

## Coeficiente de absorción en superredes

Huberto Rodríguez Coppola, Melquiades de Dios Leyva y Rolando Pérez Álvarez  
Departamento de Física Teórica. Universidad de La Habana

### RESUMEN

---

Se describe el cálculo del coeficiente de absorción de un Pozo Cuántico Múltiple (MQW) en la aproximación de la función envolvente. Se comparan cualitativamente los resultados del cálculo con los obtenidos experimentalmente y con los de un cálculo realizado en la aproximación de enlace fuerte, encontrándose que nuestro modelo describe mejor al sistema que este último.

### ABSTRACT

---

The scheme of calculation of the absorption coefficient of a multiple quantum well in the envelope function approximation is described. The calculation is compared qualitatively with experimental results and with tight binding calculation, obtaining that our model is better than the tight binding model for describing such a system.

### INTRODUCCIÓN

---

Aunque las superredes se concibieron originalmente /1/ resaltando las propiedades relacionadas con el transporte de carga a lo largo de la dirección del eje de crecimiento, se ha prestado más atención en los últimos años a sus propiedades ópticas y al transporte cuasi-bidimensional en el plano de las capas.

Estas estructuras formadas por el crecimiento repetido alterno de capas de dos materiales A y B, han sido desarrolladas en compuestos del tipo III-V fundamentalmente, mediante la técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE) /2/ primeramente, y más recientemente mediante la técnica de

Deposición de Vapores Químicos Metal-Orgánicos (MOCVD) /3/. De todos los sistemas, el de GaAs-AlGaAs ha sido el más estudiado tanto teórica /4-6/ como experimentalmente /7-9/.

El objetivo de este trabajo es presentar el cálculo del coeficiente de absorción de un pozo cuántico múltiple (MQW) en la aproximación de la función envolvente y comparar los resultados con otros cálculos.

## MODELO TEÓRICO

El coeficiente de absorción en un MQW se calcula mediante: /10/

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{\alpha_0}{\hbar\omega} \sum_{k,q} \sum_{n,n'} |e \cdot P_{nn'}|^2 \delta[E(k,q) - E(k,q) - \hbar\omega] \quad (1)$$

siendo  $e$  el vector de polarización de la luz,  $P_{nn'}(k,q)$  el elemento matricial del momentum entre los autoestados del MQW asociados a las subbandas  $n$  y  $n'$ ,  $k$  y  $q$  son respectivamente las proyecciones del vector de onda en el plano de las capas y perpendicular a ellas, y  $\alpha_0$  es un factor constante.

Los autoestados del MQW se describen por:

$$\psi_{nj}(r) = 1/\sqrt{V} F_n(r) u_{jo}(r) \quad j=c,v \quad (2)$$

donde  $u_{jo}(r)$  son las funciones de Bloch en el extremo de la banda y  $F_n(r)$  serán las envolventes que se determinan de la ecuación de masa efectiva:

$$\{(-\hbar^2/2m_j^*)\nabla^2 + V_{MQW}(z) - E\} F_n(r) = 0 \quad (3)$$

Aquí  $n$  es un número cuántico asociado a la subbanda. El potencial del MQW será:

$$V_{MQW}^{(BC)}(z) = \begin{cases} \epsilon g_1 & \text{si } z > a/2 \\ \epsilon g_1 - V_0 & \text{si } z < a/2 \end{cases} ; \quad V_{MQW}^{(BV)}(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } z > a/2 \\ V_1 & \text{si } z < a/2 \end{cases} \quad (4)$$

que se origina teniendo en cuenta las diferencias en las bandas prohibidas de ambos materiales y las posiciones de las bandas respecto a un nivel de referencia común (electroafinidades).

Para el espectro discreto, la solución de (3) teniendo en cuenta el potencial (4) será:

$$\psi_n(z) = \begin{cases} A_j^{P,I} e^{k_{j1}z} & \text{si } z < -a/2 \\ B_j \cos(k_{j2}z) & \text{si } z < a/2 \text{ (estado par)} \\ C_j \sin(k_{j2}z) & \text{si } z < a/2 \text{ (estado impar)} \\ (-1)^{n+1} A_j^{P,I} e^{-k_{j1}z} & \text{si } z > a/2 \end{cases} \quad j=c,v \quad (5)$$

donde:

$$\begin{aligned} k_{c1} &= \sqrt{2m^*/\hbar^2 (\epsilon_{g1} - E_{cn})} & k_{v1} &= \sqrt{2|m_p^*|/\hbar^2 E_{vn}} \\ k_{c2} &= \sqrt{2m^*/\hbar^2 (E_{cn} - \epsilon_{g1} + V_0)} & k_{v2} &= \sqrt{2|m_p^*|/\hbar^2 (V_1 - E_{vn})} \\ A_j^P &= \frac{e^{k_{j1}a/2}}{\{1/k_{j1} + a/2[1 + (k_{j1}/k_{j2})^2] + k_{j1}/k_{j2}\}^{1/2}} \\ A_j^I &= \frac{e^{k_{j1}a/2}}{\{a/2[1 + (k_{j2}/k_{j1})^2]\}^{1/2}} \\ B_j &= A_j^P e^{-k_{j1}a/2} \sqrt{1 + (k_{j1}/k_{j2})^2} \\ C_j &= A_j^I \left[ \sqrt{1 + (k_{j1}/k_{j2})^2} / (k_{j1}/k_{j2}) \right] \end{aligned} \quad (6)$$

Para el espectro continuo consideraremos que:

$$\psi_k(z) \propto e^{ikz} \quad (7)$$

En la región de energías de interés se consideraron transiciones discreto-discreto y continuo-discreto.

Para las transiciones discreto-discreto el coeficiente de absorción tiene forma de escalera determinada por:

$$\alpha_{d-d}(hw) = \alpha_d \mu^* / (hw) \sum_{n,n'} I_{nn'}^2 \quad (8)$$

siendo  $\alpha_d$  un factor constante e  $I_{nn'}$ , la integral de las funciones envolvente de los pozos de BV y BC cuya expresión analítica encontramos y no reportamos por brevedad.

Para las transiciones continuo-discreto se desarrolló un método aproximado de cálculo sin tener en cuenta la forma del potencial; el resultado es el siguiente:

$$\alpha_{c-d}(\hbar w) = \alpha_{c\mu^*}(\hbar w) \sum_n \{Si[\alpha\gamma_n a] + Si[\alpha\gamma_n a+1]\} \quad (10)$$

donde  $Si(x)$  /11/ es la función seno-integral,  $\gamma_n = \sqrt{\hbar w - E_{cn}}$  y  $\alpha = \sqrt{2|m^*|/\hbar^2}$ .

Para desarrollar este cálculo se consideró la integral:

$$F_n(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \psi_n^c(z) \psi_n^c(z-x) \quad (11)$$

la cual tiene como comportamiento asintótico  $\cos(x/a)$ , para  $x < a$ , y  $e^{-k_{cn}x}$  para  $x > a$ .

## RESULTADOS

La comparación se realizó con un MQW de GaAs-AlGaAs para dos composiciones en la aleación:  $x=0.25$  /9/ y  $x=0.2$  /12/ y con los cálculos realizados en /12/ por el método de enlace fuerte.

Tanto nuestro cálculo como el de enlace fuerte adolecen de no considerar la interacción coulombiana entre el electrón y el hueco, luego la comparación con el experimento es sólo cualitativa. Para la realización del cálculo se emplearon para ambos pozos las siguientes masas efectivas:

$$m_e^* = 0.066m_0; m_{hh}^* = 0.45m_0; m_{lh}^* = 0.08m_0 \quad /9/.$$

El ancho del gap energético del AlGaAs se calculó mediante /13/:

$(E_g)_{Aleac} = (E_g)_{GaAs} + \Delta E_g$ ;  $\Delta E_g = 1,155x + 0,37x^2$  si  $x$  composición de la aleación. Para determinar los potenciales de los pozos de BC y BV se empleó el criterio dado en /9/.

TABLA 1

Diferencias de energía entre estados de BC y BV que corresponden a diferentes picos excitónicos (número n)

COMPOSICION MUESTRA:  $x=0,2$  /9/

a(A)	n	TRANSIC	$\Delta E(eV)$	a(A)	n	TRANSIC	$\Delta E(eV)$	n	TRANSIC	$\Delta E(eV)$
140	1	HH1-CB1	1,5218	210	1	HH1-CB1	1,5111	2	HH2-CB2	1,5441
		HH3-CB1	1,5420			HH3-CB1	1,5221		HH4-CB2	1,5599
		LH1-CB1	1,5284			HH5-CB1	1,5373	LH2-CB2	1,5589	
	2	HH2-CB2	1,5856		3	HH3-CB3	1,5979	4	HH2-CB4	1,6539
		LH2-CB2	1,6040			HH1-CB3	1,5869		HH4-CB4	1,6697
	3	HH3-CB3	1,6833		4	HH5-CB3	1,6131	5	LH2-CB4	1,6687
		LH1-CB3	1,6697			LH1-CB3	1,5910			
		HH1-CB3	1,6631							

COMPOSICION MUESTRA:  $x=0,25$  /12/

ANCHO (Å)	n	TRANSIC	$\Delta E$ (eV)	ANCHO (Å)	n	TRANSIC	$\Delta E$ (eV)
192,202	1	HH1-CB1	1,5132	192,202	3	HH3-CB3	1,6175
		HH3-CB1	1,5264			HH1-CB3	1,6043
		LH1-CB1	1,5284			LH1-CB3	1,6093
	2	HH2-CB2	1,5528		4	HH2-CB4	1,6852

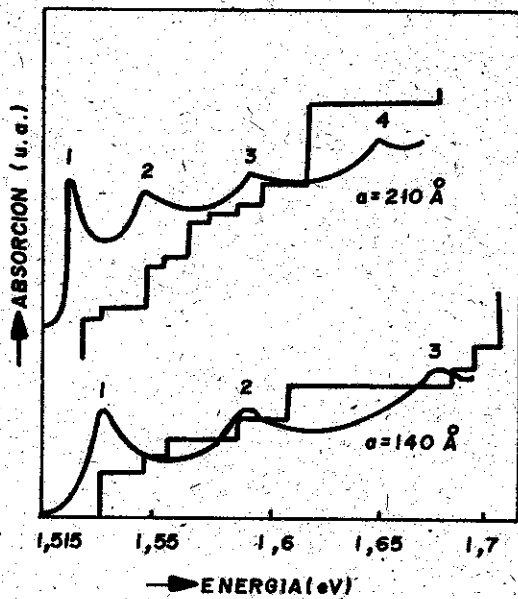


FIG. 1/9/

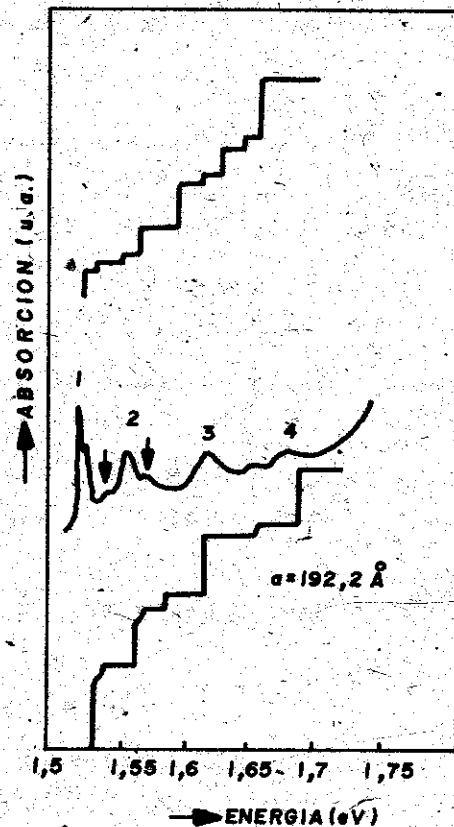


FIG. 2/12/

Como se observa en la figura 2 nuestro cálculo reproduce mejor la posición energética de las transiciones que el cálculo de enlace fuerte. En /12/ se analizan transiciones del tipo LH1-CB2 y HH1-CB2, las que en nuestro cálculo aproximado están prohibidas por la paridad de las funciones. Así mismo, nuestro cálculo demuestra que a los picos excitónicos contribuyen estados diferentes de las BV a un mismo estado de BC; lo que no aparece así en el cálculo de enlace fuerte.

Los picos marcados en la figura 2 por flechas son explicados por nosotros como las transiciones HH5-CB1 ( $\Delta E=1,5433\text{eV}$ ) y HH4-CB2 ( $\Delta E=1,5719\text{eV}$ ) con HH2-CB2 ( $\Delta E=1,5709\text{eV}$ ), lo que no explica el otro cálculo. En todos los casos se observa que la interacción coulombiana entre electrón y hueco disminuye la energía del par.

## CONCLUSIONES

---

Se puede observar que el análisis de MQW como un pozo rectangular fija cualitativamente los resultados experimentales y que el método de la función envolvente resulta satisfactorio para analizar estos sistemas. Esto no debe ser así para capas estrechas pues la teoría de masa efectiva no es aplicable.

## BIBLIOGRAFÍA

---

1. Esaki, L. y R. Tsu  
IBM J. Res. Develop. 14, 61 (1970).
2. Cho, A.Y. y J. Vac  
Sci & Technol. 8, 331 (1971).
3. Dupuis, R.D.; P.D. Dapkus; N. Holonyak y R.M. Kolbas  
Appl. Phys. Lett. 40, 877 (1982).
4. Bastard, G.; E.E. Méndez; L.L. Chang y L. Esaki  
Phys. Rev. B 26, 1974 (1982)
5. Bastard, G.  
Phys. Rev. B 24, 4714 (1981).
6. Mailhiet, G.; Y.C. Chang y T.C. McGill  
J. Vac. Sci. & Technol. 21, 519 (1982).
7. Weisbuch, G.; R.C. Miller, R. Dingle y otros  
Solid State Commun. 37, 219 (1981).
8. Miller, R.C.; A.C. Gossard; W.T. Tsang y O. Munteanu  
Phys. Rev. B 25, 3871 (1982).
9. Dingle, R.; W. Wiegmann y C.H. Henry  
Phys. Rev. Lett. 33, 827 (1974).
10. Véase por ejemplo F. Bassani y G. Parravicini  
*Electronic States and Optical Transitions in Solids*, Pergamon,  
N.Y., 1975, Cap. 7.
11. Abramowitz, M. e I.A. Stegun  
*Handbook of Mathematical Functions*, Ed. Nauka, Moscú, 1979.  
En ruso. Pág. 55.

12. Yia-Chung, Chang y J. Schulman  
Appl. Phys. Lett. 43, 536 (1983).
13. Lee, H.J. ; L.Y. Jurevel; J.C. Wooley y A.J. SpringThorpe  
Phis. Rey. B 21, 659 (1980).