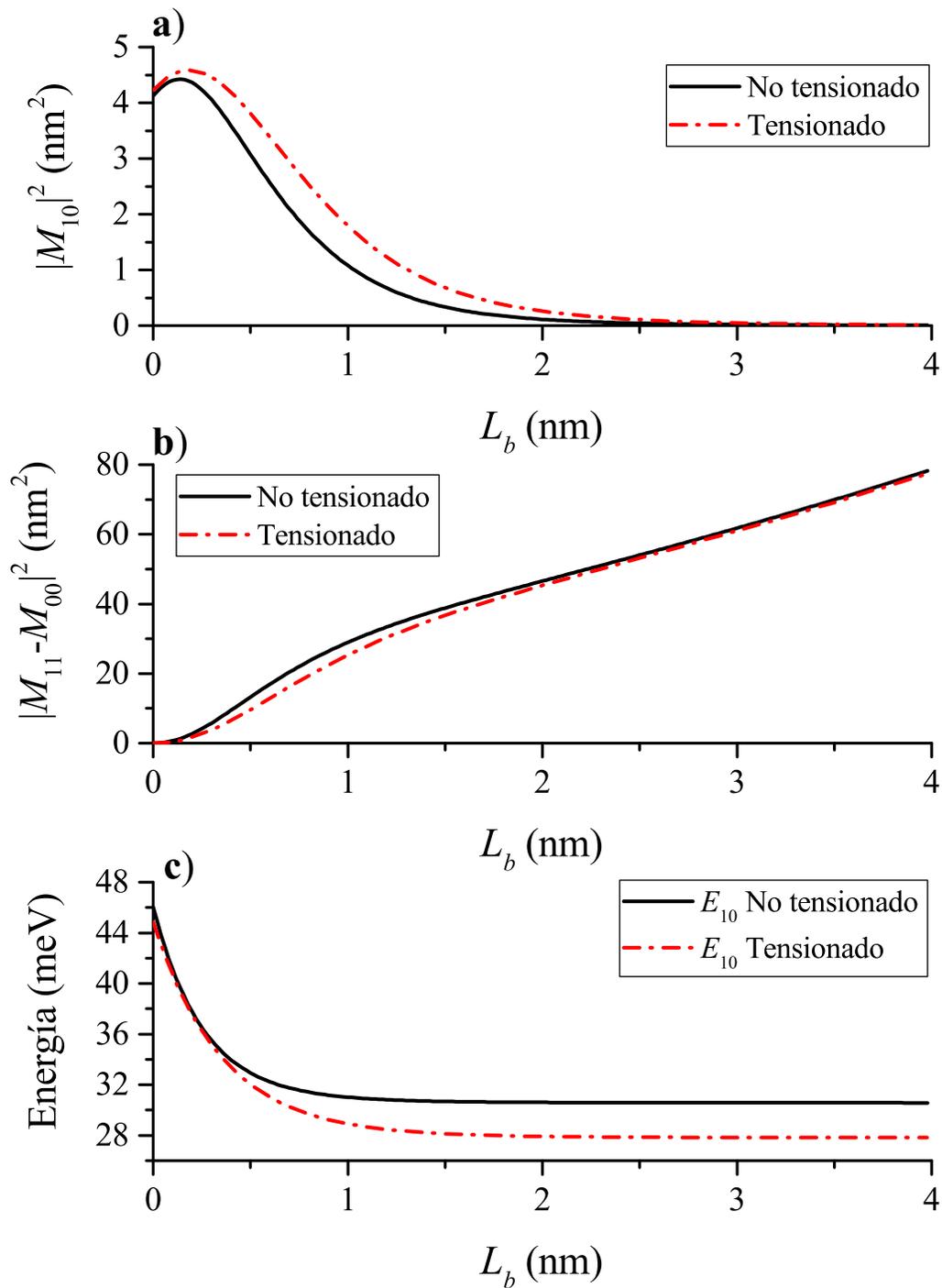


Figura 3.4: a) Cuadrado de los elementos de matriz dipolares no diagonales,  $|M_{10}|^2$ , asociados a la transición energética principal; b) factor de asimetría de polarización permanente  $|M_{11} - M_{00}|^2$ , y c) la diferencia principal de energía ( $E_{10}$ ) para un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  con red tensionada (línea segmentada) y relajada (línea sólida). Las cantidades se reportan como funciones de la longitud de la barrera central  $L_b$ .

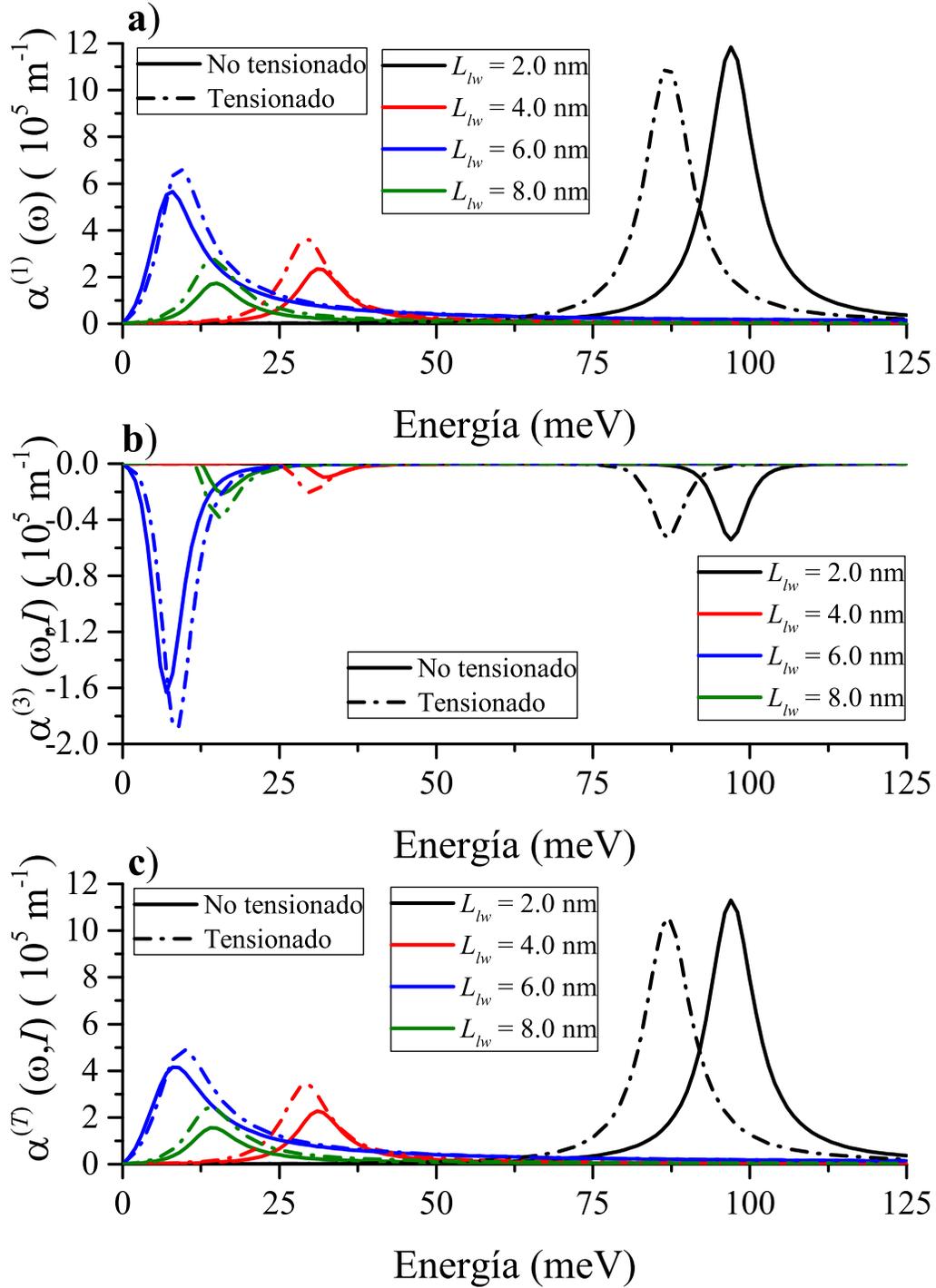


Figura 3.5: a) El coeficiente de absorción lineal  $\alpha^{(1)}(\omega)$ , b) la corrección de tercer orden  $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ , y c) coeficiente de absorción total  $\alpha^{(T)}(\omega, I)$  para un pozo cuántico doble asimétrico con tensión (línea segmentada)  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ , y sin tensión (línea sólida). Las cantidades se presentan como funciones de la energía del fotón incidente para varios valores del ancho del pozo cuántico de la izquierda,  $L_{lw}$ .

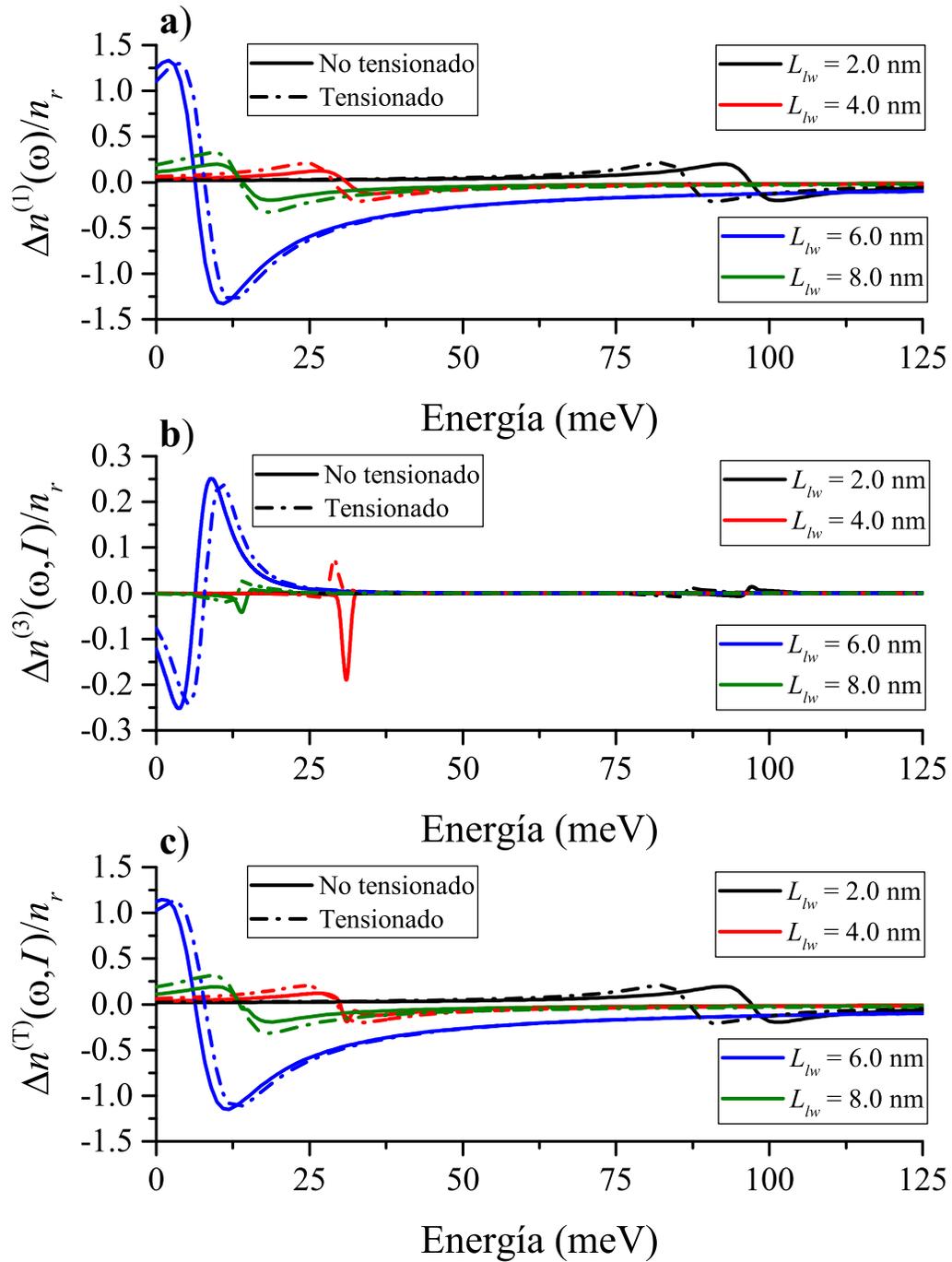


Figura 3.6: a) El coeficiente de cambio relativo del índice de refracción lineal,  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ , b) la corrección de tercer orden  $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n_r$ , y c) el cambio relativo del índice de refracción total  $\Delta n^{(T)}(\omega, I)/n_r$  para un pozo cuántico doble asimétrico doble  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  con tensión (línea segmentada) y sin tensión (línea sólida). Las cantidades se presentan como funciones de la energía del fotón incidente para varios valores del ancho del pozo cuántico de la izquierda,  $L_{lw}$ .

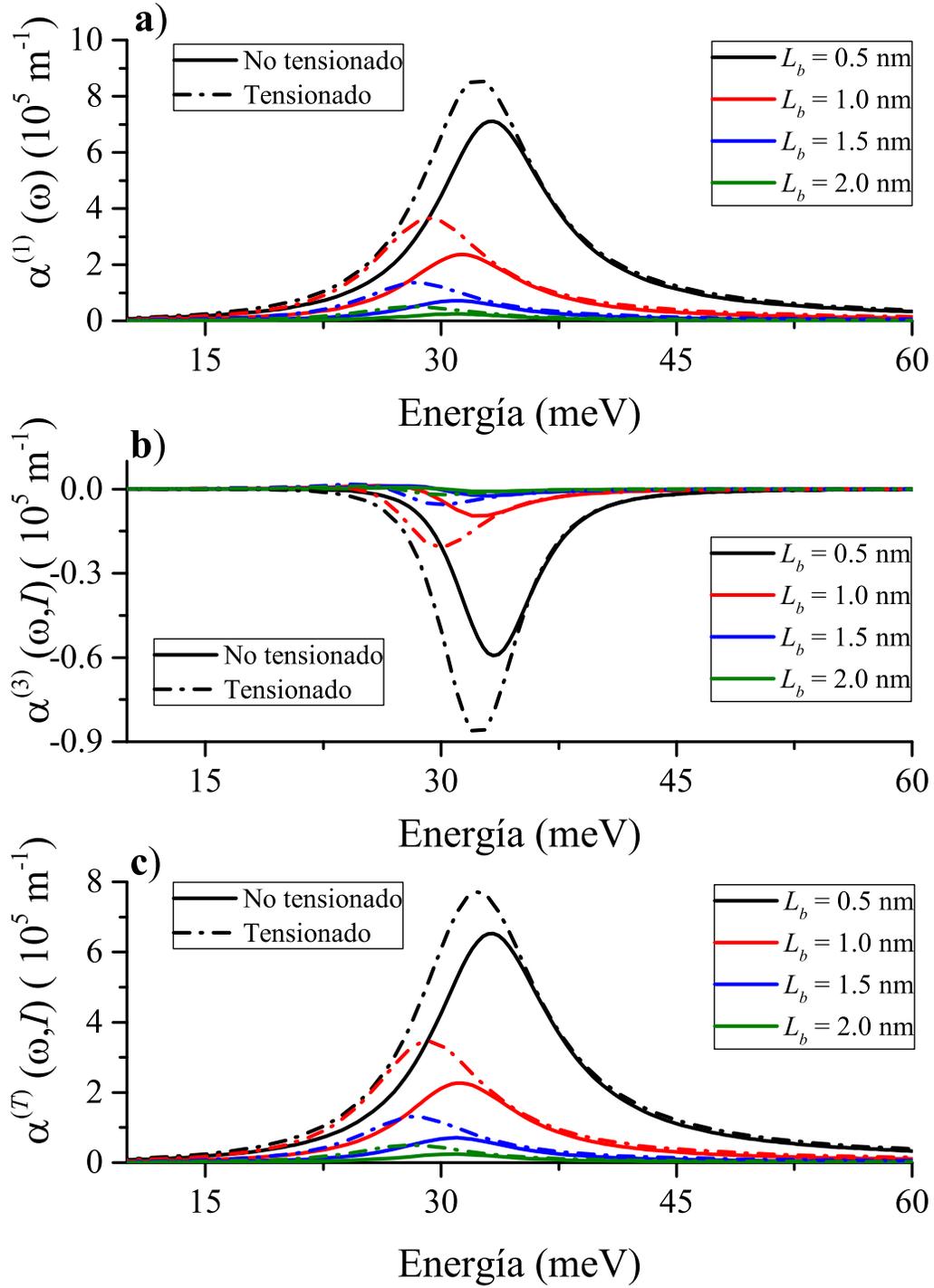


Figura 3.7: a) El coeficiente de absorción óptica lineal  $\alpha^{(1)}(\omega)$ , b) la contribución no lineal de tercer orden  $\alpha^{(3)}(\omega, I)$ , y c) el coeficiente de absorción total  $\alpha^{(T)}(\omega, I)$  para la transición principal intersubbanda en un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  tensionado (línea segmentada) y sin considerar tensión (línea sólida). Las cantidades se reportan como funciones del ancho de la barrera central,  $L_b$ .

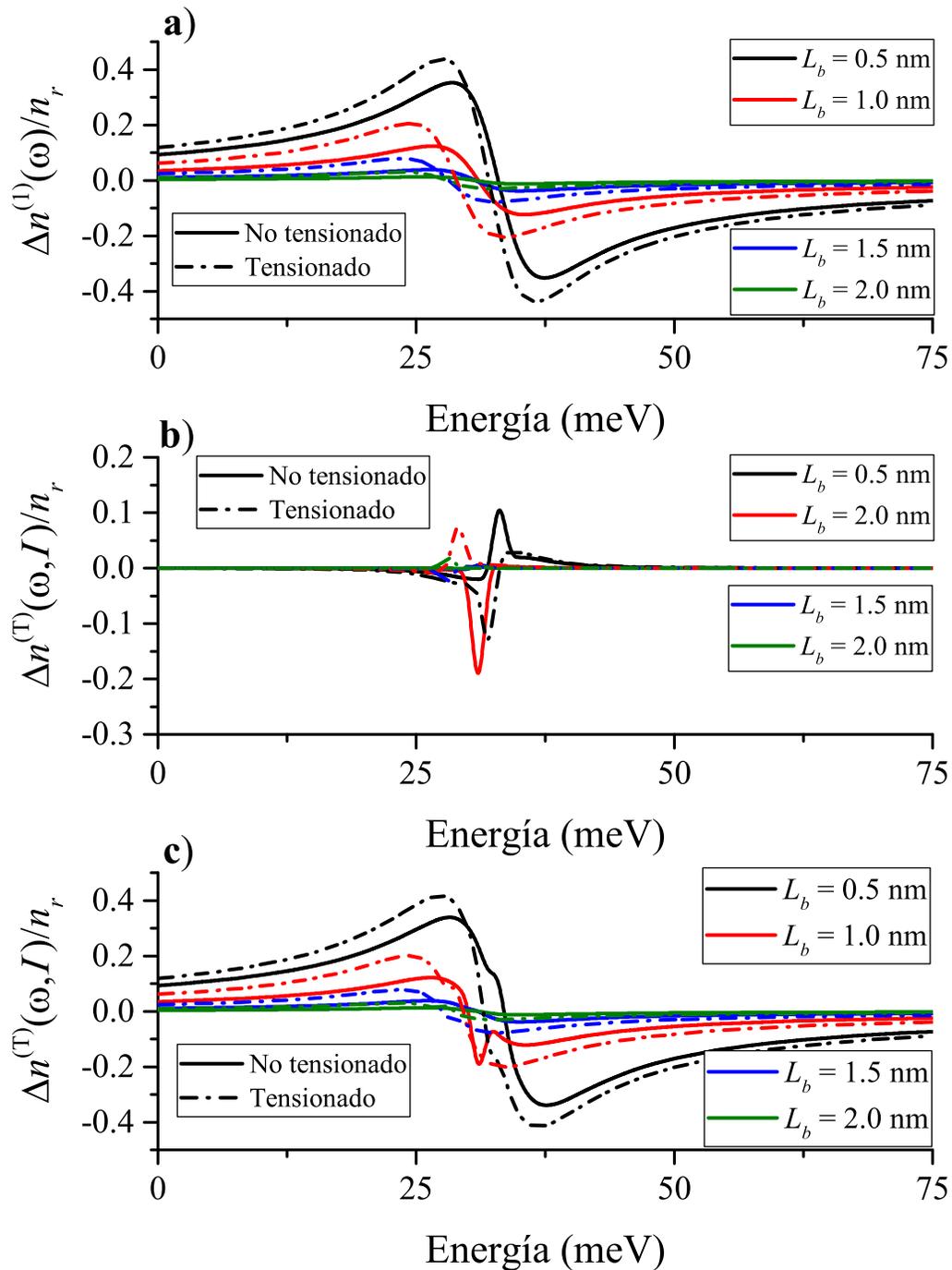


Figura 3.8: a) Parte lineal del coeficiente de cambio relativo del índice de refracción,  $\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r$ , b) contribución no lineal de tercer orden  $\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n_r$ , y c) coeficiente de absorción total  $\Delta n^{(T)}(\omega, I)/n_r$  relacionado con la transición electrónica intersubbanda  $E_0 \rightarrow E_1$  en un pozo cuántico doble asimétrico  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  tensionado (línea segmentada) y sin tensionar (línea sólida). Las cantidades se reportan como funciones del ancho de la barrera central,  $L_b$ .



## Conclusiones y recomendaciones

En este trabajo hemos estudiado teóricamente los estados de la banda de conducción y, con esa información, hemos determinado algunas características de la respuesta óptica intersubbanda en pozos cuánticos dobles asimétricos del sistema GaN/AlGaN con estructura cristalina de zincblenda. En la investigación se hizo uso de las aproximaciones de masa efectiva y de banda parabólica (parabolizidad), con la inclusión de los efectos de tensión debidos a la diferencia existente entre las constantes de red de los materiales involucrados. Las propiedades ópticas consideradas fueron la absorción de luz y el cambio relativo del índice de refracción relativo, incorporando tanto la parte lineal de la respuesta como las contribuciones no lineales de tercer orden provenientes del desarrollo de la polarización dieléctrica del sistema. Los resultados presentados fueron obtenidos para diferentes configuraciones geométricas: Fijando el ancho de la barrera de potencial central y el tamaño de uno de los dos pozos cuánticos al tiempo que se modifica la anchura del segundo pozo; o fijando las dimensiones de ambos pozos y variando la anchura de la barrera central.

De acuerdo con esto podemos concluir que

1. A pesar de que las diferencias entre las constantes de la red del  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  y del GaN son pequeñas para los valores elegidos de la fracción molar de Al en las barreras de potencial, la incorporación de la influencia de la tensión en la red puede llevar a correcciones

cuantitativas de importancia a la hora de buscar una adecuada precisión en los valores.

2. Se verifica que la influencia de la tensión es más fuerte cuando la región de confinamiento de los portadores de carga se ubica en una capa delgada, en comparación a cuando está más extendida espacialmente.
3. La modificación de la geometría del pozo cuántico doble asimétrico conduce a cambios en la respuesta óptica que se reflejan tanto en la aparición de corrimientos hacia el rojo o el azul de la señal que pueden alcanzar desde algunos hasta varias decenas de meV de amplitud. Esto constituye un elemento de interés que permitiría la aplicación de los sistemas estudiados en la optoelectrónica en el régimen de los THz.
4. Se detecta que en la configuración que permite variar la anchura de la barrera de potencial central el efecto de la tensión refuerza la contribución no lineal a la respuesta óptica, principalmente cuando dicha barrera es suficientemente estrecha.

En términos generales, se puede plantear a modo de recomendación el estudio de la estructura de estados de electrones y también de huecos, en pozos cuánticos doble asimétricos del sistema c-GaN/AlGaIn, con otras configuraciones tanto composicionales como geométricas. Al mismo tiempo, sería de interés efectuar el cálculo de otras cantidades vinculadas a la respuesta óptica intersubbanda no lineal de estas estructuras como es el caso de la ganancia Raman y la generación de armónicos de segundo y tercer orden, como se ha hecho ya en la literatura para estas y otras heteroestructuras basadas en semiconductores III-V no nitrogenados.

# Bibliografía

- [1] M. Cardona P. Y. Yu. *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties*. Graduate Texts in Physics. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 4 edition, 2010.
- [2] C. Hermann B. Sapoal. *Physics of Semiconductors*. Springer-Verlag New York, 1 edition, 1995.
- [3] E. Rosencher and B. Vinter. *Optoelectronics*. Cambridge University Press, english edition edition, 2004.
- [4] A. Sandhu. K. Takahashi, A. Yoshikawa, editor. *Wide Bandgap Semiconductors; Fundamental Properties and Modern Photonic and Electronic Devices*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [5] C. Bayram and R. Liu. Quantum Sensing and Nano Electronics and Photonics XIV - Polarization-free integrated gallium-nitride photonics. In Manijeh Razeghi, editor, *SPIE Proceedings*, volume 10111, 2017.
- [6] S. P. DenBaars and D. Feezell and K. Kelchner and S. Pimputkar and C. Pan and C. Yen and S. Tanaka and Y. Zhao and N. Pfaff and R. Farrell and M. Iza and S. Keller and U. Mishra and J. S. Speck and S. Nakamura. Development of gallium-nitride-based light-

- emitting diodes (LEDs) and laser diodes for energy-efficient lighting and displays. *Acta Materialia*, **61**:945, 2013.
- [7] D.G. Pacheco-Salazar, S.F. Li, F. Cerdeira, E.A. Meneses, J.R. Leite, L.M.R. Scolfaro, D.J. As, and K. Lischka. Growth and characterization of cubic  $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$  epilayers on two different types of substrate. *J. Cryst. Growth*, **284**:379, 2005.
- [8] S. Nakamura, S. Pearton, and G. Fasol. *The Blue Laser Diode*. Berlin:Springer-Verlag, 2000.
- [9] Cheng-Hsueh Lu, Yi-Chang Li, Yen-Hsiang Chen, Sheng-Chieh Tsai, Yen-Lin Lai, Yun-Li Li, and Chuan-Pu Liu. Output power enhancement of InGaN/GaN based green light-emitting diodes with high-density ultra-small In- rich quantum dots. *J. Alloys Compd.*, **555**:250–254, (2013).
- [10] J. Rass (eds.) M. Kneissl. *III-Nitride Ultraviolet Emitters: Technology and Applications*. Springer Series in Materials Science 227. Springer International Publishing, 2016.
- [11] A.Y. Cho and J.R. Arthur. Molecular beam epitaxy. *Progress in Solid State Chemistry*, 10:157 – 191, 1975.
- [12] H.J. Lewerenz, P. L., F. Schuth, Tim S. Zhao, Heinz Frei, Allen J Bard, R. Collazo, N. Dietz, K. Domen, S. Fiechter, T. Hannappel, A. Hellman, M. Koper, Nathan Lewis, Frederick MacDonnell, Arthur J. Nozik, Bruce Parkinson, Krishnan Rajeshwar, G. D. Scholes, K. Sivula, and H. Ogasawara. *Photoelectrochemical Water Splitting: Materials, Processes and Architectures*. RSC Energy and Environment Series. Royal Society of Chemistry, 2013.
- [13] H. Morkoç. *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices, Materials Properties, Physics and Growth (Handbook of Nitride Semiconductors and Devices (VCH))*, volume 1. Wiley-VCH, 1 edition, 2008.

- [14] T. Lei, M. Fanciulli, R. J. Molnar, T. D. Moustakas, R. J. Graham, and J. Scanlon. Epitaxial growth of zinc blende and wurtzitic gallium nitride thin films on (001) silicon. *Appl. Phys. Lett.*, 59(8):944–946, 1991.
- [15] P. Başer, S. Elagoz, D. Kartal, and H.D. Karkı. Hydrogenic impurity states in zinc-blende  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  in cylindrical quantum well wires. *Superlattice. Microst.*, 49:497–503, (2011).
- [16] H. Mejri I. Saidi, L. Bouzaïene and H. Maaref. Refractive index changes in AlGa $\text{N}/\text{GaN}$  heterostructure field-effect transistors. *Mater. Sci. Eng., C*, 28:831–834, (2008).
- [17] V.R. Velasco H. Rodríguez-Coppola, J. Tutor. Optical properties of (001) Ga $\text{N}/\text{AlN}$  quantum wells. *Microelectron. J.*, 37:12–18, (2006).
- [18] S.V. Novikov, A.J. Kent, and C.T. Foxon. Molecular beam epitaxy as a growth technique for achieving free-standing zinc-blende Ga $\text{N}$  and wurtzite  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 63(2):25 – 39, 2017.
- [19] W.Y. Pang, I. Lo, S. Wu, Z.X. Lin, C.H. Shih, Y.C. Lin, Y.C. Wang, C.H. Hu, and G. Z.L. Hsu. Growth of wurtzite and zinc-blende phased gan on silicon (100) substrate with sputtered aln buffer layer. *Journal of Crystal Growth*, 382:1 – 6, 2013.
- [20] S. V. Novikov, C. T. Foxon, and A. J. Kent. Zinc-blende (cubic) gan bulk crystals grown by molecular beam epitaxy. *physica status solidi c*, 8(5):1439–1444, 2011.
- [21] S Yoshida. Growth of cubic iii-nitride semiconductors for electronics and optoelectronics application. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 7(3):907 – 914, 2000.
- [22] H. Vilchis, V.D. Compeán-García, I.E. Orozco-Hinostroza, E. López-Luna, M.A. Vidal, and A.G. Rodríguez. Complex refractive index of  $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$  thin films grown on cubic (100)Ga $\text{N}/\text{MgO}$ . *Thin Solid Films*, 626:55 – 59, 2017.

- [23] I.E. Orozco Hinostriza, M. Avalos-Borja, V.D. Compeán García, C. Cuellar Zamora, A.G. Rodríguez, E. López Luna, and M.A. Vidal. Tuning emission in violet, blue, green and red in cubic GaN/InGaN/GaN quantum wells. *J. Cryst. Growth*, **435**:110 – 113, 2016.
- [24] V.D. Compeán García, I.E. Orozco Hinostriza, A. Escobosa Echavarría, E. López Luna, A.G. Rodríguez, and M.A. Vidal. Bulk lattice parameter and band gap of cubic  $\text{In}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{N}$  (001) alloys on MgO (100) substrates. *J. Cryst. Growth*, **418**:120 – 125, 2015.
- [25] V. K. Lazarov, J. Zimmerman, S. H. Cheung, L. Li, M. Weinert, and M. Gajdardziska-Josifovska. Selected Growth of Cubic and Hexagonal GaN Epitaxial Films on Polar MgO(111). *Phys. Rev. Lett.*, **94**:216101, 2005.
- [26] A. Erol. *Dilute III-V Nitride Semiconductors and Material Systems: Physics and Technology*. Springer Series in Materials Science. Springer, 1st edition. edition, 2010.
- [27] M. Henini. *Dilute Nitride Semiconductors*. Elsevier Science, 2005.
- [28] A. Stock and M. Blix. Notiz über die einwirkung von ammoniak auf borsulfid. *Ber.*, **36**(1):319–320, (1903).
- [29] Fr. Fichter and A. Spengel. Die reaktionen des aluminiumnitrids. *Z. anorg. Chem.*, **82**(1):192–203, (1913).
- [30] F. Fischer and F. Schröter. über neue metall-stickstoff-verbindungen und ihre stabilität an der hand des periodischen systems. *Ber.*, **43**(2):1465–1479, (1910).
- [31] W. C. Johnson, J. B. Parsons, and M. C. Crew. Nitrogen compounds of gallium III. Gallic nitride. *J. Phys. Chem.*, **36**:2561, (1932).
- [32] Y. Kuwahara, T. Fujii, T. Sugiyama, D. Iida, Y. Isobe, Y. Fujiyama, Y. Morita, M. Iwaya, T. Takeuchi, S. Kamiyama, I. Akasaki, and H. Amano. GaInN-Based Solar Cells Using Strained-Layer GaInN/GaN Superlattice Active Layer on a Freestanding GaN Substrate. *Appl. Phys. Express*, **4**(2):021001, 2011.

- [33] M. Mori, Sh. Kondo, S. Yamamoto, T. Nakao, M. Iwaya, Tetsuya T., S. Kamiyama, I. Akasaki, and H. Amano. Concentrating Properties of Nitride-Based Solar Cells Using Different Electrodes. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 52(8S):08JH02, 2013.
- [34] J. Wang and G. Tang and L. Pu and X.S. Wu. InN growth on BaTiO<sub>3</sub> (111) substrates: A first-principles study. *J. Cryst. Growth*, **395**:98 – 103, 2014.
- [35] L. Liu and L. Wang and D. Li and N. Liu and L. Li and W. Cao and W. Yang and C. Wan and W. Chen and W. Du and X. Hu and Z. C. Feng. Influence of indium composition in the prestrained InGaN interlayer on the strain relaxation of InGaN/GaN multiple quantum wells in laser diode structures. *J. Appl. Phys.*, **109**:073106, 2011.
- [36] O. Moshe and D. H. Rich and B. Damilano and J. Massies. Polarized emission from GaN/AlN quantum dots subject to uniaxial thermal interfacial stresses. *J. Vac. Sci. Technol., B*, **28**:C5E25–C5E34, 2010.
- [37] Q. Yan and P. Rinke and M. Scheffler and C. G. Van de Walle. Strain effects in group-III nitrides: Deformation potentials for AlN, GaN, and InN. *Appl. Phys. Lett.*, **95**(12):121111, 2009.
- [38] L.K Teles, J. Furthmüller, L.M.R Scolfaro, A Tabata, J.R Leite, F Bechstedt, T Frey, D.J As, K Lischka. Phase separation and gap bowing in zinc-blende InGaN, InAlN, B GaN, and BAlN alloy layers. *Physica E*, **13**:1086 – 1089, 2002.
- [39] H. Fu, Z. Lu, X. Huang, H. Chen and Y. Zhao. Crystal orientation dependent intersubband transition in semipolar AlGa<sub>x</sub>N/GaN single quantum well for optoelectronic applications. *J. Appl. Phys.*, **119**:174502, 2016.
- [40] H Dakhlaoui and S Almansour. Piezoelectric polarization and quantum size effects on the vertical transport in algan/gan resonant tunneling diodes. *Chinese Phys. B*, **25**:067304, 2016.

- [41] T. Wecker, G. Callsen, A. Hoffmann, D. Reuter and D. J. As. Photoluminescence excitation spectroscopy of excited states of an asymmetric cubic GaN/Al<sub>0,25</sub>Ga<sub>0,75</sub>N double quantum well grown by molecular beam epitaxy. *Jpn. J. Appl. Phys.*, **55**:05FG01, 2016.
- [42] T. Wecker, G. Callsen, A. Hoffmann, D. Reuter and D. J. As. Correlation of the Carrier Decay Time and Barrier Thickness for Asymmetric Cubic GaN/Al<sub>0,64</sub>Ga<sub>0,36</sub>N Double Quantum Wells. *Phys. Status Solidi (b)*, **255**:1700373, 2018.
- [43] J. G. Rojas-Briseño, Guillermo L. Miranda-Pedraza, and J. C. Martínez-Orozco. Exciton binding energy in coupled double zinc blende GaN/InGaN quantum well. *Phys. Stat. Solidi (b)*, **254**:1600461, 2017.
- [44] J.G. Rojas-Briseño, J.C. Martínez-Orozco and M.E. Mora-Ramos. States of direct and indirect excitons in strained zinc-blende GaN/InGaN asymmetric quantum wells. *Superlattices Microstruct*, **112**:574, 2017.
- [45] A. Radosavljević, J. Radovanović and V. Milanović. Optimization of cubic GaN/AlGaIn quantum well-based structures for intersubband absorption in the infrared spectral range. *Solid State Commun.*, **182**:38, 2014.
- [46] H. Machhadani, M. Tchernycheva, S. Sakr, L. Rigutti, R. Colombelli, E. Warde, C. Mietze, D. J. As, F. H. Julien. Intersubband absorption of cubic GaN/Al(Ga)N quantum wells in the near-infrared to terahertz spectral range. *Phys. Rev. B*, **83**:075313, 2011.
- [47] C. Mietze, E. A. DeCuir Jr., M. O. Manasreh, K. Lischka, D. J. As. Intrasubband transitions in cubic AlN/GaN superlattices for detectors from near to far infrared. *Phys. Stat. Solidi C*, **8**:1204, 2011.
- [48] E. Rauls and J. Wiebe and W. G. Schmidt. Understanding the cubic AlN growth plane from first principles. *J. Cryst. Growth*, **312**:2892, 2010.

- [49] T. Schupp, K. Lischka, D. J. As. MBE growth of atomically smooth non-polar cubic AlN. *J. Cryst. Growth*, **312**:1500, 2010.
- [50] U. Köhler, D. J. As, S. Potthast, A. Khartchenko, K. Lischka, O. C. Noriega, E. A. Menezes, A. Tabata, S.C.P. Rodrigues, L.M.R. Scolfaro, G. M. Sipahi and J.R. Leite. Optical Characterization of Cubic AlGa<sub>x</sub>N/GaN Quantum Wells. *Phys. Stat. Solidi (a)*, **192**:129, 2002.
- [51] C. Mietze. *Cubic AlN/GaN multi-quantum-wells for unipolar device applications*. Phd, University of Paderborn, Germany, 2013.
- [52] Donat J. As, C. Mietze. MBE growth and applications of cubic AlN/GaN quantum wells. *Phys. Status Solidi A*, **210**:474, 2013.
- [53] M. Landmann, E. Rauls, W. G. Schmidt, Marcus Röppischer, Christoph Cobet, Norbert Esser, Thorsten Schupp, Donat J. As, Martin Feneberg, Rüdiger Goldhahn. Transition energies and direct-indirect band gap crossing in zinc-blende Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N. *Phys. Rev. B*, **87**:195210, 2013.
- [54] E. Namvari, S. Shojaei and A. Asgari. Luminescence emission from Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>N/GaN multi quantum disc core/shell nanowire: Numerical approach. *Physica E*, **93**:132, 2017.
- [55] D. Fritsch, H. Schmidt, and M. Grundmann. Band-structure pseudopotential calculation of zinc-blende and wurtzite AlN, GaN, and InN. *Phys. Rev. B*, **67**:235205, 2003.
- [56] P. Rinke, M. Winkelkemper, A. Qteish, D. Bimberg, J. Neugebauer, and M. Scheffler. Consistent set of band parameters for the group-III nitrides AlN, GaN, and InN. *Phys. Rev. B*, **77**:075202, 2008.
- [57] R. R. Pelá, C. Caetano, M. Marques, L. G. Ferreira, J. Furthmüller, and L. K. Teles. Accurate band gaps of AlGa<sub>x</sub>N, InGa<sub>x</sub>N, and AlIn<sub>x</sub>N alloys calculations based on LDA-1/2 approach. *Appl. Phys. Lett.*, **98**:151907, 2011.

- [58] R. Grady and C. Bayram. Simulation of zincblende AlGaN/GaN high electron mobility transistors for normally-off operation. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **50**:265104, 2017.
- [59] M. Kouhi. Electric field effect on the quadratic electro optic effects and electro absorption process in GaN/AlGaN spherical quantum dot. *Optik*, **127**:3379, 2016.
- [60] E. Namvari, S. Shojaei, and A. Asgari. Luminescence emission from nonpolar Al<sub>0,3</sub>Ga<sub>0,7</sub>N/GaN core-shell and core-multi-shell nanowires. *Superlattice. Microst.*, **112**:118, 2017.
- [61] L. Ming, W. Wu, Z. Zhengyin, H. Hongpei, L. Fan and Z. Feng. Effect of conduction band nonparabolicity on the Rashba spin splitting of AlGaN/GaN QWs. *Physica E*, **93**:12, 2017.
- [62] K. A. Rodríguez-Magdaleno, J. C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque. High-pressure effects on the intersubband optical absorption coefficient and relative refractive index change in an asymmetric double  $\delta$ -doped GaAs quantum well. *phys. status solidi (b)*, **252**:683, 2015.
- [63] 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  $\delta$ -doped quantum well with a Schottky barrier: Electric field effects. *phys. status solidi (b)*, **251**:415, 2014.
- [64] K. A. Rodríguez-Magdaleno, J. C. Martínez-Orozco, I. Rodríguez-Vargas, M. E. Mora-Ramos, and C. A. Duque. Asymmetric GaAs n-type double  $\delta$ -doped quantum wells as a source of intersubband-related nonlinear optical response: Effects of an applied electric field. *J. Lumin.*, **147**:77, 2014.
- [65] G. Sun, J. B. Khurgin, L. Friedman, and R. A. Soref. Tunable intersubband Raman laser in GaAs/AlGaAs multiple quantum wells. *J. Opt. Soc. Am. B.*, **15**:648, 1998.
- [66] G. Sun, J. B. Khurgin, and R. A. Soref. Design of a GaN/AlGaN intersubband raman laser electrically tunable over the 3-5  $\mu\text{m}$  atmospheric transmission window. *Conference*

- on Lasers and Electro-Optics and Quantum Electronics and Laser Science Conference*, 033103(2006), 2006.
- [67] H. R. Hamed. Electron localization in an asymmetric double quantum well nanostructure. *Physica B*, **440**:83, 2014.
- [68] F. Urgan, U. Yesilgul, S. Sakiroglu, E. Kasapoglu, H. Sari, and I. Sökmen. Nonlinear optical absorption and refractive index in GaInNAs/GaAs double quantum wells under intense laser field and applied electric field. *J. Lumin.*, 143(0):75 – 80, 2013.
- [69] S. L. Chuang. *Physics of Optoelectronic Devices*. Wiley Series in Pure and Applied Optics, 1995.
- [70] H. Ehrenreich and D. Turnbull (Eds.). *Solid State Phys.*, volume 46. Academic Press, 1992.
- [71] Van de Walle, C. G. Band lineups and deformation potentials in the model-solid theory. *Phys. Rev. B*, **39**:1871, 1989.
- [72] P. Harrison and V. D. Jovanović. *Quantum Wells, Wires and Dots*, pages 219–241. John Wiley & Sons, Ltd, 2006.
- [73] 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 Electr.*, **23**:2196, 1987.
- [74] T. Takagahara. Excitonic optical nonlinearity and exciton dynamics in semiconductor quantum dots. *Phys. Rev. B*, **36**:9293, 1987.
- [75] J.B. Xia and W.J. Fan. Electronic structures of superlattices under in-plane magnetic field. *Phys. Rev. B*, **40**:8508, 1989.

- [76] A. Aissat, R. Bestam, B. Alshehri, and J. P. Vilcot. Modeling of the absorption properties of  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}_{1-y}\text{N}_y/\text{GaAs}$  quantum well structures for photodetection applications. *Superlattice. Microst.*, **82**:623, 2015.
- [77] I. Vurgaftman and J. R. Meyer. Band parameters for nitrogen-containing semiconductors. *J. Appl. Phys.*, **94**:3675, (2003).
- [78] D. Mourad. Tight-binding branch-point energies and band offsets for cubic InN, GaN, AlN, and AlGaN alloys. *J. Appl. Phys.*, **113**(12):123705, 2013.
- [79] A. R. Denton and N. W. Ashcroft. Vegard's law. *Phys. Rev. A*, **43**:3161, 1991.
- [80] F. Urgan, E. Kasapoglu, and I. Sokmen. Intersubband optical absorption coefficients and refractive index changes in modulation-doped asymmetric double quantum well. *Solid State Commun.*, **151**:1415, 2011.