

# Espectro electrónico de pozos rectangulares con variaciones del potencial

A. Enciso-Muñoz, S. J. Vlaev, I. Alvarado Perea

Unidad Académica de Física, UAZ

Calzada Solidaridad Esquina con Paseo la Bufa

Zacatecas 98060, ZAC., México

(Recibido: 12 de marzo de 2006; Aceptado: 17 de agosto de 2006)

Los pozos cuánticos rectangulares poseen imperfecciones en su estructura cristalina y su composición química, obtenidas en el proceso del crecimiento. El potencial en la región del pozo puede tener variaciones alrededor de su valor constante, causadas por los cambios en las condiciones experimentales. El objetivo del presente trabajo es estudiar el efecto de estas variaciones sobre los estados electrónicos confinados. Consideramos cambios aleatorios, en intervalos determinados, de las condiciones experimentales y calculamos las energías y las distribuciones espaciales de los estados electrónicos, así como las energías de las transiciones ópticas entre ellos.

**Palabras clave:** Heteroestructuras; Pozos cuánticos; Potenciales aleatorios

The quantum rectangular wells possess imperfections in their crystalline structure and their chemical composition obtained in the growth process. The potential in the well region may have variations around its constant value, caused by the changes under the experimental conditions. The objective of the present work is to study the effect of these variations on the electronic confined states. We consider random changes in certain intervals of the experimental conditions and we calculate the energies and the spatial distributions of the electronic states as well as the energies of the optic transitions between them.

**Keywords:** Heterostructures; Quantum Wells; Random potentials

## 1. Introducción

Los pozos cuánticos rectangulares son las heteroestructuras planares que se crecen con mayor precisión. Sin embargo, el perfil de su potencial no es ideal. Los saltos en las interfases no son abruptos, principalmente por la interdifusión entre los diferentes materiales [1]. Esta imperfección ha sido ampliamente estudiada desde el punto de vista experimental y teórico. Las variaciones del potencial en la región del pozo, debidas a los cambios de las condiciones experimentales del crecimiento, no se han estudiado sistemáticamente. En ciertas ocasiones, los cambios de las energías y de las intensidades de las transiciones ópticas por estas imperfecciones pueden ser importantes. Por ejemplo, si la región del pozo es una mezcla ternaria y el pozo es angosto, es difícil mantener los parámetros del crecimiento constantes entre dos cambios bruscos de las condiciones del proceso por las interfases. El objetivo del presente trabajo es tratar teóricamente pozos cuánticos con imperfecciones en el potencial, de tipo aleatorio, en la dirección del crecimiento.

## 2. Modelo y método

Consideraremos un pozo rectangular formado de mezclas ternarias  $AlGaAs$ :

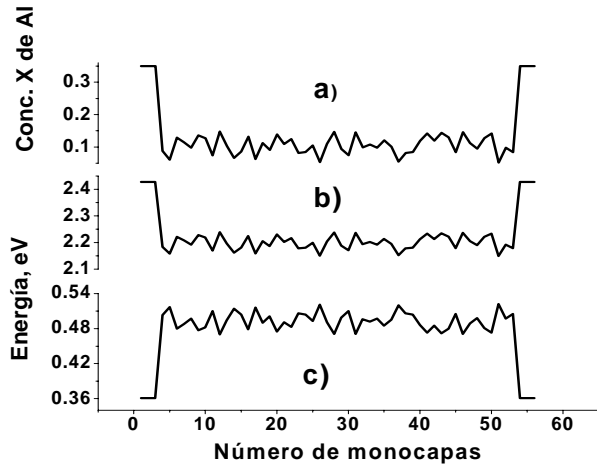
$$Al_{x_B}Ga_{1-x_B}As / Al_{x_W}Ga_{1-x_W}As / Al_{x_B}Ga_{1-x_B}As$$

Las dos barreras son de concentración constante  $x_B$ , pero en la región del pozo hay variaciones aleatorias  $\Delta X$  de la concentración del aluminio, alrededor del valor deseado constante  $x_W$ . En la Fig.1a presentamos el pozo, para valores  $x_B = 0.35, x_W = 0.10$  y anchura de  $N=50$  monocapas (MLs). Los valores de la concentración del  $Al$ , en la región del pozo son en realidad  $x_W \pm \Delta X$ , donde en la Fig.1a  $\Delta X = \pm 0.05$ . Entonces tendremos un “slab” finito, no homogéneo, lo que complica bastante la consideración teórica del problema. Aplicaremos el modelo de enlace fuerte, con base  $SP_3S^*$  incluyendo el espín, en el formalismo de las funciones de Green, empalmado las barreras homogéneas con el “slab” finito no homogéneo, según el método presentado en [2]. Las aproximaciones que se utilizan en este modelo [2] son las siguientes: i) la

**Tabla 1.** Energías de los primeros estados para electrones y huecos y de las principales transiciones ópticas.  $x_B = 0.35, N = 100ML$

Energías (eV)	C1	HH1	LH1	C1-HH1	C1-LH1
Error $\Delta X$					
Pozo ideal	2.196	0.494	0.493	1.702	1.703
$\pm 0.01$	2.196	0.496	0.494	1.700	1.702
$\pm 0.05$	2.199	0.495	0.492	1.704	1.707
$\pm 0.10$	2.187	0.504	0.496	1.683	1.691





**Figura 1.** Perfiles de la concentración  $x$  del aluminio a) y del potencial para electrones b) y huecos c) en pozo de anchura 50 MLs con  $\Delta X = \pm 0.05$ . En los cálculos numéricos el cero en energía está en el tope de la banda de valencia del material volúmico AlAs para el centro de la zona de Brillouin tri-dimensional.  $E_v(\text{AlAs}) = 0.00$  eV.

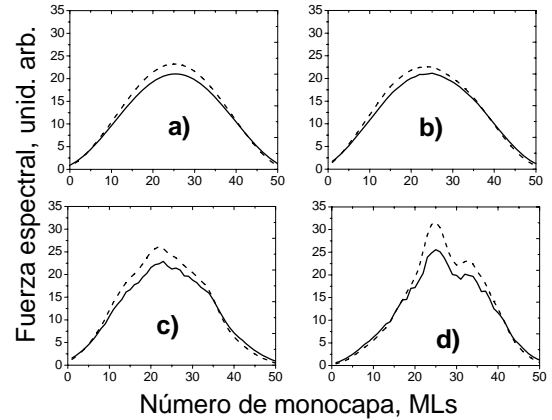
aproximación del cristal virtual, que es aceptada ampliamente en los materiales bajo consideración de este trabajo. Por la dependencia lineal entre las energías de los bordes de las bandas de la mezcla ternaria y la concentración del aluminio, los perfiles del potencial para electrones y huecos tienen el comportamiento de la concentración, Fig.1b,c. Los parámetros semiempíricos  $TB(\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As})$  de la mezcla ternaria  $\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}$  se expresan en esta aproximación del cristal virtual, como sigue:

$$TB(\text{Al}_x\text{Ga}_{(1-x)}\text{As}) = xTB(\text{AlAs}) + (1-x)TB(\text{GaAs})$$

Los parámetros tight-binding para los materiales puros GaAs y AlAs fueron tomados de la referencia [3]. ii) se consideran primeros vecinos.

En los cálculos, consideramos pozos de anchura  $N=10, 20, 50$  y  $100$  MLs dando valores para  $\Delta X = \pm 0.01, \pm 0.05$  y  $\pm 0.10$  en cada ocasión. En los cálculos numéricos el cero en energía está en el tope de la banda de valencia del material volúmico AlAs para el centro de la zona de Brillouin tri-dimensional.  $E_v(\text{AlAs}) = 0.00$  eV.

El método SGFM (por su siglas en inglés) Surface Green Function Matching, nos da las formulas exactas, para empalmar diferentes medios con un número arbitrario de interfaces [2]. Los niveles de energía y las distribuciones



**Figura 2.** Distribuciones espaciales de los estados base par electrones y huecos pesados en pozos de anchura 50 MLs. Las líneas sólidas corresponden a los estados para electrones. a) pozo ideal b)  $\Delta X = \pm 0.01$  c)  $\Delta X = \pm 0.05$  d)  $\Delta X = \pm 0.10$ .

espaciales de la densidad de probabilidad, se calculan de la densidad de estados  $LDS(n, E)$  en la monocapa  $n$ , que surge de la función de Green  $G_{nn}(E + is)$  del sistema, de acuerdo a la mecánica cuántica

$$LDS(n, E) = \lim_{s \rightarrow 0} -\frac{1}{\pi} \text{Tr}[\text{Im}(G_{nn}(E + is))]$$

### 3. Resultados y discusión

Los resultados de los cálculos numéricos se presentan en las Tablas 1-4. Las anotaciones C1, HH1 y LH1 hacen referencia a los estados ligados básicos (los primeros estados) para electrones, huecos pesados y huecos livianos respectivamente. Las anotaciones C1-HH1 y C1-LH1 se refieren a las transiciones ópticas, entre los estados C1 y HH1, C1 y LH1 respectivamente. A partir de estos resultados podemos decir lo siguiente: Para variaciones pequeñas  $\Delta X = \pm 0.01$ , los cambios en las energías de los estados ligados para electrones y huecos son de  $\pm 1 \text{ meV}$ . Las energías de las transiciones ópticas cambian de la misma manera. Estos resultados muestran que la precisión  $\pm 0.01$  de crecimiento de la mezcla ternaria, asegura precisión en las energías de las transiciones ópticas de  $\pm 1 \text{ meV}$ , en congruencia con los

**Tabla 2.** Energías de los primeros estados para los electrones y huecos y de las primeras transiciones ópticas  $X_B = 0.35, N = 50 \text{ ML}$

Energías (eV)	C1	HH1	LH1	C1-HH1	C1-LH1
Error $\Delta X$					
Pozo ideal	2.203	0.493	0.487	1.710	1.716
$\pm 0.01$	2.203	0.493	0.487	1.710	1.716
$\pm 0.05$	2.207	0.491	0.485	1.716	1.722
$\pm 0.10$	2.190	0.501	0.494	1.689	1.696



**Tabla 3.** Energías de los primeros estados para los electrones y huecos y de las primeras transiciones ópticas  $X_B = 0.35, N = 20ML$ 

Energías (eV)	C1	HH1	LH1	C1-HH1	C1-LH1
Error $\Delta X$					
Pozo ideal	2.234	0.480	0.462	1.754	1.772
$\pm 0.01$	2.236	0.479	0.461	1.757	1.775
$\pm 0.05$	2.236	0.478	0.461	1.758	1.775
$\pm 0.10$	2.231	0.481	0.464	1.750	1.767

datos experimentales [5]. Para variaciones medianas  $\Delta X = \pm 0.05$  los cambios de las energías, están entre 2 y 4 meV. Hay cierta compensación de los desplazamientos para electrones y huecos, por lo que las energías de las transiciones, no muestran cambios significativos. Para variaciones grandes  $\Delta X = \pm 0.10$  las desviaciones de los valores de la energía con respecto al pozo ideal son bastante grandes, entre 3 y 10 meV para anchuras del pozo de 10 y 20 MLs, y entre 5 y 20 meV para pozos de 50 y 100 MLs. En los casos de anchuras de 20, 50 y 100 MLs, los cambios del potencial por las variaciones de la concentración hacen el pozo más atractivo para electrones y huecos. Como resultado para estas anchuras las energías de las transiciones ópticas disminuyen.

En las partes b) y c) de la Fig. 1, están las energías  $E_v$  y  $E_c$ , en función de la coordenada  $z$ , en la dirección del crecimiento dada en monocapas. (El cero está en la primera monocapa del “slab” aleatorio.) El valor promedio de la concentración del Al (la parte (a) de la figura) en el “slab” es 0.10. Según los valores presentados anteriormente, tenemos para el promedio del fondo de la banda de conducción  $E_c = 2.194$  eV y del tope de la banda de valencia  $E_v = 0.496$  eV, lo que nos da el “gap” promedio de 1.698 eV. Los valores de C1 están por arriba del valor 2.194 eV, excepto los valores 2.187 eV (Tabla 1) y 2.190 eV (Tabla 2). Estas diferencias pueden aparecer, porque un pozo rectangular con valor del potencial para los electrones 2.194 eV, no es obligatoriamente equivalente al pozo donde el potencial tiene variaciones cuyo promedio es también 2.194 eV. Podemos pensar, que en una parte pequeña del pozo aleatorio se forma un estrechito “pozo” donde localmente el valor del potencial está por debajo del valor promedio.

Nada más para el pozo de 10 MLs las variaciones del potencial, aumentan las energías de las transiciones ópticas, como resultado de que el pozo se hace menos atractivo, tanto para electrones como para huecos. En la Fig. 2 presentamos las distribuciones espaciales de los estados

básicos para electrones y huecos pesados en pozos de anchura 50 MLs ideales y con variación  $\Delta X = \pm 0.05$ . Las variaciones son aleatorias, pero el número de monocapas es finito y además no muy grande. Puede ocurrir que no haya simetría ideal respecto al centro del pozo. Las variaciones locales del potencial se manifiestan en la distribución espacial de los estados ligados. El hombro entonces significa que en la parte derecha hay una bajada local del potencial sin tener la misma bajada en la parte simétrica del lado izquierdo del pozo. Podemos esperar menos asimetría en la distribución para mayores tamaños del “slab”. El traslape entre las curvas no cambia de manera que afectaría las intensidades de las transiciones ópticas. Esto es cierto para los demás valores de la variación de la concentración del aluminio.

El hecho de trabajar con concentraciones que varían de manera aleatoria, va encaminado a mostrar, bajo que precisiones las energías de las transiciones ópticas y sus intensidades quedan sin cambios significativos, lo cual es de gran ayuda para quien lleva a cabo el crecimiento de las muestras de composición variable, y que le sirve de sustento para no tener que modificar, mas allá de lo aquí mostrado, sus arreglos experimentales en el crecimiento. De esta manera se puede apreciar que, bajo las precisiones que se manejan en el trabajo y cuando los pozos son rectangulares y de tamaños típicos, las características del sistema prácticamente no cambian cuando la precisión es 0.01, lo que corresponde a los resultados experimentales [5]. Una vez confirmada la herramienta, se puede utilizar en el caso de perfiles mas complicados, para determinar la precisión necesaria en el crecimiento que garantice la calidad de la muestra.

## Conclusiones

La metodología del trabajo permite la consideración realista de pozos cuánticos no homogéneos, como los pozos con variaciones aleatorias del potencial de

**Tabla 4.** Energías de los primeros estados para los electrones y huecos y de las primeras transiciones ópticas  $X_B = 0.35, N = 10ML$ 

Energías (eV)	C1	HH1	LH1	C1-HH1	C1-LH1
Error $\Delta X$					
Pozo ideal	2.285	0.454	0.427	1.831	1.858
$\pm 0.01$	2.286	0.454	0.426	1.832	1.860
$\pm 0.05$	2.284	0.455	0.427	1.829	1.857
$\pm 0.10$	2.294	0.449	0.422	1.845	1.872



confinamiento. Sería interesante estudiar barreras y superredes con el mismo tipo de imperfecciones.

### Referencias

- [1] S. Vlaev, D. A. Contreras-Solorio. *Journal of Applied Physics*, **82**, 3853 (1997).
- [2] S.Vlaev, V.R. Velasco and F. García-Moliner. *Physical Review B*, **49**, 11222 (1994).
- [3] Stoyan J. Vlaev and Victor R. Velasco. *Proceedings of the 9th Latin American Congress "Surface Science and its Applications"*, La Habana, Cuba, 5-9 July 1999; World Scientific, ISBN 981-02-4396-0, 259 (2000).
- [4] N. Shtinkov and S. J. Vlaev. *Phys. Stat. Sol. (b)*, **241**, R11 (2004). 1. S. Vlaev, D. A. Contreras-Solorio. *Journal of Applied Physics*, **82**, 3853 (1997).
- [5] Jasprit Singh *Physics of semiconductors and their heterostructures*, (New York, McGraw-Hill, 1993).