

# Transición electrónica fundamental en pozos cuánticos GaN/InGa<sub>1-x</sub>N/GaN con estructura de zincblenda

H. Hernández-Cocoletzi

Facultad de Ingeniería Química, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
Apartado Postal J-48, Puebla, Puebla, 72570, México

D. A. Contreras-Solorio, J. Madrigal-Melchor

Escuela de Física, UAZ  
Av. Preparatoria 301, 98060 Zacatecas, México

J. Arriaga

Instituto de Física, BUAP  
Apartado Postal J-48, 72570, Puebla México  
(Recibido: 14 de octubre de 2005; Aceptado: 16 de julio de 2006)

En este trabajo calculamos la energía de transición entre el primer nivel de huecos y el primer nivel de electrones (1h-1e) en pozos cuánticos de GaN/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN con estructura cúbica. Los cálculos los realizamos mediante la aproximación empírica de amarre fuerte (tight binding) con una base de orbitales atómicos  $sp^3s^*$ , interacción a primeros vecinos e incorporando el acoplamiento espín-órbita, en conjunto con el método de empalme de las funciones de Green de superficie. Los parámetros de amarre fuerte de la aleación los obtuvimos a partir de los parámetros de los compuestos binarios GaN e InN, utilizando la aproximación del cristal virtual. Analizamos el comportamiento de la energía de transición como función del ancho del pozo para  $x=0.1$  y  $x=0.2$ , usando varios valores del band offset. La tensión en el pozo la tomamos en cuenta escalando los parámetros de amarre fuerte considerando dos conjuntos de valores para la ley de escalamiento.

**Palabras clave:** Pozos cuánticos; Estados electrónicos; Aleaciones

In this work we calculate the transition energy from the first level of holes to the first level of electrons (1h-1e) for cubic GaN/In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN quantum wells. We employ the empirical tight binding approach with an  $sp^3s^*$  orbital basis, nearest neighbors interactions and the spin-orbit coupling, together with the surface Green function matching method. We obtain the tight binding parameters of the alloy from those of the binary compounds GaN and InN using the virtual crystal approximation. We study the transition energy behavior varying the well width for  $x=0.1$  and  $x=0.2$ , using several values for the band offset and for two sets of exponent values used in the tight-binding parameters scaling rule when we take into account the strain in the well.

**Keywords:** Quantum wells; Electronic states; Alloys

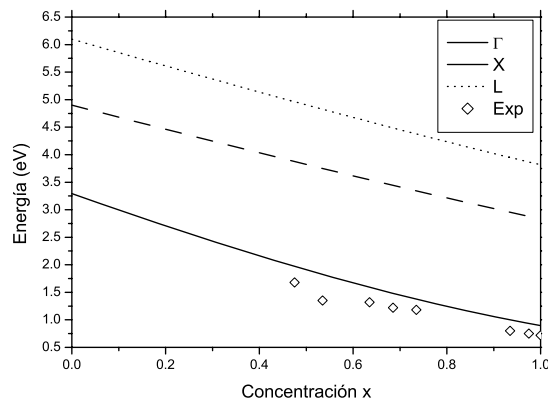
## 1. Introducción

Los compuestos GaN, AlN, InN y sus aleaciones, también llamados nitruros, han despertado gran interés en los últimos años debido a su potencial aplicación en dispositivos optoelectrónicos. Particularmente, los semiconductores basados en la aleación InGa<sub>1-x</sub>N han sido utilizados en el diseño de dispositivos comerciales tales como diodos emisores de luz (LED's) y diodos láser (LD's) con longitudes de onda 320-405 nm [1,2]. La

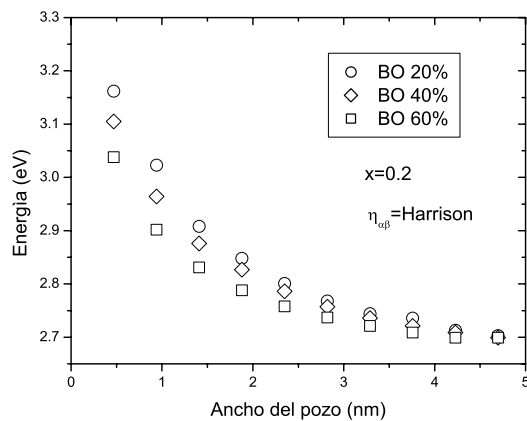
importancia de los dispositivos optoelectrónicos basados en nitruros es debida a que presentan una alta eficiencia y un tiempo de vida grandes. Es por esto que tienen enormes aplicaciones en la vida cotidiana, como puede ser comprobado con la aparición de displays, semáforos y lámparas de iluminación casera hechas con LED's basados en nitruros, así como con la creación de LD de longitud de onda de 405 nm usados en los nuevos discos ópticos, los llamados blue-ray disc, que tienen una capacidad de almacenamiento de entre 25 y 50 GB.

**Tabla 1.** Parámetros de amarre fuerte de los compuestos GaN e InN (en eV).

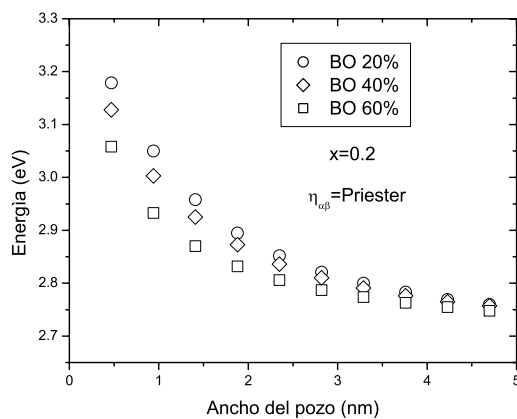
	E(s,a)	E(p,a)	E(s,c)	E(p,c)	E(s*,a)	E(s*,c)	V(s,s)	V(x,x)
GaN	-12.9156	3.2697	-1.5844	9.1303	14.0000	14.0000	-8.8996	5.4638
InN	-12.8605	2.7081	-0.3994	8.7518	15.0000	15.0000	-4.2285	4.8684
	V(x,y)	V(sa,pc)	V(sc,pa)	V(s*a,pc)	V(pa,s*c)	$\lambda_a$	$\lambda_c$	$\Delta_0$
GaN	8.7208	6.7152	7.3524	7.8440	2.3827	0.003	0.015	0.018
InN	6.7505	3.3231	5.6091	8.9764	3.0144	0.003	0.002	0.010



**Figura 1.** Brecha energética prohibida de la aleación  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  en la estructura de zincblenda como función de la concentración de In. Los diamantes representan resultados experimentales.



**Figura 2.** Energía de transición como función del ancho del pozo en la ley de escalamiento de Harrison para diferentes valores de BO y concentración  $x = 0.2$ .



**Figura 3.** Energía de transición como función del ancho del pozo en la ley de escalamiento de Arriaga para diferentes valores de BO y concentración  $x = 0.2$ .

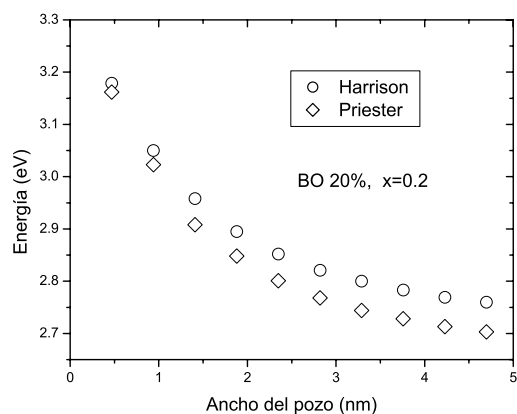
La parte esencial de un LED o un LD es un pozo cuántico. Los pozos cuánticos de  $\text{GaN}/\text{InGaN}/\text{GaN}$  han sido estudiados anteriormente debido a su uso como regiones activas en láseres; por ejemplo, estos pozos con relación de espesor de pozo/barrera de 2/12 nm han mostrado alta eficiencia en diodos láser [3]. Además, heteroestructuras hechas con éstos, muestran intensa luminiscencia y fotoluminiscencia [4] y presentan baja sensibilidad a los cambios de temperatura [5]. Adicionalmente, Haberer y colaboradores [6], han fabricado microdiscos tomando como región activa pozos cuánticos múltiples de  $\text{InGaN}$  utilizando el método denominado grabado foto-electroquímico.

Hasta ahora, la mayoría de los trabajos dedicados a pozos cuánticos basados en nitruros se ha concentrado en la parte experimental, dejando el lado teórico con poca atención. Con el objeto de entender mejor los procesos involucrados en estos sistemas, en el presente trabajo estudiamos teóricamente la energía de transición  $1h-1e$  de pozos cuánticos (001) de  $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  como función del ancho del pozo para valores de la concentración  $x = 0.1$  y  $0.2$ . Usamos el método de amarre fuerte empírico (ETB) junto con el método Surface Green Function Matching (SGFM), tomando en cuenta la tensión en el pozo. Por otra parte, el band offset (BO) en heteroestructuras cuánticas es una información fundamental para el diseño de dispositivos, sin embargo, para los nitruros hay pocos datos y varían mucho los valores reportados [7-9], por esa razón los cálculos los hemos realizado también variando el valor del BO para analizar su efecto en las energías de transición.

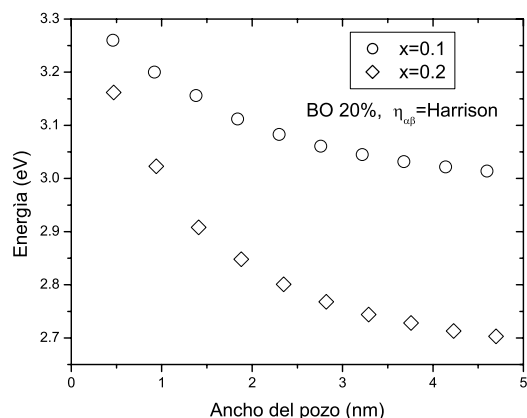
## 2. Modelo teórico

El estudio lo realizamos en cuatro etapas. En la primera se calcula la estructura electrónica de los compuestos binarios volúmenes puros  $\text{GaN}$  e  $\text{InN}$ . En la referencia [10] está descrita la obtención de la estructura electrónica de ellos, usando ETB con una base de orbitales atómicos  $sp^3s^*$ , interacción a primeros y segundos vecinos y tomando en cuenta el acoplamiento espín-órbita. En este trabajo hacemos un estudio de las propiedades electrónicas de pozos cuánticos en el centro (punto  $\Gamma$ ) de la zona de Brillouin (ZB) bidimensional, incorporando sólo primeros vecinos. Consideramos que no es importante tomar en cuenta interacciones hasta segundos vecinos, ya que incluir éstos sólo modifica un poco la estructura de bandas de los materiales puros en el punto L de la ZB, y las propiedades optoelectrónicas más importantes provienen del centro de la ZB. Los parámetros ETB (ETBP) se obtienen ajustando a datos experimentales de estructura de bandas o cálculos de primeros principios. Posteriormente, en la segunda etapa, usamos la aproximación de cristal virtual (VCA) [10-15] para obtener los ETBP de la aleación  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . En el marco de la VCA, los ETBP de la aleación se calculan promediando con la siguiente fórmula

$$E_{\text{InGaN}}(x) = (1-x)E_{\text{GaN}} + xE_{\text{InN}} \quad (1)$$



**Figura 4.** Energía de transición como función del ancho del pozo en la ley de escalamiento de Harrison y de Arriaga; el valor del BO es de 20% y la concentración es  $x = 0.2$ .



**Figura 5.** Energía de transición como función del ancho del pozo para  $x = 0.1$  y  $x = 0.2$  en la ley de escalamiento de Harrison; los resultados son mostrados para  $x = 0.1$  y  $0.2$  y un BO de 20%.

donde  $E_j$  ( $j = \text{GaN, InN}$ ) son los ETBP de los compuestos binarios dados en la Tabla 1. Cabe mencionar que la VCA trata una aleación como un cristal perfectamente periódico, suponiendo que su estructura es idéntica a la de los constituyentes; por lo tanto, no describe los distintos entornos atómicos locales en materiales inhomogéneos y falla en casos especiales [11]. Sin embargo, la VCA tiene la ventaja de su simplicidad y de que es computacionalmente eficiente. Ya ha mostrado ser útil en cálculos de TB reportados anteriormente [10,12]. Además, esta aproximación se ha usado exitosamente para obtener las propiedades estructurales y termodinámicas de muchos materiales [13], así como las propiedades dieléctricas y piezoeléctricas de otros más [14]. También explica el ferromagnetismo como función de la concentración en algunos casos [15]. En la tercera etapa del cálculo, tomamos en cuenta la tensión en el pozo. La constante de red de la aleación InGaN es apreciablemente mayor que la del GaN a las concentraciones de In que usamos. Asumimos que en la heteroestructura, el GaN, que es el material de la barrera, permanece relajado con su constante

de red original y que la constante de red del material del pozo, el InGaN, se acopla a la del GaN. Por lo tanto, el InGaN está sujeto a tensión biaxial compresiva. Este efecto se incorpora escalando los ETBP del InGaN obtenidos mediante la Ec. 1, usando la siguiente expresión

$$E'_j = E_j \left( \frac{r}{r_0} \right)^{-\eta_{\alpha\beta}} \quad (2)$$

siendo  $\alpha$  y  $\beta$  los tipos de orbitales de los ETBP de la Tabla 1. El cociente  $r/r_0$  es la distancia de los átomos de la red deformada entre la distancia de los átomos de la red sin deformar. Si hacemos el exponente  $\eta_{\alpha\beta} = 2$  para todos los tipos de orbitales, se tiene la parametrización de Harrison [16]. Uno de los coautores de este trabajo (J. Arriaga), realizó anteriormente [17] un estudio teórico de la dependencia de la brecha energética prohibida (gap) de los materiales GaAs y GaP bajo presión hidrostática, usando diferentes exponentes. Encontró que usando la parametrización  $\eta_{ss} = 3.7$  y para los demás tipos de orbitales  $\eta_{\alpha\beta} = 2$ , se reproducían mejor los datos experimentales. Estos valores de exponentes son similares a los obtenidos por Priester y colaboradores [18]. Los datos experimentales para la variación del gap de los nitruros cúbicos con la presión hidrostática o tensión biaxial o uniaxial, son escasos y es difícil realizar un ajuste. Por lo anterior, en nuestros cálculos utilizamos ambos conjuntos de exponentes (Harrison y Arriaga) para el escalamiento y comparamos los resultados.

En la etapa final del cálculo, el tratamiento teórico de la heteroestructura lo hacemos con el llamado método de SGFM, el cual incorpora los efectos de las dos interfaces de manera adecuada. Mediante este método calculamos las energías de los estados ligados de huecos y electrones como función del número de monocapas  $n$  de  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Este método está descrito en detalle en la referencia [19].

### 3. Resultados y Discusión

Los valores de los parámetros de red y las constantes elásticas de los compuestos GaN e InN con estructura de zincblenda los tomamos de las referencias [20,21]. Los ETBP correspondientes están dados en la Tabla 1 [10]. Ambos semiconductores son de gap directo con valores de 3.3 eV y 0.8 eV, respectivamente. Asimismo, sus constantes de red son 4.52 y 4.98 Å, respectivamente. En la figura 1 presentamos la evolución del gap como función de la concentración de In para la aleación ternaria en los puntos de alta simetría  $\Gamma$ , X y L. Los diamantes representan resultados experimentales de fotoluminiscencia en películas de InGaN [22].

Calculamos los estados electrónicos de pozos cuánticos de GaN/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ /GaN crecidos en la dirección (001) en el centro de la ZB. Presentamos los resultados de los niveles de energía como función del número de monocapas  $n$  de

$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  con  $2 \leq n \leq 20$ . Una monocapa contiene dos capas atómicas, una de aniones y otra de cationes. Nuestro análisis incluye valores del BO de 20, 40 y 60 % para las bandas de valencia, y calculamos la energía de transición 1h-1e para  $x = 0.1$  y  $x = 0.2$ . En la figura 2 mostramos la energía como función del ancho del pozo para  $x = 0.2$  utilizando la ley de escalamiento de Harrison para los tres valores de BO. Los resultados obtenidos en el caso de la ley de escalamiento de Arriaga se muestran en la figura 3 para el mismo valor de la concentración de In y los mismos valores de BO. Podemos observar que en ambos casos, la energía de transición decrece cuando el ancho del pozo se incrementa, esto debido a que los niveles energéticos del hueco y del electrón se aproximan al fondo de sus pozos respectivos. En el límite, cuando el ancho del pozo tiende a infinito, el electrón y el hueco se comportarían como partículas libres y su energía del estado base sería la del fondo del pozo, es decir, la transición 1h-1e tendería al valor del gap del material tensionado del pozo, al del  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ . Para  $x = 0.1$  y  $0.2$ , los valores del gap son 2.98 y 2.65 eV, respectivamente, para el material tensionado. Podemos observar que la energía de la transición disminuye al aumentar el valor del BO en la banda de valencia, principalmente para pozos estrechos. Esto es así porque en pozos estrechos solamente hay un nivel de energía, el cual es muy sensible a la variación de la profundidad del pozo al variar el BO. Con el objetivo de comparar las dos leyes de escalamiento que estamos utilizando, en la figura 4 presentamos los resultados obtenidos para  $x = 0.2$  y BO = 20 %. Podemos observar que la energía de transición muestra una dependencia apreciable con la ley de escalamiento, lo cual es más notable al aumentar el ancho del pozo. Con los exponentes de Arriaga, las energías de transición son más elevadas y tienden con más lentitud al gap del  $\text{InGaN}$  tensionado, al aumentar el ancho del pozo. Un comportamiento similar es observado para BO = 40 % y 60 %. También hemos obtenido la energía de la transición para  $x = 0.1$ . En la figura 5 comparamos estos resultados con los obtenidos para  $x = 0.2$  y BO = 20 % en la ley de escalamiento de Harrison. Se ve claramente que la energía de transición disminuye conforme la concentración de In aumenta. Esto es debido a que el gap de la aleación disminuye conforme  $x$  aumenta.

#### 4. Conclusiones

Hemos calculado la energía de la transición fundamental 1h-1e en el centro de la ZB, de pozos cuánticos  $\text{GaN}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  cúbicos crecidos en la dirección (001). Se utilizó la aproximación de amarre fuerte con una base de orbitales atómicos  $\text{sp}^3\text{s}^*$  en conjunto con el método SGFM. El cálculo se realizó para concentraciones  $x = 0.1$  y  $0.2$ , variando el ancho de los pozos de 2 a 20 monocapas, para varios valores del BO y usando escalamientos diferentes para la variación de los ETBP al tomar en cuenta la deformación del pozo. Al aumentar el ancho de los

pozos, la energía de transición tiende a la del gap de la aleación  $\text{InGaN}$  del pozo tensionado. La energía de transición disminuye cuando la concentración de In aumenta. El aumento en el valor del BO de la banda de valencia ocasiona que las energías de transición disminuyan, efecto que es más notable en los pozos estrechos. Por el contrario, al aumentar el valor del exponente  $\eta_{ss}$  de escalamiento de los ETBP por la tensión, de 2.0 a 3.7, las energías de transición aumentan, siendo más notorio el efecto para pozos anchos.

**Agradecimientos.** Este trabajo fue parcialmente apoyado por SEP-CONACYT, Proyecto #2003-01-21-001-051

#### Referencias

- [1] S. Nakamura, S. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, and T. Yamanda, *Jpn. J. Appl. Phys.* **35**, L74 (1996).
- [2] J. Heffernan, M. Kauer, K. Johnson, C. Zellweger, S. E. Hooper, and V. Bousquet, *phys. stat. sol.* **a202**, 868 (2005).
- [3] S. E. Hooper, M. Kauer, V. Bousquet, K. Johnson, J. M. Barnes, and J. Heffernan, *Electronic Letters* **40**, 33 (2004).
- [4] K. S. Ramaiah, Y. K. Su, S. J. Vhang, B. Kerr, H. P. Liu, and L. G. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 3307 (2004).
- [5] H. Gotoh, T. Tawara, Y. Kobayashi, N. Kobayashi, and T. Saitoh, *Appl. Phys. Lett.* **83**, 4791 (2003).
- [6] E. D. Haberer, C. Meier, R. Sharma, A. R. Stonas, S. P. DenBaars, S. Nakamura, and E. L. Hu, *phys. stat. sol.* **c2**, 2845 (2005).
- [7] S. H. Wei and A. Zunger, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 2719 (1996).
- [8] E. A. Albanesi, W. R. L. Lambrecht, and B. Segall, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **339**, 607 (1994).
- [9] H. Morkoç, *Nitride Semiconductors and Devices* (Springer, 1999, Germany), 269.
- [10] J. Arriaga, H. Hernández-Cocoletzi, and D. A. Contreras-Solorio, *Physica E* **17**, 238 (2003).
- [11] C. Cheng, E. G. Wang, Y. M. Gu, *Phys. Rev.* **B57**, 3753 (1998).
- [12] H. Hernández-Cocoletzi, D. A. Contreras-Solorio, and J. Arriaga, *Appl. Phys.* **A81**, 1029 (2005).
- [13] S. de Gironcoli, P. Giannozzi, S. Baroni, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2116 (1991).
- [14] L. Bellaiche, D. Vanderbilt, *Phys. Rev.* **B61**, 7877 (2000).
- [15] P. Slavenburg, *Phys. Rev.* **B55**, 16110 (1997).
- [16] W. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, (Freeman, San Francisco, 1980).
- [17] Jesús Arriaga Rodríguez, *Estados Electrónicos en Superredes Tensionadas*, Tesis Doctoral (Universidad Complutense de Madrid, 1992).
- [18] C. Priester, G. Allan, and M. Lannoo, *Phys. Rev.* **B37**, 8519 (1988).
- [19] F. García-Moliner and V. R. Velasco, *Theory of Single and Multiple interfaces*, (World Scientific, Singapore, 1992).
- [20] A. F. Wright, *J. Appl. Phys.* **82**, 2833 (1997).
- [21] H. Unlu, *phys. stat. sol.* **b235**, 248 (2003).
- [22] M. Hori, K. Kano, T. Yamaguchi, Y. Saito, T. Araki, Y. Nanishi, N. Teraguchi, and A. Suzuki, *phys. stat. sol.* **b234**, 750 (2002).