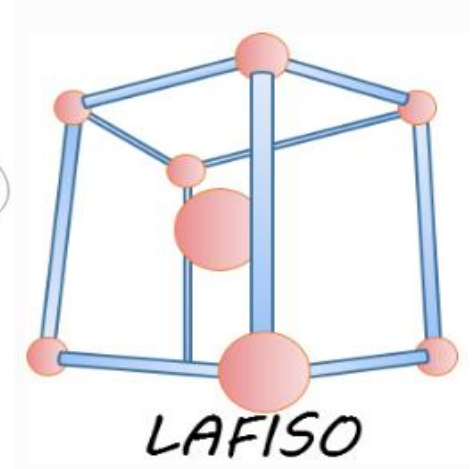


UNIVERSIDAD NACIONAL DE TUCUMÁN



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y TECNOLOGÍA

ESTUDIO DE UN MODELO TEÓRICO PARA EL DOBLAMIENTO DE BANDAS EN UN SEMICONDUCTOR

TESIS

Que para obtener el título de

Licenciado en Física

Presenta

B.U.F Facundo Lautaro Villavicencio

Director

Dr. Jorge Mario Ferreyra

Codirector

Dr. Germán Bridoux.

**San Miguel de Tucumán, Tucumán, Argentina.
30 de noviembre de 2018.**

ÍNDICE

I AGRADECIMIENTOS	1
II RESUMEN	2
CAPÍTULO 1:	3
1.1 INTRODUCCIÓN	3
1.1.1 OBJETIVOS	8
CAPÍTULO 2	9
2.1 HETEROESTRUCTURAS	9
2.2 DOBLAMIENTO DE BANDAS	14
2.3 TÉCNICAS DE CRECIMIENTO EPITAXIAL DE HETEROESTRUCTURAS	18
2.3.1 EPITAXIA POR HACES MOLECULARES (MBE).....	19
2.3.2 DEPOSICIÓN QUÍMICA DE VAPORES METALORGÁNICOS (MOCVD)	21
2.4 SISTEMAS DE BAJA DIMENSIÓN	22
2.4.1 DENSIDAD DE ESTADOS.....	24
2.5 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA	30
2.5.1. IMPUREZAS SHALLOW Y DEEP	34
2.6 EJEMPLOS DE POTENCIALES CONFINANTES.....	36
2.6.1 POZO CUADRADO SIMÉTRICO	36
2.6.2 RESULTADOS	41
2.6.3 POZO CUADRADO ASIMÉTRICO	42
2.6.4. RESULTADOS	46
2.6.5 POZO TRIANGULAR INFINITO	49
2.6.6 RESULTADOS	53
2.6.7 MODELO CUADRÁTICO DE POTENCIAL PARA DESCRIBIR EL DOBLAMIENTO DE BANDAS	54
CAPÍTULO 3	59
3.1 POZO TRIANGULAR ASIMÉTRICO ACOTADO	59
3.2 RESULTADOS	63
3.2.1 LÍMITE AL POTENCIAL CUÑA	63
3.2.2 LÍMITE AL CONTINUO	66
3.2.3 PERFIL MÁS REPRESENTATIVO DEL POZO LINEAL ACOTADO.....	67

3.2.4 ESTUDIO DE PARÁMETROS DEL POZO ACOTADO QUE MEJOR AJUSTEN EL CASO PARABÓLICO.....	69
3.2.5 FUNCIONES DE ONDA Y DENSIDADES DE CARGA	76
4. CONCLUSIONES	81
5. PERSPECTIVAS A FUTURO	82
6. REFERENCIAS	83
APÉNDICE 1: OBTENCIÓN DE LAS FUNCIONES DE ONDA DEL POZO CUADRADO SIMÉTRICO .	87
APÉNDICE 2: OBTENCIÓN DE LAS FUNCIONES DE ONDA DEL POZO CUADRADO ASIMÉTRICO	88
APÉNDICE 3: OBTENCIÓN DE LAS FUNCIONES DE ONDA DEL POZO TRIANGULAR ACOTADO	89
APÉNDICE 4: ADIMENSIONALIZACIÓN DE MAGNITUDES	90
APÉNDICE 5: PARÁMETROS INVOLUCRADOS EN LOS PERFILES DE POTENCIAL.....	91
POZO CUADRADO SIMÉTRICO.....	91
POZO CUADRADO ASIMÉTRICO	91
POZOS TRIANGULARES: INFINITO Y ASIMÉTRICO	92

I AGRADECIMIENTOS

Primeramente me gustaría expresar mis más sinceros agradecimientos a mis asesores de Tesis, al Dr. Jorge Ferreyra y al Dr. Germán Bridoux por todo su apoyo brindado durante la realización de este Trabajo Final de Licenciatura. Asimismo, les agradezco infinitamente a mis padres Roberto Villavicencio y Paola Pereyra, a mis hermanos Aldana y Leonel, a mis abuelos Clara Charra, Roque Villavicencio y Reina Palavecino, a mis primos, tíos, sobrinos y amigos, y a mi segunda familia en Tucumán César Sándiga, Marta Maldonado e hijos por estar en todo momento a mi lado.

También agradezco a todos los profesores que tuve a lo largo de la carrera por todas sus enseñanzas y apoyo en los cursos.

Sin lugar a duda una de las cosas más importantes adquiridas y que hicieron más amena mi formación de grado fueron mis compañeros. A todos y a cada uno de ustedes les reitero mi agradecimiento por todos los momentos que pasamos juntos.

A todos... Gracias.

II RESUMEN

En esta Tesis de Licenciatura se estudia el doblamiento de bandas en semiconductores a partir del planteo de un modelo que consiste en un potencial que varía linealmente en la zona de band bending: un potencial triangular infinito hacia el lado de la superficie y truncado hacia el lado del volumen del semiconductor (pozo triangular acotado).

A partir del perfil de potencial propuesto se lleva a cabo la resolución exacta y analítica de la ecuación de Schrödinger en el marco de la aproximación de masa efectiva, a fines de obtener la ecuación de autovalores de energía y expresiones analíticas de las funciones de onda (funciones de onda envolvente). Los resultados obtenidos para este modelo se controlan con casos límites bien conocidos: potencial triangular asimétrico infinito y el límite al continuo. También se analizan los rangos de aplicabilidad del modelo propuesto según los parámetros que caracterizan el band bending: profundidad y ancho de pozo. Una vez evaluado el modelo, se aplicará a dos casos de band bending: en el titanato de estroncio "STO" (SrTiO_3) y en el óxido de zinc (ZnO). En ambos casos se halla el número estados confinados, sus energías, etc; estos resultados se contrastan con los de un potencial parabólico obtenido por integración numérica de la ecuación de Schrödinger.

PALABRAS CLAVE: band bending, perfil de potencial, lineal acotado, cuadrático, masa efectiva, ecuación de Schrödinger, autovalores, funciones de onda.

CAPÍTULO 1:

1.1 INTRODUCCIÓN

En el contexto del desarrollo de la tecnología de los materiales semiconductores, la creación de estructuras artificiales surgió con la finalidad de diseñar dispositivos en los cuales se pudiera tener un cierto control sobre sus propiedades electrónicas, ópticas y magnéticas [1]. Estamos siendo testigos de una nueva revolución tecnológica donde los materiales que forman parte de dispositivos están gradualmente siendo reemplazados por nanoestructuras. Esto no es diferente incluso en el caso de los semiconductores de estructura cristalina tetraédrica, grandes protagonistas de la revolución de la microelectrónica que tuvo lugar a partir de la segunda mitad del siglo XX. En efecto, nanoestructuras de Si y Ge, de semiconductores compuestos del tipo III-V y II-VI como GaAs, InP, CdTe, CdSe, ZnO, y también de óxidos asociados como SiO₂ y TiO₂, son fabricadas y estudiadas intensamente a diario en el mundo entero en búsqueda de estructuras con nuevas y mejores propiedades para aplicaciones en dispositivos.

Los semiconductores son, sin duda, los cimientos de los dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. La importancia de los semiconductores recae en que sus propiedades eléctricas y ópticas pueden ser fácilmente modificadas por el dopado de los mismos. Los semiconductores más utilizados en la industria electrónica son el Silicio (Si) y el Germanio (Ge), así como, sus heteroestructuras. Además de estos semiconductores están los semiconductores compuestos que por lo general se forman de dos, tres o cuatro elementos diferentes y se conocen como binarios, ternarios y cuaternarios, respectivamente.

Todo sólido cristalino tiene simetría traslacional, es decir, el sólido se puede dividir en un conjunto de celdas idénticas (llamada celda unitaria) de manera que cuando el sistema se traslada a una distancia igual a la longitud de la celda unitaria, llamada constante de red, se mantiene invariante ante dicha traslación. El potencial electrostático que corresponde a los átomos del sólido posee la misma periodicidad también es periódico. El hecho de que todos los sólidos cristalinos tengan un potencial periódico es muy importante, ya que

se establece que para un sistema con un potencial traslacionalmente simétrico, los niveles de energía de los electrones se disponen en bandas. Estas bandas pueden ser de conducción o de valencia, entre ellas existe un rango de energía prohibida en el cual los estados permitidos no pueden existir. La separación entre la energía menor de la banda de conducción y la mayor en la banda de valencia se llama ancho de banda prohibida o gap. Además, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli, se sabe que un electrón no puede moverse a un estado que se encuentra ocupado por otro electrón con el mismo espín, es decir, para que haya un flujo de corriente los electrones deben pasar de un estado a otro. En una banda llena no hay estados vacantes en los que los electrones puedan moverse, ya que todos los estados posibles están ocupados y, por lo tanto, no hay circulación de corriente, es decir, deben de existir estados accesibles vacíos para que exista una corriente eléctrica.

En las heteroestructuras semiconductoras, en general, se forma una interfaz entre un semiconductor A de gap E_g^A con otro semiconductor B de gap E_g^B , una característica muy importante de la cual dependen crucialmente las propiedades electrónicas y ópticas de dicha heteroestructura es el llamado band offset. Este band offset es la manera en que se alinean en la interfaz las bandas de valencia y conducción de los materiales A y B

Cambios locales en el offset de energía de la estructura de bandas de un semiconductor cerca de una juntura o de una interfaz, debidos a los efectos de carga espacial, producen lo que se conoce como doblamiento de bandas. Debido a que la forma común de visualizar los estados de energía del electrón y el nivel de Fermi en un material es dibujar bandas en una gráfica de energía vs. distancia (diagrama de bandas), el doblamiento de bandas se refiere al doblamiento observado en estos diagramas y no corresponde a ningún doblamiento físico (espacial).

El principio principal que subyace al doblamiento de bandas en un semiconductor es el de la carga espacial: un desequilibrio local en la neutralidad de la carga. La ecuación de Poisson da una curvatura a las bandas dondequiera que haya un desequilibrio en la neutralidad de la carga. Uno puede preguntarse a qué se debe dicho desequilibrio: aunque se espera que un material homogéneo sea neutro en todas partes (dado que debe ser neutro en promedio), no existe tal requisito para las interfaces (o superficies). Prácticamente todos los tipos de interfaces desarrollan un desequilibrio de carga, aunque por diferentes motivos:

- En la unión de dos tipos diferentes del mismo semiconductor (por ejemplo, juntura p-n), las bandas varían continuamente ya que los dopantes están distribuidos de forma dispersa y solo perturban el sistema.
- En la unión de dos semiconductores diferentes hay un cambio brusco en las energías de las bandas de un material al otro; la alineación de banda en la juntura (por ejemplo, la diferencia en las energías de la banda de conducción) es fija.
- En la unión de un semiconductor y metal, las bandas del semiconductor se fijan al nivel de Fermi del metal.
- En la unión de un conductor y el vacío, el nivel de vacío (del potencial electrostático de vacío) se establece por la función de trabajo del material y el nivel de Fermi. Esto también (por lo general) se aplica a la unión de un conductor y un aislador.

Saber cómo las bandas se doblarán cuando dos materiales diferentes entran en contacto es clave para entender si la unión será rectificadora (Schottky) u óhmica. El grado de doblamiento de la banda depende de los niveles relativos de Fermi y las concentraciones de portadores de los materiales que forman la unión. En el semiconductor de tipo n, la banda se dobla hacia arriba, mientras que en el tipo p la banda se dobla hacia abajo. Cabe destacar que el doblamiento de bandas no se debe al campo magnético ni al gradiente de temperatura. Por el contrario, solo surge junto con la fuerza del campo eléctrico.

El concepto de doblamiento de bandas (band bending) nace en la física de los semiconductores [2,3], desempeñando un rol central en la comprensión de los procesos de foto-excitación, en la eficiencia de materiales foto-activos y en propiedades de transporte. También ha generado atención en campos como la fotoquímica, fotocátalisis [4] y en la provisión de gases bidimensionales de portadores, con alta movilidad, en algunos casos, lo cual le da significativa potencialidad para aplicaciones en nanoelectrónica y spintrónica [5, 6]. Cabe aclarar que las propiedades de esta configuración de gas de portadores 2D viene siendo intensamente explotada en microelectrónica de transistores MOSFET y MODFET [2,3,7].

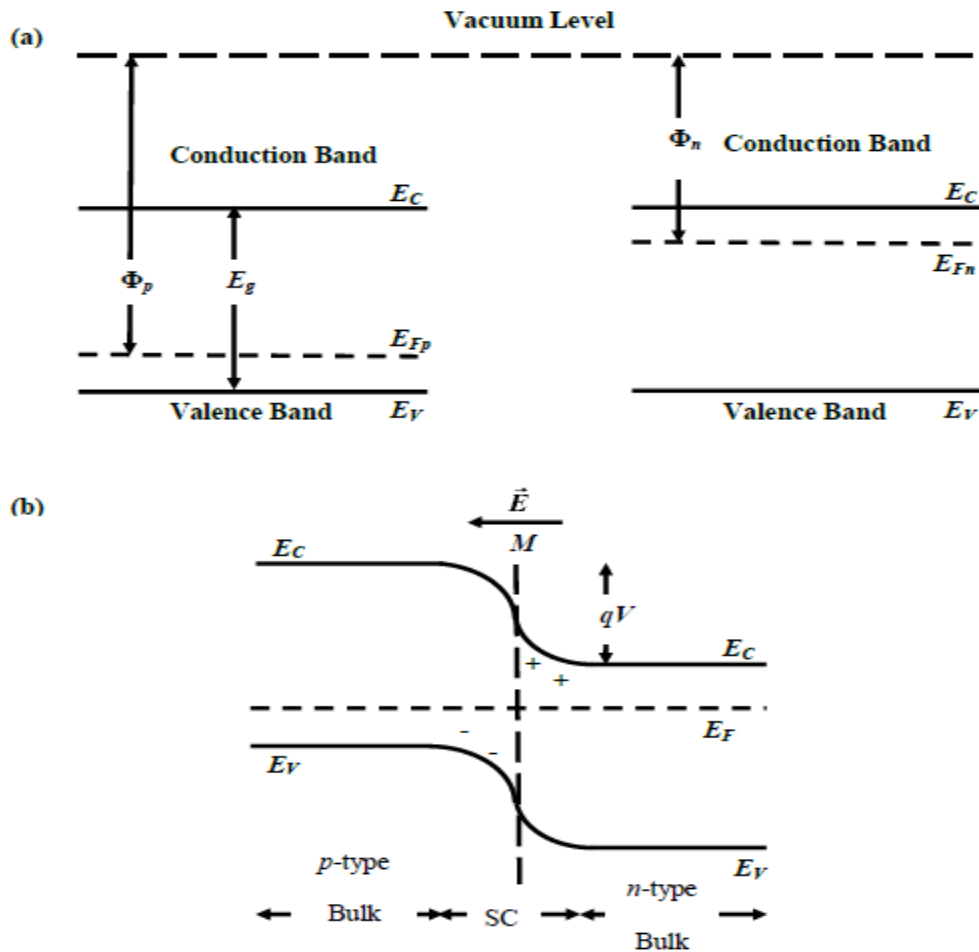


Fig.1.1. a) Diagrama de bandas de los semiconductores tipo p y n en aislamiento, y b) cuando se juntan. En equilibrio, los niveles de Fermi se alinean, resultando en el doblamiento de las bandas cerca de la juntura.

El band bending puede formarse en la interfaz metal-semiconductor (barrera Schottky), como se muestra en la fig.2.4 o en las proximidades de la superficie de un semiconductor: doblamiento hacia arriba (capa de agotamiento) (fig.2.5) o hacia abajo (capa de acumulación) (fig 2.6). En ambos casos se debe a la transferencia de carga (sección 1.2) que se produce en las proximidades de la interfaz o superficie de un material, y para determinados valores de los parámetros del band bending, puede obtenerse confinamiento de carga. En estos casos los portadores resultan confinados unidimensionalmente, conservando aún simetría de traslación en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento: gas bi-dimensional de portadores; el plano de confinamiento posee un "espesor" que varía desde unos pocos nanómetros [5], hasta aproximadamente

100 nm [8]. Este efecto está siempre presente, en mayor o menor grado, pero adquiere sustancial importancia en materiales nanoestructurados: nano-hilos [8], nano-partículas [4], etc., debido a que alguna de las dimensiones (diámetro de un nanohilo o de una nanopartícula) es comparable al ancho del band bending. Todo esto acarrea consecuencias sustanciales en sus propiedades de transporte [2,3], ópticas [9,10], etc.

En nuestro Laboratorio (LAFISO) se estudiaron recientemente propiedades de transporte estimulado por luz (Fotoconductividad) de dos compuestos puros y dopados (SrTiO_3 , ZnO , ZnOLi , ZnONa , etc) en los que fenómenos aún no reportados, pueden comprenderse muy ajustadamente por el rol del doblamiento de las bandas de Valencia y Conducción de estos compuestos.

En el primer caso se trata de un film de SrTiO_3 (STO) crecido sobre un sustrato de STO metalizado. Es bien sabido que en este caso se obtiene un gas de electrones bi-dimensional [6] justamente debido al pozo de potencial formado por el band bending hacia abajo (capa de acumulación), lo cual redundando en un pozo de potencial (confinante) para electrones. Para este caso se observaron barridos de Fotorresistencia con longitud de onda (técnica muy utilizada en nuestro Laboratorio [11,12]) que contienen características singulares y que pudieron ser comprendidas cualitativamente al tener en cuenta efectos del band bending. En el segundo caso se estudiaron microhilos de ZnO dopados con Li mediante el método carbotérmico. En el caso del ZnO es bien sabido que el band bending es hacia arriba (capa de depleción) [8] y se debe a la carga superficial negativa producida por la adsorción de moléculas de Oxígeno. En este caso tanto los resultados de Fotoluminiscencia como de tiempos de relajación de la Fotoconductividad pudieron entenderse por la formación de estados confinantes para huecos debido a la capa de depleción próxima a la superficie y cómo éste es afectado por el dopado con Litio [9,10].

El perfil de potencial que desarrolla el doblamiento de las Bandas se ha estudiado exhaustivamente y en general se lo suele abordar mediante la resolución autoconsistente de las ecuaciones de Poisson y de Schrödinger, para determinar el perfil del potencial y las energías de los estados confinantes. Este tipo de cálculos, si bien son adecuados, son de carácter numérico y no brindan expresiones analíticas sobre, por ejemplo, los autovalores de energía y las funciones de onda. Esto a la vez dificulta la obtención de

propiedades ópticas (por ejemplo probabilidad de recombinación hueco-electrón) y procesos de transporte como la Fotoconductividad.

1.1.1 OBJETIVOS

Se propone estudiar un modelo de band bending consistente en un potencial que varía linealmente en la zona de doblamiento de banda. Se trata entonces de un potencial triangular asimétrico: infinito hacia el lado de la superficie y truncado hacia el lado del volumen del semiconductor.

El estudio del modelo propuesto se llevará a cabo analíticamente y en el marco de la aproximación de masa efectiva. Se pretende obtener la ecuación de autovalores de energía mediante apareamiento de las funciones de onda planteadas para cada una de las regiones y las expresiones analíticas de estas funciones de onda. Los resultados obtenidos para este modelo se controlarán con casos límites bien conocidos (potencial triangular asimétrico infinito [13]). También se analizarán los rangos de aplicabilidad del modelo propuesto según los parámetros que caracterizan el band bending: profundidad y ancho de pozo y concentración de dopado. Una vez evaluado el modelo, se aplicará a los casos mencionados anteriormente: band bending hacia abajo para el STO y band bending hacia arriba para el ZnO. En ambos casos se estudiará el número estados confinados, sus energías, etc; estos resultados se contrastarán con los del potencial parabólico obtenido por integración numérica de la ecuación de Schrödinger.

Antes de avanzar sobre este problema se revisarán propiedades de estructuras bien conocidas en la literatura básica de la física de semiconductores y en particular aquellas referidas a potenciales confinantes.

CAPÍTULO 2

2.1 HETEROESTRUCTURAS

Entre los sistemas sólidos de origen artificial ocupan un papel relevante las llamadas heteroestructuras semiconductoras, obtenidas mediante la deposición sucesiva de capas de dimensiones atómicas de diferentes compuestos semiconductores. Gracias a técnicas de crecimiento tales como MBE y MOCVD (ver secciones 2.3.1 y 2.3.2) ha sido posible la fabricación de heteroestructuras cada vez más complejas y de mayor calidad, reduciendo al mínimo los defectos no deseados. Estas heteroestructuras, entre las cuales se encuentran las superredes, pozos, hilos y puntos cuánticos, heteroestructuras con dopaje modulado, etc., exhiben propiedades eléctricas y ópticas que superan en muchos aspectos a cualquier material o compuesto natural y constituyen la base de una nueva generación de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos destinados al desarrollo de computadoras más veloces, detectores más sensibles, nuevos sistemas de comunicación, celdas fotovoltaicas de mayor eficiencia, etc. Algunas de las extraordinarias propiedades de las heteroestructuras semiconductoras (fundamentalmente las propiedades electrónicas y ópticas de estos sistemas) están determinadas, en su mayoría, por la naturaleza de los estados electrónicos, fonónicos, excitónicos y de impurezas de los sistemas de baja dimensión.

La heteroestructura más simple consiste de una sola heterojuntura, la cual es una interfaz dentro de un cristal semiconductor a través del cual la composición química cambia. Ejemplos incluyen junturas entre GaSb e InAs, junturas entre soluciones sólidas de GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$ y junturas entre aleaciones de Si y $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$. La mayoría de los dispositivos y muestras experimentales contienen más de una heterojuntura, entonces se describen más adecuadamente por el término "heteroestructura".

Una heterojuntura ideal consiste de un cristal semiconductor (en el sentido de una red regular de átomos químicamente ligados) en el cual existe un plano a través del cual la identidad de los átomos que forman parte del cristal cambia abruptamente. En la práctica, la estructura ideal se aproxima bastante bien en algunos sistemas. En heterojunturas $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}$ de alta calidad se ha encontrado que la interfaz es esencialmente

atómicamente abrupta [14]. Hay un espectro entero de desviaciones de la estructura ideal, en forma de defectos cristalinos. La causa más obvia de tales defectos es un desajuste entre las redes de los semiconductores constituyentes. Las constantes de red del GaAs y el AlAs son casi iguales, entonces estos materiales se ajustan bastante bien. Esto es, $Al_xGa_{1-x}As$ tiene casi la misma constante de red que GaAs y AlAs, aunque el gap directo puede, sin embargo variar entre 3,14 eV y 1,51 eV, cambiando la concentración x , como se ve en la fig.2.1. En contraste, las constantes de red del Si y el Ge difieren significativamente, de manera tal que sobre un área grande del plano de la heterojuntura, cada átomo de Si no necesariamente encontrará un átomo de Ge al cual ligarse. Esta situación produce defectos en forma de dislocaciones en alguno de los semiconductores constituyentes, y tales dislocaciones normalmente afectan las características eléctricas del sistema al crear estados localizados que sirven de trampa para los portadores de carga. Si la densidad de tales trampas en la interfaz es suficientemente grande, dominarán las propiedades eléctricas de la interfaz. Esto es lo que normalmente pasa en interfaces poco controladas tales como los bordes de grano en materiales policristalinos. El término heterojuntura se reserva usualmente para aquellas interfaces en las cuales las trampas juegan un papel secundario.

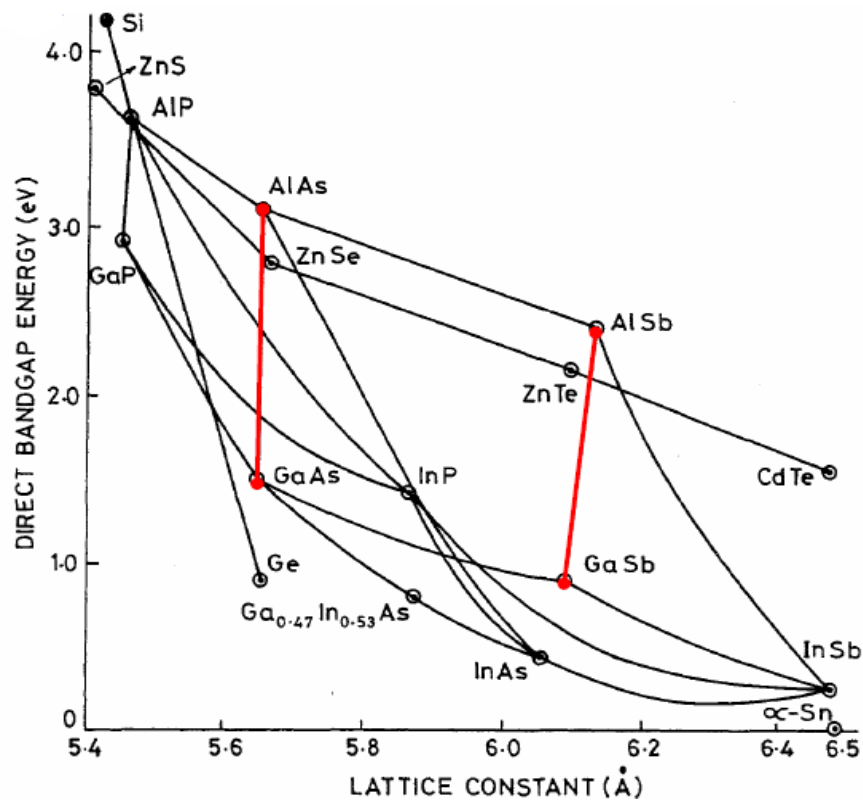


FIG.2.1. Diagrama mostrando que con compuestos binarios de constante de red similar se pueden formar ternarios con gap directo variable según varíe la estequiometría del compuesto.

De lo anterior uno concluiría que tener semiconductores con constantes de red parecidas es una condición necesaria para la fabricación de heterojunturas de alta calidad. De hecho esto se pensó por muchos años, pero compuestos binarios con diferente constante de red también pueden combinarse para obtener un ternario con una constante de red igual a la de un tercer compuesto binario (como se ve en el ejemplo de la fig. 2.2).

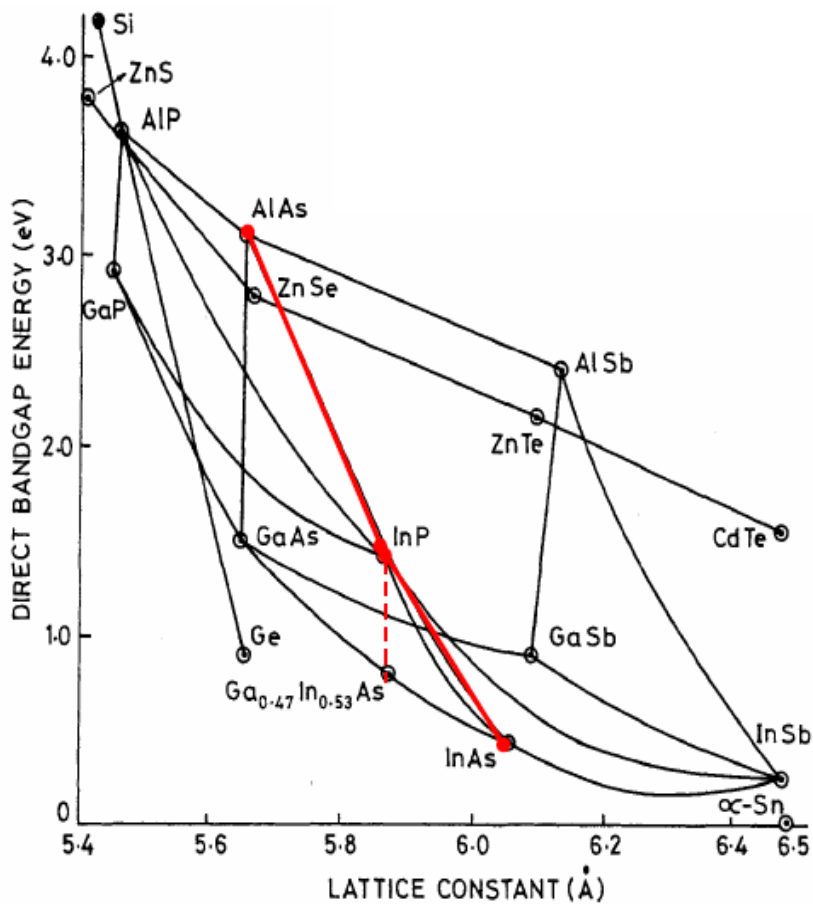


Fig.2.2. $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ y $Al_{0,48}In_{0,52}As$ son compuestos ternarios con la constante de red similares a la de InP , en este caso la energía de gap del ternario no se puede "elegir".

Además, más recientemente se encontró heterojunturas de alta calidad en sistemas de "capa tensada" (strained-layer) o pseudomórficos [15,16]. La idea esencial es que si uno de los semiconductores formando una heterojuntura se hace en una capa suficientemente delgada, el desajuste de la red se acomoda por una deformación (strain) en la capa fina. Con esta aproximación se ha probado que es posible hacer heterojunturas de alta calidad entre aleaciones de Si y Ge_xSi_{1-x} [17]

Los ejemplos de heterojunturas citados hasta ahora involucran materiales químicamente similares, en el sentido que ambos constituyentes contienen elementos de las mismas columnas de la tabla periódica. Es posible crecer heterojunturas entre semiconductores químicamente diferentes (aquellos cuyos constituyentes vienen de diferentes columnas de la tabla periódica), tales como Ge-GaAs y GaAs-ZnSe, y tales junturas fueron

ampliamente estudiadas en el desarrollo temprano de la tecnología de heteroestructuras [18]. Hay, sin embargo, problemas con tales juntas. Basados en modelos simples de la estructura electrónica de tales juntas, se esperaría una alta densidad de estados localizados en la interfaz debido a ligaduras químicas a través de una junta insatisfechas o de más satisfechas [19,20]. Más significativamente, tal vez, los constituyentes de cada semiconductor actúan como dopantes cuando son incorporados en el otro material. Así, cualquier interdifusión a través de la junta produce efectos de campo eléctrico los cuales son difíciles de controlar.

Teniendo en cuenta el band offset, las heteroestructuras pueden ser clasificadas en tres tipos. Suponiendo que se tiene una disposición de capas de materiales simples llamados A y B. Si el gap de uno de los elementos, por ejemplo el de A está totalmente contenido dentro del gap del elemento B, entonces se dice que la heteroestructura es de tipo I (Figura 2.3.a). En este caso la banda de conducción del material B está por debajo de la correspondiente al material A, y la banda de valencia de B está por encima de la correspondiente de A. A este tipo de heteroestructura pertenecen, entre otras, las constituidas con base a GaAs y $Al_xGa_{1-x}As$. Si la banda de conducción de uno de los elementos, por ejemplo A, se encuentra por debajo de la banda de conducción del otro elemento B, y lo mismo ocurre con la banda de valencia, con la condición adicional de que ambos bordes de la banda de conducción estén por encima de los de valencia, entonces la heteroestructura se llama de tipo II (Figura 2.3.b). La situación puede ser a la inversa. Como ejemplo puede citarse el caso de las heteroestructuras con base en $In_{1-x}Ga_xAs$ y $GaAs_xSb_{1-x}$, con concentración x mayor que 0.3. Por último se tiene una heteroestructura de tipo III cuando la banda de valencia del material A se traslapa con la banda de conducción del otro material como se observa en la Figura 2.3.c.

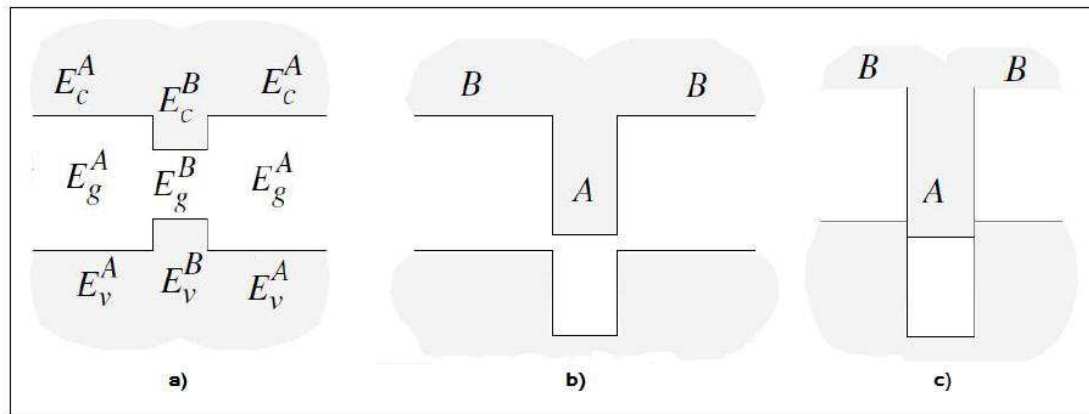


Fig.2.3. Tipos de heteroestructuras. a) Tipo I, b) Tipo II y c) Tipo III.

2.2 DOBLAMIENTO DE BANDAS

El doblamiento de bandas se produce en la vecindad de la superficie/interfaz de un semiconductor. Puede ser provocado de varias maneras, de las cuales la formación de una barrera Schottky en una juntura metal-semiconductor permanece como el ejemplo más citado. Es instructivo entonces describir brevemente la mecánica de su formación.

La barrera Schottky se forma cuando un semiconductor con cierta función trabajo se pone en contacto con un metal de función trabajo diferente. Esta diferencia implica que el potencial químico a ambos lados tenderá a equilibrarse, lo cual resulta en igualar los niveles de Fermi a través de la juntura. Si la función trabajo del metal es mayor que la del semiconductor, los electrones fluirán del semiconductor al metal para cumplir con este equilibrio. Al mismo tiempo, el agotamiento de cargas móviles cerca de la superficie del semiconductor resulta en la formación de un campo eléctrico que se opone al flujo de electrones. Cuando la magnitud de este campo aumenta a un punto en el cual evita el movimiento neto de electrones a través de la juntura, se obtiene un equilibrio de cargas. El doblamiento de las bandas hacia arriba cerca de la superficie es un reflejo de este campo, provocado por un potencial que varía a través de la zona de carga espacial. En el caso en que la función trabajo del semiconductor es menor que la del metal, el flujo de electrones se revierte y las bandas se doblan hacia abajo. Un diagrama que representa la formación de una barrera Schottky se muestra en la fig.2.4.

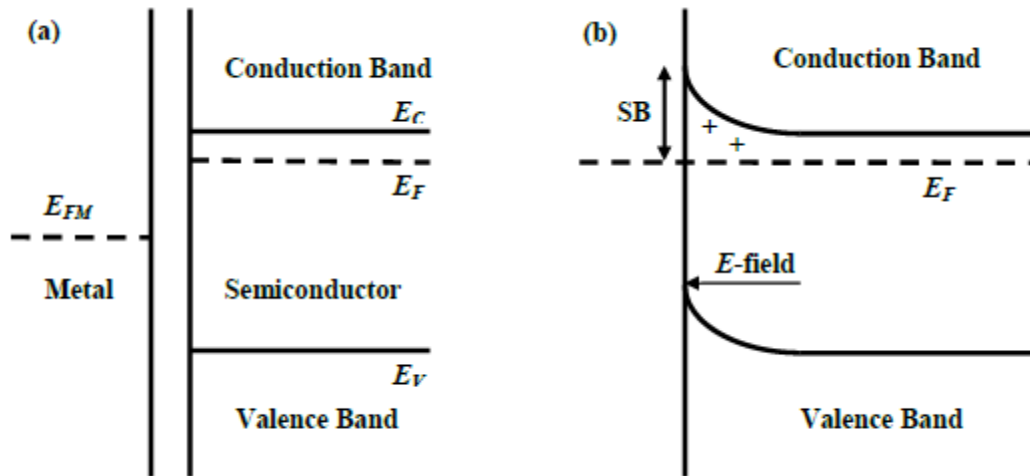


Fig.2.4. Formación de una barrera Schottky representando a) antes del contacto y b) después del contacto del semiconductor y el metal. Donde: E_c y E_v representan, respectivamente, el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia. E_F y E_{FM} denotan, de manera respectiva, el nivel de Fermi del semiconductor y del metal. SB representa la barrera Schottky.

El doblamiento de bandas puede ser generado de otras maneras, por ejemplo el band bending inducido por aplicación de un campo eléctrico. Una típica disposición incluye un semiconductor conectado a tierra y una placa metálica conectada a una fuente de tensión. Cuando una tensión de polarización es aplicada a la placa de metal, un campo eléctrico se forma entre el metal y el semiconductor. Este campo eléctrico puede aprovechar el pobre apantallamiento del semiconductor y penetrar a través de su superficie, afectando el potencial en la zona de carga espacial [21,22].

La existencia de estados superficiales también puede provocar doblamiento de bandas. Estos estados pueden ser intrínsecos o extrínsecos, donde el primero se refiere a estados provocados por una superficie perfecta con enlaces sueltos (dangling bonds), y el último a estados provocados por defectos o dopantes externos. La superficie de un material representa la finalización de una estructura periódica en la red cristalina, la cual resulta en estados electrónicos únicos en la superficie, y pueden ser bastante diferentes que aquellos presentes en las bandas del bulk. Estos estados dependen de la estructura atómica de la superficie, la cual a su vez es determinada por la minimización de la energía

superficial. La densidad de estados superficiales es normalmente grande comparada con los estados de los dopantes en el bulk (aprox. 10^{15}cm^{-3} vs. $10^8 - 10^{12} \text{cm}^{-3}$). La presencia de estos estados superficiales significa que el nivel de Fermi en la superficie es esencialmente independiente de la concentración de dopantes en el bulk, y es conocido que causa el anclaje ("pinning") del nivel de Fermi. [23-25]

La superficie de un semiconductor puede ser vista como una juntura p-n, con un lado extremadamente delgado comparado con el otro. En el caso de un semiconductor tal como el TiO_2 , el bulk del cristal es típicamente de tipo n debido a defectos del cristal, por ejemplo, defectos puntuales, intersticios de Ti y bordes de grano. El nivel de Fermi del bulk es determinado por la concentración de los portadores de carga del bulk, y para un semiconductor del tipo n, E_F estará cerca del mínimo de la banda de conducción. El nivel de Fermi de la capa superficial puede ser diferente del del bulk, posiblemente causado por una diferente concentración de defectos, como también por diferentes tipos de defectos. Puesto que la superficie es una capa muy delgada de normalmente no más de 10 nm de grosor, la zona de carga espacial puede ser considerada como la zona de agotamiento del lado del bulk.

Tres tipos de zonas espaciales de carga se pueden formar en la superficie, y se denominan, zona de agotamiento, zona de acumulación y zona de inversión. En el caso de la zona de agotamiento, el intercambio de cargas entre el bulk y la superficie resulta en el agotamiento de los portadores de carga mayoritarios en la zona de carga espacial. Para un semiconductor de tipo n con un nivel de Fermi superficial ubicado por debajo del nivel de Fermi del bulk, las bandas se doblan hacia arriba en la superficie (Fig.2.5). En el caso de una capa de acumulación, el intercambio de cargas entre el bulk y la superficie resulta en la acumulación de portadores mayoritarios en exceso en la zona de carga espacial. Esto puede suceder cuando el nivel de Fermi superficial se encuentra por encima del nivel de Fermi del bulk para un semiconductor de tipo p (Fig.2.6). En el caso en donde la diferencia entre el nivel de Fermi de bulk y el nivel de Fermi superficial se vuelve tan grande que, sobre el equilibrio la zona de carga espacial es de polaridad opuesta a la del bulk, tenemos una capa de inversión. (Fig.2.7).

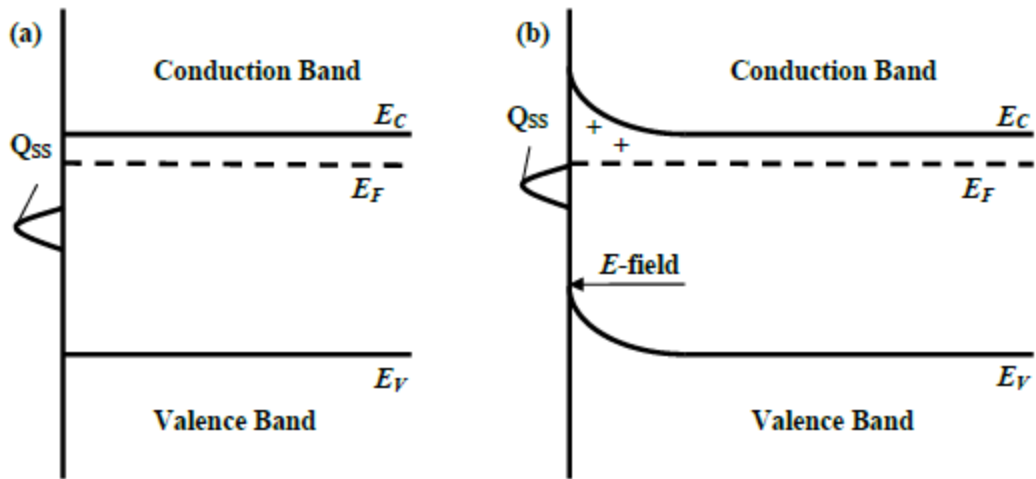


Fig.2.5. Formación de la zona de agotamiento en la zona de carga espacial.

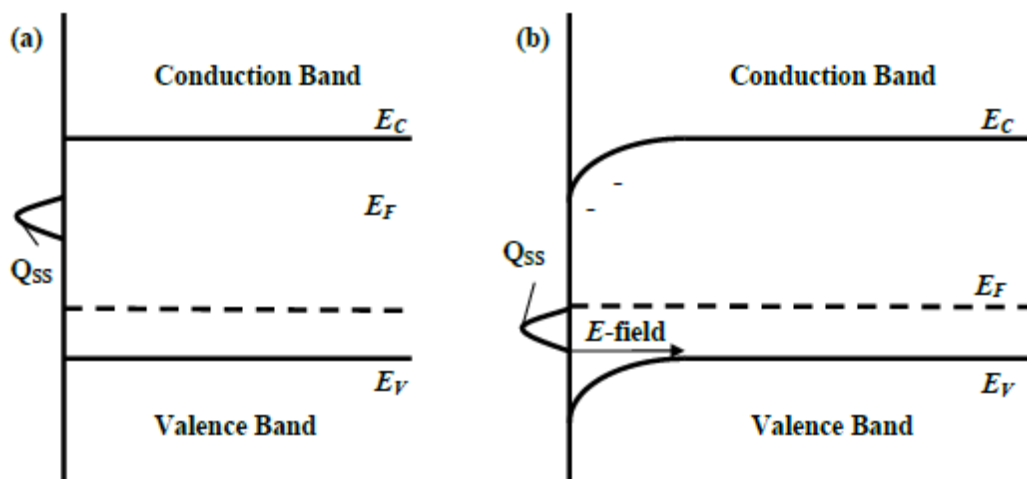


Fig.2.6. Formación de la zona de acumulación en la zona de carga espacial en la interfaz del material semiconductor.

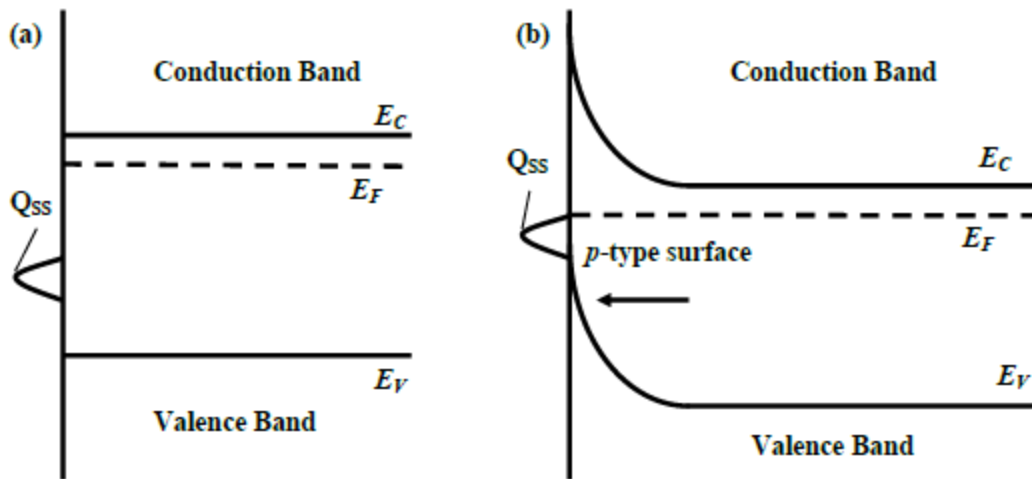


Fig.2.7. Formación de la zona de inversión en la zona de carga espacial en la interfaz del semiconductor.

2.3 TÉCNICAS DE CRECIMIENTO EPITAXIAL DE HETEROESTRUCTURAS

Aun el dispositivo semiconductor más simple necesita de la deposición de una serie de films cristalinos encima de sustratos (wafer) finamente pulidos. Este proceso de extender la estructura cristalina del material de sustrato subyacente en la capa crecida se llama epitaxia. El término epitaxia es una combinación de dos palabras griegas, epi (que significa "colocado" o "descansando en") y taxis (que significa "arreglo") y se refiere a la formación de películas de un solo cristal encima de un sustrato cristalino.

El término epitaxia puede ser además clasificado dependiendo de la relación entre el film y el sustrato: Homoepitaxia se emplea cuando el film y el sustrato son del mismo material, y heteroepitaxia cuando son de materiales diferentes. La homoepitaxia resulta en una película que se ajusta totalmente al sustrato, mientras que la heteroepitaxia puede resultar en un film relajado o tensado dependiendo de la diferencia en los parámetros de red y los coeficientes de expansión del film y el sustrato. Un ejemplo de homoepitaxia puede ser el crecimiento de silicio sobre un sustrato de silicio y un ejemplo de heteroepitaxia puede ser el crecimiento de InP sobre un sustrato de $GaAs$ o GaN sobre un sustrato de zafiro.

El crecimiento de heteroestructuras semiconductoras del tipo I y II dan lugar a la formación de pozos cuánticos; éstos y el crecimiento sucesivo de los mismos (superredes) ha revolucionado el área de los dispositivos semiconductores, los cuales requieren un

control de crecimiento cada vez más preciso, homogeneidad, alta pureza, interfaces abruptas entre el sustrato y las capas epitaxiales, y baja concentración y tamaño de dislocaciones de desajuste en las epicapas. Históricamente, las técnicas epitaxiales han sido desarrolladas para satisfacer estos requisitos, a continuación se introducirán las técnicas de epitaxia por haces moleculares y la deposición química de vapores metalorgánicos.

2.3.1 EPITAXIA POR HACES MOLECULARES (MBE)

La epitaxia por haces moleculares (MBE, por sus siglas en inglés) es una técnica avanzada para el crecimiento de capas finas y epitaxiales de semiconductores, metales, o aislantes [26,27]. En este método, el crecimiento epitaxial tiene lugar a través de reacciones entre los haces atómicos y moleculares de los materiales de la fuente y la superficie del sustrato, la cual es calentada a una cierta temperatura en un ambiente de ultra alto vacío. Dependiendo de la naturaleza de las fuentes precursoras utilizadas, existen diferentes variantes de MBE. Si todos los materiales de la fuente están en estado sólido, el proceso MBE se llama MBE de fuente sólida (SSMBE). El MBE de fuente gaseosa (GSMBE) utiliza fuentes en forma de gas, y, finalmente, el MBE metalorgánico (MOMBE) usa fuentes de material metalorgánico.

Las fuentes precursoras sólidas son generalmente sólidos calentados por encima de sus puntos de fusión en celdas de efusión, también conocidas como celdas de Knudsen, hasta que los átomos del material de la fuente puedan escapar de la celda hacia la cámara de vacío por emisión termoiónica. El flujo del haz de los materiales de la fuente es una función de su presión de vapor y puede así ser controlado por su temperatura. Los gases también pueden ser usados como fuentes precursoras potenciales, generalmente para elementos del grupo V en la síntesis de compuestos III-V, y están conectados a través de un inyector y un cracker. Su flujo de haz molecular puede ser controlado usando un controlador de flujo de masa. Finalmente, las fuentes precursoras metalorgánicas son líquidas o sólidos finos con una presión de vapor adecuadamente controlada. Haciendo fluir una cantidad controlada de gas portador inerte a través del líquido/sólido, el vapor del compuesto metalorgánico se colecta y un flujo de haz molecular controlado sobreviene.

La tasa típica de crecimiento con MBE es de alrededor de una única monocapa por segundo. Aunque es lento, esto permite cambios abruptos en la composición del material. Bajo condiciones apropiadas el haz de átomos y moléculas se unirá al material del sustrato y una capa epitaxial comenzará a formarse.

Las capas epitaxiales se cristalizan mediante una reacción entre los haces atómicos de los materiales de la fuente y la superficie del sustrato calentada. El grosor, la composición, y el nivel de dopaje de la epicapa puede ser muy precisamente controlado por medio de un control correcto de los flujos de haces moleculares. El sustrato se monta sobre un bloque y se lo rota continuamente para promover un crecimiento uniforme del cristal en su superficie.

Un diagrama esquemático de un reactor MBE se muestra en la fig.2.8. La gran diferencia entre el MBE y otras técnicas de crecimiento epitaxial se deriva del hecho que el crecimiento se lleva a cabo en un ambiente de ultra alto vacío. Por lo tanto, el crecimiento está lejos de las condiciones de equilibrio termodinámico y es principalmente gobernado por la cinética de los procesos de superficie.

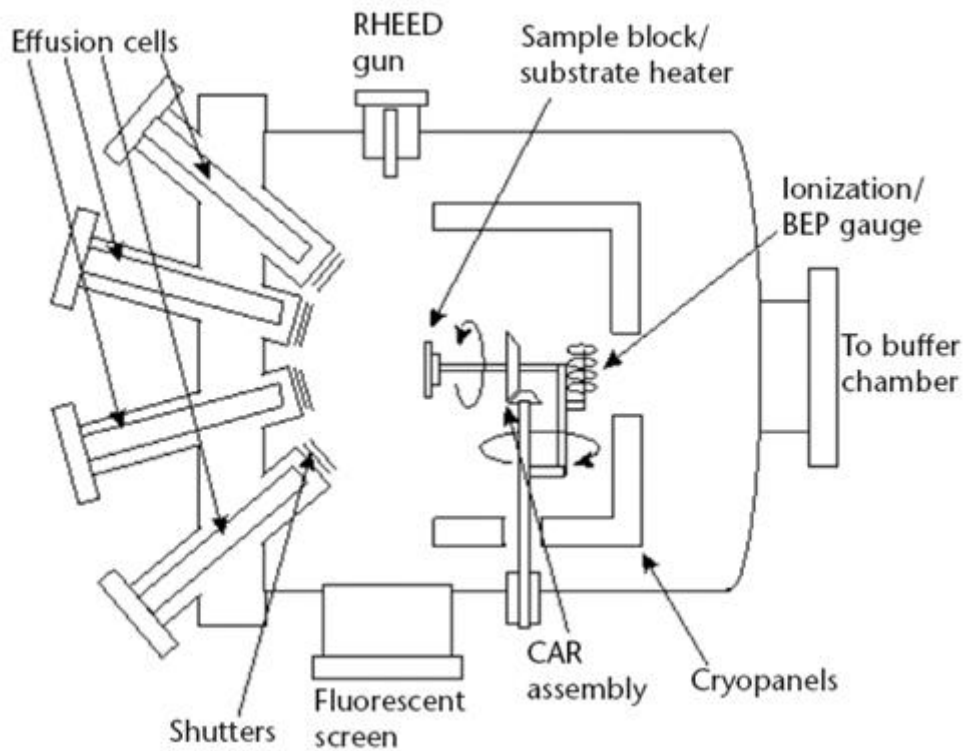


Fig. 2.8. Diagrama esquemático de un sistema MBE.

2.3.2 DEPOSICIÓN QUÍMICA DE VAPORES METALORGÁNICOS (MOCVD)

La deposición química de vapores metalorgánicos se ha convertido en una de las técnicas más ampliamente usadas para el crecimiento epitaxial de films semiconductores y dispositivos a escala comercial. Esta tecnología produce en la actualidad capas epitaxiales de gran calidad e interfaces abruptas, así también mostró ser muy buena en el crecimiento de estructuras de multicapa con grosores de apenas unas cuantas capas atómicas, especialmente en los compuestos semiconductores III-V [28-30].

El proceso de crecimiento MOCVD se basa en la pirolisis de alquilos o compuestos metalorgánicos (de elementos del grupo III típicamente) en una atmósfera de hidruros (del grupo V típicamente). Las cantidades controladas de los compuestos volátiles de los alquilos y los gases de los hidruros se introducen en una cámara de reacción, en la cual un sustrato semiconductor se ubica en un suscepto calentado. Este último tiene un efecto catalítico en la descomposición de productos gaseosos, de manera que el cristal semiconductor se lleva a cabo en esta región caliente. En un reactor MOCVD, el sustrato está más caliente que las fuentes precursoras. Un diagrama esquemático de un reactor MOCVD se muestra en la fig.2.9, la cual representa el sistema de manejo del gas y la cámara del reactor [31].

El sistema de manejo del gas incluye al alquilo y las fuentes de hidruros y las válvulas, bombas, y otros instrumentos necesarios para el control de los flujos de gases y las mezclas. Hidrógeno (H_2), nitrógeno (N_2), argón (Ar), y helio (He) son los gases portadores inertes más comúnmente usados en el proceso de crecimiento MOCVD.

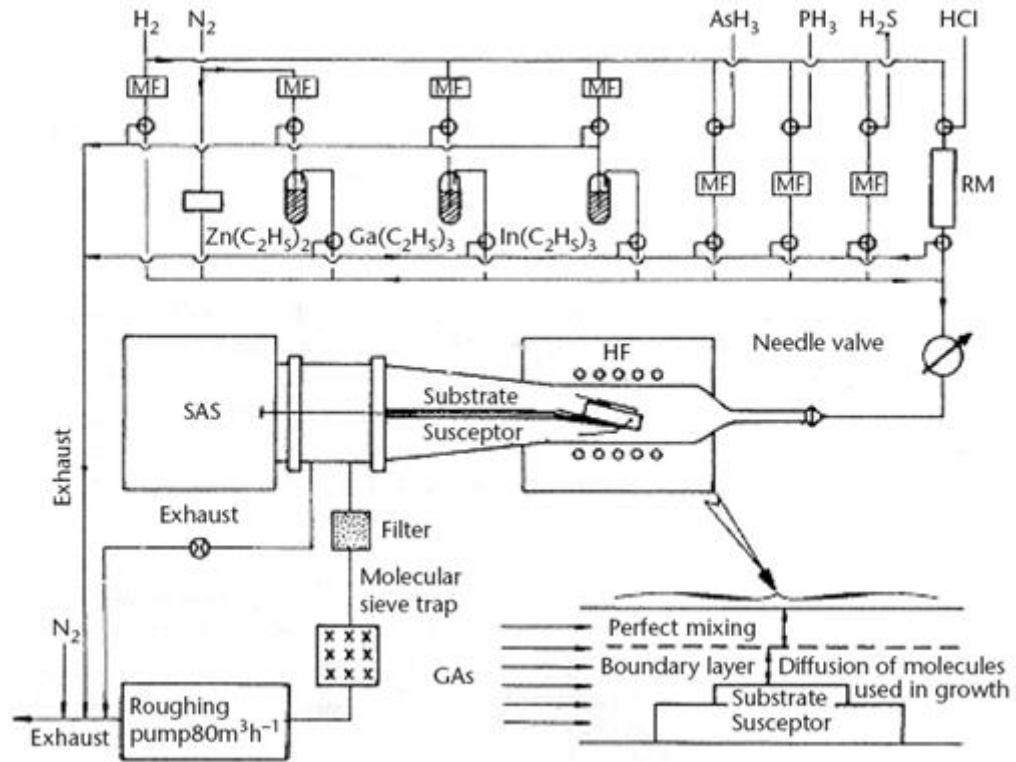


Fig. 2.9. Diagrama esquemático de un típico reactor MOCVD a baja presión.

2.4 SISTEMAS DE BAJA DIMENSIÓN

A continuación, se estudiarán potenciales confinantes en una dimensión.

El punto de partida es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en tres dimensiones

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(R) \right] \psi(R) = E\psi(R). \quad (2.1)$$

No hay un camino fácil para resolver esta ecuación si $V(R)$ es un potencial general en tres dimensiones, pero grandes simplificaciones pueden surgir en algunos casos particulares. En una estructura en capas la energía potencial depende solo de la coordenada z normal a las capas. Esto incluye los pozos cuánticos los cuales pueden obtenerse a partir de capas alternadas de $GaAs$ y $AlGaAs$; por ejemplo, en un caso como las heteroestructuras tipo I, electrones y huecos pueden quedar confinados en la dirección de crecimiento. Así $V(R) = V(z)$, y la ecuación de Schrödinger queda

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(z) \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (2.2)$$

La energía potencial permite a los electrones moverse libremente en el plano xy . La combinación lineal de ondas planas sería solución de la ec. 2.2 si el potencial fuera constante, que es el caso de la heteroestructura tipo I. Así, la función de onda debe escribirse en la forma

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \exp(ik_y y) u(z) \quad (2.3)$$

Sustituyendo esto en la ecuación de Schrödinger y reacomodando

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] u(z) = \left[E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \right] u(z) \quad (2.4)$$

Haciendo una sustitución para la energía

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] u(z) = \varepsilon u(z) \quad (2.5)$$

Donde

$$\varepsilon = E - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \quad (2.6)$$

Así se obtiene una ecuación de Schrödinger en una dimensión.

Si se resolviera la ecuación 2.5, se tendría un conjunto $u_n(z)$ y ε_n de funciones de onda y energías, respectivamente. Sustituyendo en las ecuaciones 2.3 y 2.6 y, escribiendo estas últimas en términos de vectores para el movimiento en el plano xy : $\vec{r} = (x, y)$ y $\vec{K} = (k_x, k_y)$, se tiene

$$\psi_{\vec{K},n}(\vec{r}, z) = \exp(i\vec{K} \cdot \vec{r}) u_n(z) \quad (2.7)$$

$$E_n(\vec{K}) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 \vec{K}^2}{2m} \quad (2.8)$$

La relación de dispersión (ec. 2.8) se representa en la fig.2.10

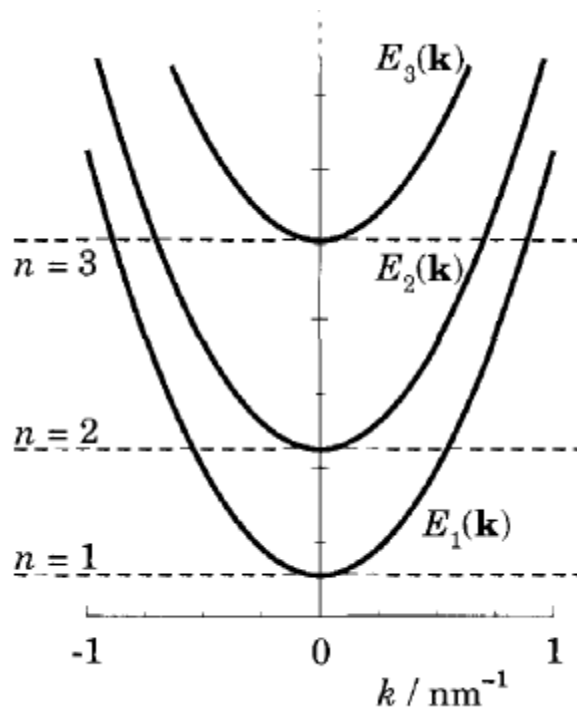


Fig.2.10. Energía total para cada subbanda.

La relación de dispersión, para un valor fijo de n , se denomina subbanda y da la relación entre la energía y el vector de onda para un gas de electrones bidimensional libre: esta relación es cuadrática.

2.4.1 DENSIDAD DE ESTADOS

Una descripción completa de un sistema requiere las energías y las funciones de onda de todos sus estados. Esta es una tarea imposible, salvo para los sistemas más simples. Para muchas aplicaciones el concepto de densidad de estados $N(E)$ resulta adecuado. La definición es que $N(E)\delta E$ es el número de estados del sistema cuyas energías se encuentran en el rango E a $E + \delta E$. Esto no dice nada sobre las funciones de onda, solo se refiere a la distribución de energías.

Un problema inmediato en el cálculo de la densidad de estados de un sistema unidimensional es que las funciones de onda $\exp(ikx)$ no se pueden normalizar de la forma habitual si las partículas viajan a través de todo el espacio. La forma más sencilla de solucionar este problema es colocar las partículas en una caja finita de longitud L , y establecer $L \rightarrow \infty$ al final del cálculo. Habiendo puesto las partículas en una caja, se tienen que elegir condiciones de contorno. Normalmente resulta más apropiado tratar a

los electrones libres como ondas viajeras que como ondas estacionarias, entonces las condiciones de contorno que generalmente se usan son periódicas.

En las condiciones periódicas o de Born-von Karman, se imagina al sistema como repitiéndose periódicamente con la misma función de onda en cada sistema. La función de onda en $x = L$ debe coincidir con la función en $x = 0$, esto implica

$$\psi(0) = \psi(L), \quad \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_{x=0} = \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)_{x=L} \quad (2.9)$$

En dichas condiciones se considera que las ondas viajeras son exponenciales y estas cumplen que $\exp(ikL) = \exp(ik0) = 1 = \exp(2\pi ni)$. Esto también satisface la condición en el gradiente, y los estados normalizados son $\phi_n(x) = L^{-1/2}\exp(ik_n x)$. Los valores permitidos de k son

$$k_n = \frac{2\pi n}{L}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.10)$$

Para convertir estos valores permitidos de k y ε en una densidad de estados, se trazan los valores permitidos de k a lo largo de una línea como en la Figura 2.11. Esta es una versión unidimensional del “espacio k ”. Los valores están espaciados regularmente, separados por $2\pi/L$. Estos valores se encuentran cada vez más cerca a medida que L aumenta y tienden a un continuo. En este caso el número de valores permitidos de k en el rango δk es solo δk dividido por el espaciado de los puntos.

Estos puntos explican los diferentes estados que surgen del movimiento en la caja, pero también se debe considerar el movimiento interno de la partícula. Clásicamente, el movimiento libre puede ser separado en traslación y rotación alrededor del centro de masa, y se encuentra que los electrones llevan un momento angular que se conoce como espín. El tratamiento del momento angular dentro de la mecánica cuántica muestra que el espín puede tomar dos estados, que por convención están etiquetados como up y down. Cada función de onda espacial puede asociarse con cualquiera de los espines, por lo que el número total de estados disponibles del electrón debe duplicarse para tener en cuenta el espín.

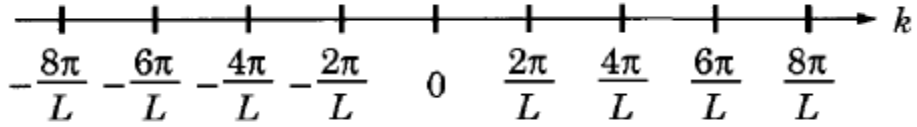


Fig.2.11 Valores permitidos de k para condiciones de contorno periódicas en un sistema de longitud L graficados a lo largo de una línea, como una forma simple del espacio k .

Se puede definir entonces una densidad de estados en el espacio k de manera tal que $N_{1D}(k)\delta k$ es el número de estados permitidos en el rango de k a $k + \delta k$. Este está dado por

$$N_{1D}(k)\delta k = 2 \frac{L}{2\pi} \delta k = \frac{L}{\pi} \quad (2.11)$$

El factor 2 tiene en cuenta el espín y $\frac{L}{2\pi}$ es la densidad de puntos. $N_{1D}(k)$ es proporcional al volumen (longitud) del sistema, lo cual tiene sentido: se esperaría que al duplicar el tamaño del sistema se duplique el número de estados. Por lo general, se expresa una densidad de estados por unidad de longitud, que es

$$n_{1D}(k) = \frac{N_{1D}(k)}{L} = \frac{1}{\pi} \quad (2.12)$$

Lo siguiente es convertir esto en una densidad de estados en energía. La figura 2.12 muestra cómo los valores permitidos de k , los cuales están espaciados uniformemente, se asignan a los valores permitidos en energía a través de la relación de dispersión $E = \varepsilon(k)$. Estas energías se encuentran en una banda continua para $E \geq 0$ en un sistema grande. La figura muestra una parábola pero la teoría funciona para una relación de dispersión más general. Los valores resultantes de la energía se apartan más a medida que k aumenta, así la densidad de los estados disminuye al aumentar la energía. Un rango δk en el número de onda corresponde a un rango en energía $\delta E = \left(\frac{dE}{dk}\right)\delta k$. El número de estados en este rango se puede escribir en términos de $n_{1D}(k)$ o en términos de la densidad de estados en energía por unidad de volumen $n_{1D}(E)$. Las dos expresiones deben dar el mismo número de estados, por lo que

$$n_{1D}(E)\delta E = n_{1D}(E) \frac{dE}{dk} \delta k = 2n_{1D}(k)\delta k \quad (2.13)$$

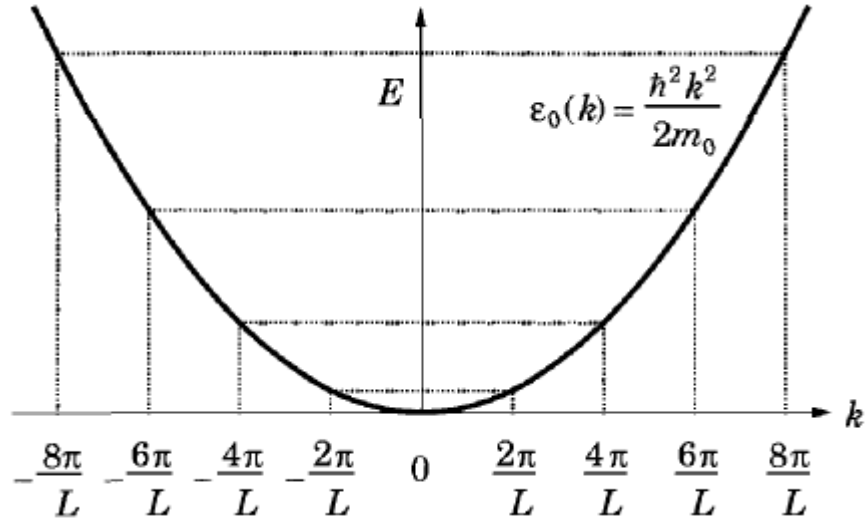


Fig.2.12. Relación de dispersión $\varepsilon_0(k)$ para electrones libres, mostrando cómo los valores permitidos de k se correlacionan con ε .

El factor 2 enfrente de $n_{1D}(k)$ surge debido a las dos direcciones del movimiento; hay un rango δk para $k > 0$ y otro para $k < 0$. Así

$$n_{1D}(E) = \frac{2}{\pi \hbar v(E)} \quad (2.14)$$

Donde $v = \left(\frac{1}{\hbar}\right)\left(\frac{d\varepsilon}{dk}\right)$ es la velocidad de grupo. Sustituyendo dicha velocidad para el caso de electrones libres se tiene

$$n_{1D}(E) = \frac{1}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \quad (2.15)$$

La generalización de la densidad de estados a tres dimensiones se hace considerando a los electrones en una caja de volumen $\Omega = L_x L_y L_z$. Las funciones de onda son ondas viajeras en cada dirección con condiciones periódicas de contorno. Los valores permitidos de k en cada una de las tres direcciones pueden ser dibujados como puntos en un espacio K tridimensional con (k_x, k_y, k_z) como ejes, donde formarán una malla rectangular uniformemente espaciada como se muestra en la figura 2.13.

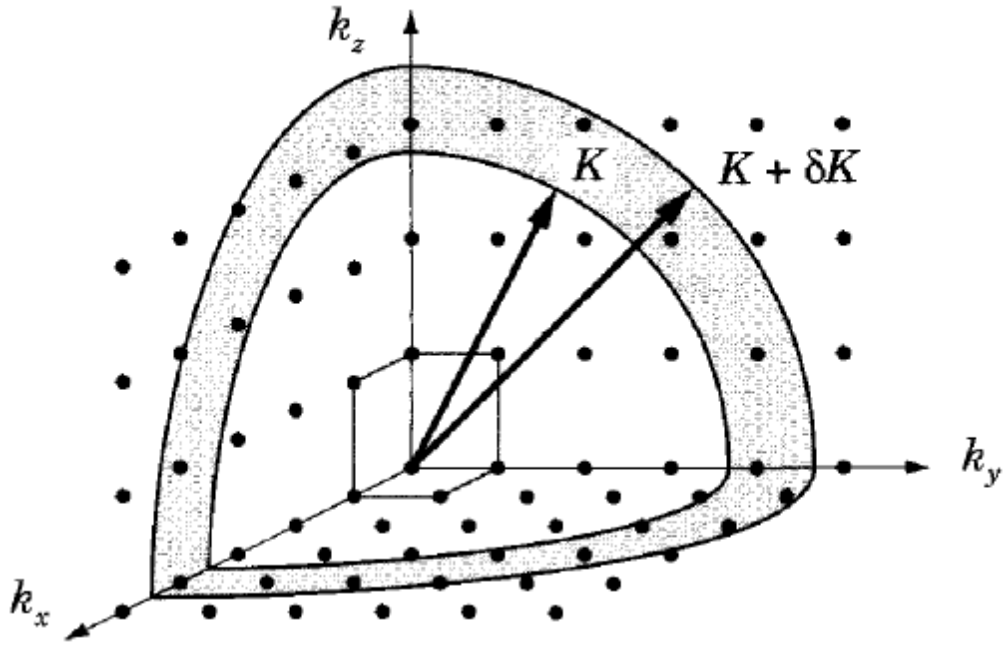


Fig.2.13. Construcción en el espacio K para calcular la densidad de estados para electrones libres en tres dimensiones. Los casquetes tienen radios K y $K + dK$, correspondientes a energías ε y $\varepsilon + d\varepsilon$.

A partir de las consideraciones anteriores, se llega a que

$$n_{3D}(E) = \frac{mK}{\pi^2 \hbar^2} = \frac{m}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2mE} \quad (2.16)$$

Donde la raíz cuadrada es característica de las tres dimensiones.

La densidad de estados para un cristal tridimensional es más complicada pues las superficies de energía constante en el espacio K no son esferas. Otras singularidades de $n(E)$ aparecen dentro de las bandas, y brindan material fructífero para la espectroscopía óptica. Un caso más simple surge si la energía depende solamente de la magnitud de K pero no de su dirección. En este caso las superficies de energía constante permanecen esféricas y la derivación de $n(E)$ es como se hizo en el caso de electrones libres excepto en la forma de $\varepsilon(K)$. Por ejemplo, la banda de conducción del *GaAs* a menudo se modela por la expresión [7]

$$\varepsilon(K)[1 + \alpha\varepsilon(K)] = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e^*} \quad (2.17)$$

Esto toma en cuenta el hecho de que la banda no es parabólica para energías altas, con $\alpha \approx 0,6 \text{ eV}^{-1}$. m_e^* es la masa efectiva para electrones en el *GaAs* (ver sección 2.5).

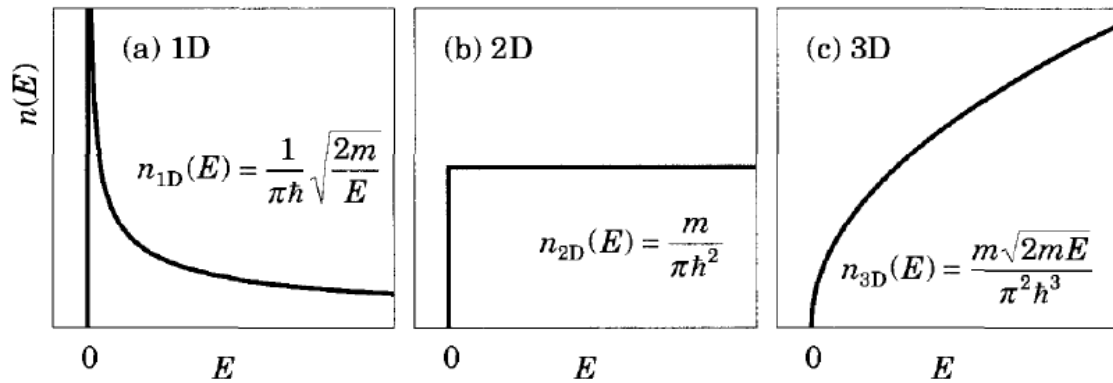


Fig.2.14. Densidad de estados para electrones libres en una, dos y tres dimensiones.

En la fig.2.14 se muestran las densidades de estados para electrones. En el caso 2D, en lugar de encontrar el número de estados k encerrados dentro de una esfera, el problema es calcular el número de estados k que se encuentran en un anillo de radio k a $k + dk$ (ver fig.2.15). Haciendo las mismas consideraciones que para el caso unidimensional y tridimensional respecto a las condiciones periódicas de contorno y los valores permitidos de k (esta vez en dos dimensiones), se llega a que

$$n_{2D}(E) = \frac{kd k}{\pi} = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{m}{\pi\hbar^2} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \quad (2.18)$$

Donde es de notar que la densidad bidimensional de estados no depende de la energía.

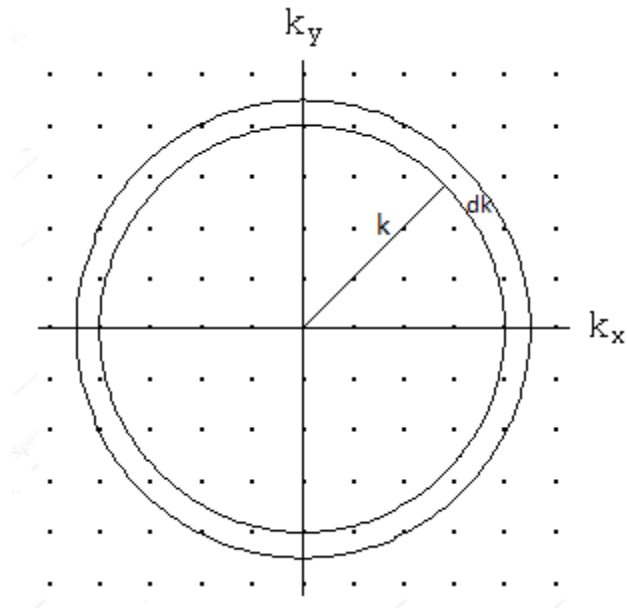


Fig.2.15. El espacio k en 2D. La densidad de estados a una energía E es el número de estados por unidad de área contenido con el anillo de radio k y el espesor dk .

2.5 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA

El estudio de distintos perfiles de potencial se hará en el marco de la teoría de masa efectiva.

El movimiento de un electrón en una red será, en general, diferente del de un electrón libre. Además de una eventual fuerza externa, hay fuerzas internas en el cristal debido a los iones cargados positivamente o electrones. Como es difícil tomar en cuenta todas las fuerzas internas que actúan sobre una partícula en el cristal, para el movimiento de electrones en la red, se puede escribir

$$F_{ext} = m^* a \quad (2.19)$$

Donde la aceleración a se encuentra directamente relacionada a la fuerza externa F_{ext} . El parámetro m^* , llamado masa efectiva, considera la masa de la partícula y también tiene en cuenta el efecto de las fuerzas internas.

La aproximación de masa efectiva se hace en un modelo semiclásico en donde la energía de la nueva partícula con masa m^* depende del vector de onda k , de la siguiente manera:

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.20)$$

Los electrones están representados como paquetes de ondas agrupadas en torno a un valor de k .

Se define la masa efectiva como:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \quad (2.21)$$

La masa efectiva es un parámetro que relaciona los resultados de la mecánica cuántica con las ecuaciones de fuerza clásicas. En la mayoría de los casos, el electrón en el fondo de la banda de conducción puede considerarse como una partícula clásica cuyo movimiento puede ser modelado por la mecánica newtoniana, siempre que las fuerzas internas y las propiedades mecánicas cuánticas se tengan en cuenta a través de m^* . Si se aplica un campo eléctrico al electrón en el fondo de la banda de energía permitida, se puede escribir la aceleración como

$$a = \frac{-e\varepsilon}{m_e^*} \quad (2.22)$$

Donde m_e^* es la masa efectiva del electrón. Dicha cantidad, cerca del fondo de la banda de conducción, es una constante.

Asimismo, el movimiento neto de electrones en una banda casi llena se puede describir considerando solo los estados vacíos, siempre que una carga electrónica positiva se asocie con cada estado. Así se puede modelar esta banda como si tuviera partículas con una carga electrónica y masa efectiva positivas. La densidad de estas partículas en la banda de valencia es la misma que la densidad de estados de energía electrónicos vacíos. Esta partícula se conoce como hueco. El hueco, entonces, tiene una masa efectiva positiva denotada por m_h^* y una carga positiva, por lo que se moverá en la misma dirección que un campo aplicado.

Para electrones o huecos en un sólido, la masa efectiva generalmente se expresa en unidades de la masa en reposo de un electrón ($m_0 = 9,11 \times 10^{-31}$ kg). En estas unidades, generalmente está en el rango de 0.01 a 10, llegando a 1000 en materiales de fermiones pesados exóticos, o desde cero hasta infinito (según la definición) en el grafeno.

En resumen, la masa efectiva de una partícula es la masa que parece tener cuando interactúa con otras partículas o cuasipartículas. Dicha cantidad es inversamente proporcional a la curvatura de la relación de dispersión $E(k)$. Por ejemplo, en el GaAs la masa efectiva para los electrones de conducción es $m_e^* = 0,067m_0$, mientras que la de los electrones de conducción del AlAs es $m_e^* = 0,15m_0$.

Hay dos enfoques para derivar la aproximación de masa efectiva: uno implica la introducción del concepto de funciones de Wannier, el otro utiliza las funciones de Bloch. Las funciones de Wannier son transformadas de Fourier de las funciones de Bloch, por lo que los dos enfoques finalmente darán los mismos resultados.

Aquí se basará la discusión en las más familiares funciones de ondas de Bloch.

En ausencia de cualquier impureza, el Hamiltoniano para un electrón de conducción es

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V(r) \quad (2.23)$$

En donde $V(r)$ es un potencial efectivo periódico. Las autofunciones son las funciones de onda de Bloch

$$\psi_{n,k}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} u_{n,k}(r) e^{ik \cdot r} \quad (2.24)$$

Las cuales están normalizadas a la unidad en un cubo grande de volumen $V = L^3$. Las $u_{n,k}(r)$ son funciones periódicas. La energía correspondiente a $\psi_{n,k}(r)$ se denota por $E_n(k)$.

Si uno de los átomos de la red perfecta se reemplaza por una impureza cargada positivamente, el Hamiltoniano para un electrón extra será

$$H = H_0 + U(r) \quad (2.25)$$

Ahora se considera el movimiento del electrón gobernado por el hamiltoniano H . Expandiendo su función de onda ψ en términos de las autofunciones $\psi_{n,k}(r)$ del Hamiltoniano sin perturbar H_0

$$\psi = \sum_{n,k} A_n(k) \psi_{n,k} \quad (2.26)$$

Teniendo en cuenta la ecuación de Schrödinger

$$(H_0 + U)\psi = E\psi \quad (2.27)$$

Tomando el producto escalar de esta última con $\psi_{n,k}$ y estudiando el elemento de matriz que resulta de esta operación se llega finalmente a la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos de un electrón de masa m^* moviéndose en el potencial $U(r)$.

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 - E \right) A_0(k) - \frac{4\pi r U(r)}{V} \sum_{k'} \frac{1}{|k - k'|^2} A_0(k') = 0 \quad (2.28)$$

Para transformar esta ecuación en una ecuación de Schrödinger en el espacio de coordenadas se introduce la transformada de Fourier de A_0

$$\chi(r) = \frac{1}{V^{1/2}} \sum_{k'} A_0(k) e^{ik \cdot r} \quad (2.29)$$

Multiplicando (2.28) por $e^{ik \cdot r}$ y sumando sobre k , se obtiene

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - U(r) \right) \chi(r) = E\chi(r) \quad (2.30)$$

La teoría de bandas de energía es estrictamente aplicable solo a cristales perfectamente periódicos. Esto significa, en particular, que no se aplica cuando campos eléctricos macroscópicos están presentes. Los dispositivos en general no son útiles a menos que tales campos estén presentes, entonces se necesita una formulación que pueda incluirlos junto con el potencial del cristal que produce la estructura de bandas. Tal formulación se provee con la aproximación de masa efectiva, la cual proporciona una descomposición de la función de onda en una parte de escala atómica y una función envolvente con variación más suave (fig.2.16), y suministra una ecuación de Schrödinger para la función envolvente (ec.2.30):

Donde χ es la función envolvente, m^* es la masa efectiva, E es la energía en el borde de la n -ésima banda, y U es el potencial electrostático. La aproximación de masa efectiva ha demostrado ser adecuada y eficiente para el cálculo numérico de propiedades físicas

[32-34].

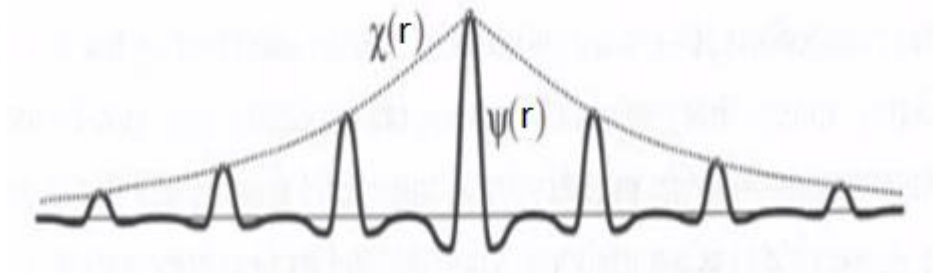


Fig.2.16. Función de onda de un electrón o hueco alrededor de una impureza, mostrando la función envolvente $\chi(r)$ que modula la función de Bloch para dar la función de onda total $\psi(r)$.

En los últimos años en la mecánica cuántica los problemas unidimensionales (1D) han tomado un nuevo impulso con la aparición de heteroestructuras que pueden modelarse por pozos cuánticos múltiples y las superredes. La ecuación de Schrödinger para la función envolvente en sistemas unidimensionales es

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - U(z) \right) \chi(z) = E\chi(z) \quad (2.31)$$

2.5.1. IMPUREZAS SHALLOW Y DEEP IMPUREZAS SHALLOW

Las impurezas shallow o hidrogenoides son impurezas donoras (o aceptoras) cuyos electrones (o huecos) pueden ser descritos por las soluciones de la ecuación de Schrödinger para la función envolvente (2.30). Un nivel shallow se debe a una pequeña perturbación del potencial de red por un potencial electrostático. Generalmente es creado por un átomo dopante sustitucional, capaz de unirse a un electrón (si es creado por un átomo donador) o un hueco (si es creado por un átomo aceptor). Análogo al caso del átomo de hidrógeno, en donde un electrón está unido por un ion H^+ , el portador captado por el dopante ve un potencial de variación $1/r$ de largo alcance.

Este es un modelo con energía de enlace igual al Rydberg efectivo Ry^* y distancia media al átomo central del orden del radio de Bohr efectivo a_0^* . Así como la extensión de las funciones de onda de electrones de estados ligados en el espacio real se mide en

términos de un radio de Bohr efectivo (con $a_0^* \gg a$, siendo a el parámetro de red), la extensión en el espacio k de las funciones de Bloch a sumar en el espacio recíproco para construir $\psi(r)$ puede ser pequeña. Esto se debe a un "principio de incertidumbre" para dos variables que están relacionadas por transformadas de Fourier. Por ejemplo, si una función del tiempo $f(t)$ tiene una extensión Δt , su transformada de Fourier $g(\omega)$ es una función de la frecuencia angular ω y tiene una extensión $\Delta\omega$. Luego hay una relación entre Δt y $\Delta\omega$ dada por $\Delta t \Delta\omega \approx 1$. De manera similar, se espera que $\Delta k \Delta r \approx |\Delta k| a^* \approx 1$ o $|\Delta k| \leq \frac{1}{a^*}$. Por lo tanto, solo los estados de la banda de conducción sobre una pequeña región del espacio recíproco alrededor del mínimo de la banda contribuyen a la función de onda si $a_0^* \gg a$.

Debido principalmente al alto valor de la permitividad y, a veces, a la baja masa efectiva, el potencial $1/r$ se extiende a un gran número de átomos de red y la energía de enlace es mucho menor que en el átomo de hidrógeno. Los errores relativos en los autovalores introducidos mediante el uso de la aproximación de masa efectiva son del orden de $[\frac{a}{2\pi a^*}]^2$, donde a , la constante de red del semiconductor, suele ser de unos pocos angstroms. Para obtener un orden de magnitud para a^* y Ry^* , se pueden asumir algunos valores típicos para ϵ y m^* en semiconductores, tales como $\epsilon \approx 10$ y $m^* \approx 0,1m_0$. Sustituyendo estos valores en las expresiones para el radio de Bohr y el Rydberg efectivo (ver apéndice 4) se obtiene un a_0^* de aproximadamente 50 \AA y una energía de enlace de aproximadamente 14 meV para un electrón donador. Como a_0^* , según esta estimación, es generalmente mucho más grande que a , los electrones donores en la mayoría de los semiconductores con un mínimo en la banda de conducción en Γ , se pueden describir bastante bien por la aproximación de masa efectiva (en donde el potencial varía suavemente en un parámetro de red).

IMPUREZAS DEEP

En la última sección, se vio que una característica de los niveles de impurezas shallow es que sus funciones de onda electrónicas se extienden típicamente sobre muchas celdas unitarias primitivas. Como resultado, esas funciones de onda se pueden construir a partir de una función de Bloch indexada por un solo vector de onda igual al del extremo de la banda más cercana. Las impurezas deep, por otro lado, tienen funciones de onda

localizadas que involucran funciones de Bloch de varias bandas y en una gran región del espacio k . Por lo tanto, se espera que los defectos con potenciales altamente localizados formen centros deep. Tales potenciales localizados pueden ser causados por enlaces rotos, la tensión asociada con el desplazamiento de los átomos y la diferencia en la electronegatividad o en los potenciales del núcleo entre la impureza y los átomos del semiconductor “huésped”. La naturaleza localizada los potenciales de centros deep sugiere que la aproximación de masa efectiva no es un buen punto de partida para estudiar sus energías electrónicas. Ya que un defecto es incrustado en un semiconductor, es necesario considerar también la interacción entre los electrones de la impureza localizados y los electrones de Bloch del semiconductor. Para calcular las energías de niveles deep se necesita conocer el potencial de la impureza y luego encontrar una manera de resolver la ecuación de Schrödinger correspondiente. Es muy difícil deducir el potencial para los centros deep porque pueden ocurrir desplazamientos de átomos (o relajación de la red). Tanto el átomo de impureza y los átomos que la rodean pueden participar en la relajación.

2.6 EJEMPLOS DE POTENCIALES CONFINANTES

2.6.1 POZO CUADRADO SIMÉTRICO

Como ya se mencionó, los pozos cuánticos y las superredes pertenecen al grupo de las heteroestructuras. Un pozo cuántico puede ser una heteroestructuras de tipo I o tipo II, dependiendo de los materiales constituyentes (Fig.2.3).

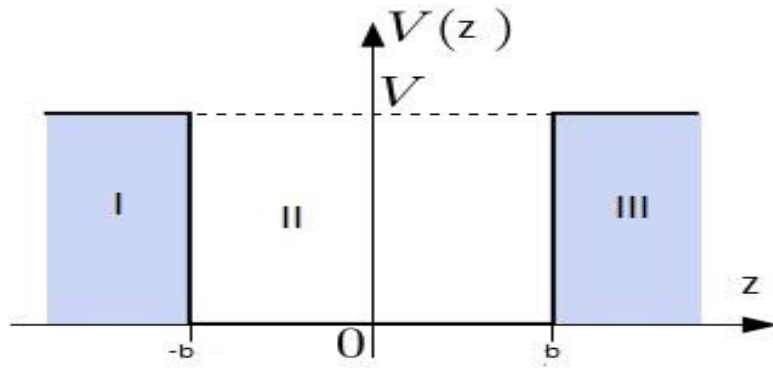


Fig.2.17. Diagrama de un pozo cuadrado finito y simétrico separado en las regiones I, II y III.

A continuación se estudiarán los estados confinados de un pozo cuadrado, esto es, los estados para los que la energía de la partícula E es menor que la altura V_0 del pozo (correspondiente a los llamados estados ligados).

Se tratará el problema considerando las diferentes regiones en la dirección z (fig.2.17): $|z| < b$ y $|z| > b$, donde z es la dirección de crecimiento (en la aproximación de masa efectiva, la partícula se comporta como libre en el plano x,y) y $2b$ es el ancho del pozo.

La ecuación de Schrödinger resulta:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(z) - E]\psi = 0 \quad (2.32)$$

Con

$$V(z) = \begin{cases} V_0, & \text{si } |z| > b \\ 0, & \text{si } -b \leq z \leq b \end{cases} \quad (2.33)$$

La ecuación 2.32 es la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, sus soluciones $\psi(z)$ determinan la dependencia espacial de las soluciones $\Psi(z, t)$ de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, según:

$$\Psi(z, t) = \psi(z)e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (2.34)$$

Si Ψ es una onda viajera, se puede escribir

$$\Psi(z, t) = e^{(kz - i\omega t)} = e^{kz} e^{-i\omega t} = e^{kz} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \quad (2.35)$$

Pues $\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}}$ y $\omega = \frac{E}{\hbar}$

Comparando (2.35) con la forma general de la función de onda (2.34), se tiene que

$$\psi(z) = e^{\kappa z} \quad (2.36)$$

Para el mismo valor de E también deberá existir una función de onda que represente a una onda que viaje en la dirección que decrece z . Esto indica que la función de onda de la ec.2.36 deberá escribirse con el signo de κz invertido. Así, se concluye que

$$\psi(z) = e^{-\kappa z} \quad (2.37)$$

Es también solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un determinado potencial $V(z)$. En efecto, cualquier combinación lineal arbitraria de las dos funciones de onda 2.36 y 2.37, para el mismo valor de energía E , también es solución a la ecuación. Así, la solución general de la ec.2.32 es

$$\psi(z) = Ae^{\kappa z} + Be^{-\kappa z} \quad (2.38)$$

En particular, en la región interna del pozo

$$\psi_{II}(z) = Ae^{ikz} + Be^{-ikz} \quad (2.39)$$

Con $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Pues, en dicha región, $V(z) = 0$ y entonces $\kappa = ik$. El primer término de (2.39) describe ondas que viajan en la dirección en que z crece y el segundo describe ondas viajeras en la dirección en que z decrece.

Considérese ahora las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en las dos regiones externas al pozo: $z < -b$ y $z > b$. En estas regiones las soluciones generales tienen las formas

$$\psi_I(z) = Ce^{(z+b)\kappa} + De^{-(z-b)\kappa}, \quad \text{si } z < -b$$

Y

$$\psi_{III}(z) = Ee^{(z+b)\kappa} + Fe^{-(z-b)\kappa}, \quad \text{si } z > b$$

Con A, B, C, D, E, F constantes de normalización. Las dos formas de ψ_I y ψ_{III} describen las ondas estacionarias en la región externa al pozo. Puesto que para que una función de onda sea solución aceptable de la ecuación de Schrödinger debe permanecer finita en cualquier parte, deberán hacerse $D = 0$ y $E = 0$. Si esto no se hiciera la segunda exponencial en la ec. 2.39 haría que $\psi_I(z) \rightarrow \infty$ cuando $z \rightarrow -\infty$, y la primera exponencial en la ec. 2.40 provocaría que $\psi_{III}(z) \rightarrow \infty$ cuando $z \rightarrow \infty$.

De esta manera, el conjunto solución para $0 < E < V_0$ es:

$$\text{I. } \psi_I = C e^{(z+b)\kappa}, \quad \text{si } z < -b \quad (2.40)$$

$$\text{II. } \psi_{II} = A e^{ikz} + B e^{-ikz}, \quad \text{si } -b \leq z \leq b \quad (2.41)$$

$$\text{III. } \psi_{III} = F e^{-(z-b)\kappa}, \quad \text{si } z > b \quad (2.42)$$

Considerando que la masa efectiva es la misma para las diferentes regiones, las condiciones de continuidad para la función propia y su primera derivada permiten plantear:

$$1. \psi_I(-b) = \psi_{II}(-b) \Rightarrow C = A e^{-ikb} + B e^{ikb} \quad (2.43)$$

$$2. \psi'_I(-b) = \psi'_{II}(-b) \Rightarrow \kappa C = ikA e^{-ikb} - ikB e^{ikb} \quad (2.44)$$

$$3. \psi_{III}(b) = \psi_{II}(b) \Rightarrow F = A e^{ikb} + B e^{-ikb} \quad (2.45)$$

$$4. \psi'_{III}(b) = \psi'_{II}(b) \Rightarrow -\kappa F = ikA e^{ikb} - ikB e^{-ikb} \quad (2.46)$$

Dividiendo (2.44) en κ y restando miembro a miembro con (2.43)

$$A \left(1 - i \frac{\kappa}{k}\right) e^{-ikb} + B \left(1 + i \frac{\kappa}{k}\right) e^{ikb} = 0 \quad (2.47)$$

Dividiendo (2.46) en $-\kappa$ y restando miembro a miembro con (2.45)

$$A \left(1 + i \frac{\kappa}{k}\right) e^{ikb} + B \left(1 - i \frac{\kappa}{k}\right) e^{-ikb} = 0 \quad (2.48)$$

Se tiene entonces un sistema de dos ecuaciones con dos incógnitas 2.47 y 2.48, resolviendo:

$$\left(1 - i \frac{k}{\kappa}\right)^2 e^{-2ikb} = \left(1 + i \frac{k}{\kappa}\right)^2 e^{2ikb} \quad (2.49)$$

Aplicando raíz cuadrada a ambos miembros y teniendo en cuenta el doble signo \pm , se obtienen dos ecuaciones:

$$\pm \left(1 - i \frac{k}{\kappa}\right) (\cos\alpha - i \operatorname{sen}\alpha) = \left(1 + i \frac{k}{\kappa}\right) (\cos\alpha + i \operatorname{sen}\alpha) \quad (2.50)$$

Con $\alpha = kb$. Considerando el signo (+) se tiene una ecuación para la parte real:

$$\cos\alpha - \frac{k}{\kappa} \operatorname{sen}\alpha = \cos\alpha - \frac{k}{\kappa} \operatorname{sen}\alpha$$

Que es una identidad. Además se tiene una ecuación para la parte imaginaria:

$$\cot g\alpha = \frac{-\kappa}{k} \quad (2.51)$$

Considerando el signo (-), se obtiene para la parte real:

$$\operatorname{tg}\alpha = \frac{\kappa}{k} \quad (2.52)$$

Y para la parte imaginaria:

$$\frac{k}{\kappa} \cos\alpha + \operatorname{sen}\alpha = \frac{k}{\kappa} \cos\alpha + \operatorname{sen}\alpha$$

Nuevamente, una identidad.

Las soluciones que no son identidades [ecs. (2.51) y (2.52)] son las ecuaciones de autovalores del pozo cuadrado simétrico.

Para encontrar las expresiones para las funciones de onda, se expresan las constantes de normalización B, C y F en términos de A y, luego, haciendo uso de la condición de normalización $\int_{-\infty}^{-b} \psi_I^* \psi_I dz + \int_{-b}^b \psi_{II}^* \psi_{II} dz + \int_b^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dz = 1$, se llega a expresiones para las funciones de onda en cada región del pozo: la función de onda de cada estado estará caracterizada por su autovalor de energía, el cual se obtiene de la ecuación de autovalores [ver apéndice 1].

2.6.2 RESULTADOS

Todos los parámetros que se presentan de aquí en adelante en este trabajo se encuentran convenientemente adimensionalizados en términos de dos cantidades: el radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo (ver apéndice 4).

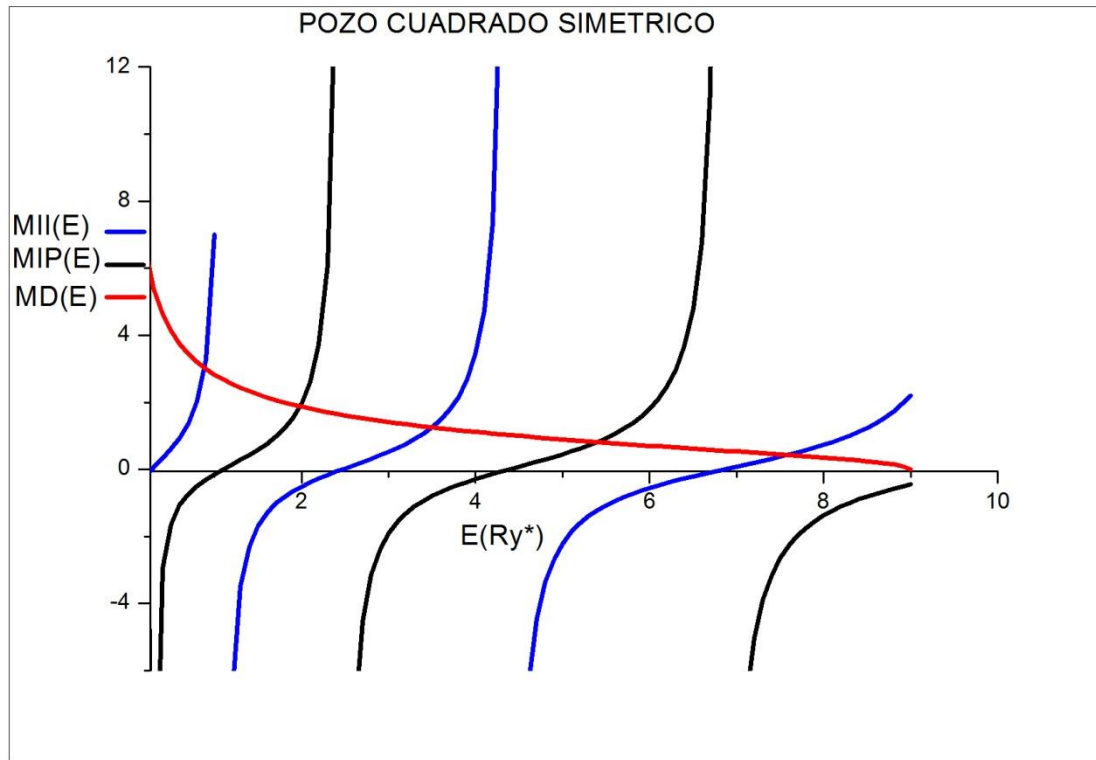


Fig. 2.18. Miembros izquierdos de las ecs.2.51 (traza roja) y 2.52 (traza azul). El miembro derecho (traza roja) es el mismo para ambas ecuaciones.

En la fig.2.18, las energías correspondientes a las intersecciones de la curva de MD(E) con las de MII(E) y MIP(E) dan, proyectando sobre el eje horizontal, los autovalores de energía correspondientes a un pozo cuadrado simétrico de altura arbitraria $V_0 = 9$. Cabe destacar que, por más pequeño que sea V_0 , siempre habrá al menos un nivel confinado en el pozo. A esta conclusión se llega luego de tomar un valor de altura de pozo tendiendo a cero, para la cual se tiene un único nivel muy próximo a V_0 .

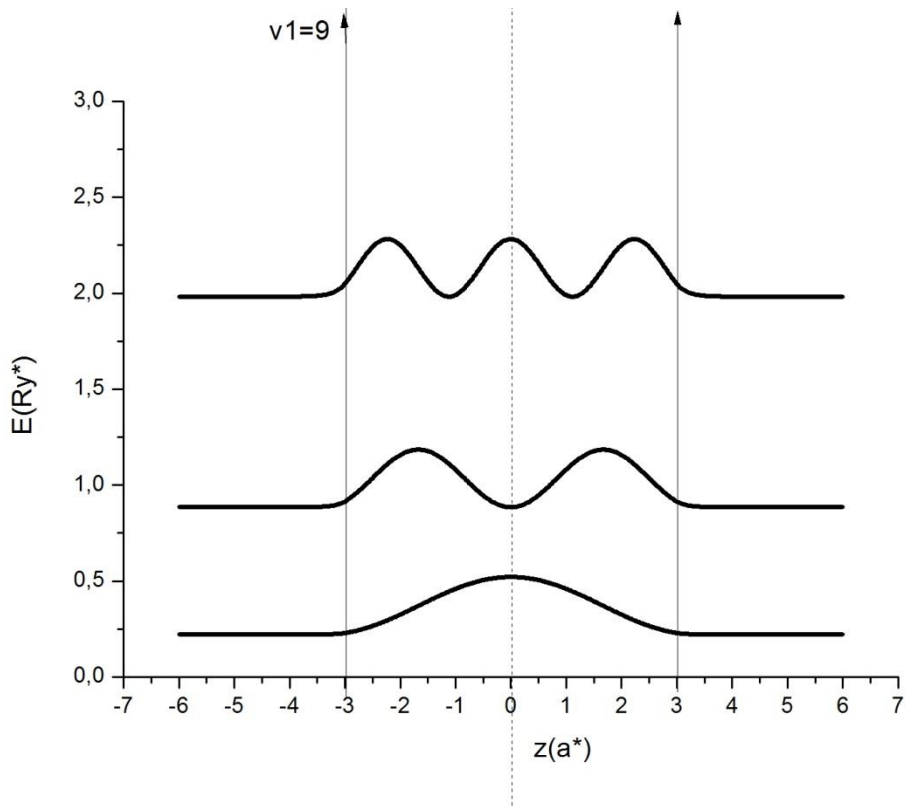


Fig. 2.19. Pozo cuadrado simétrico de altura (adimensionalizada) $V_1 = 9$. Se presentan las funciones de onda correspondientes a los tres primeros estados confinados.

En la fig.2.19, se observan las funciones de onda correspondientes a los tres primeros estados confinados el caso simétrico. Se observa que las funciones de onda son simétricas respecto al centro del pozo.

2.6.3 POZO CUADRADO ASIMÉTRICO

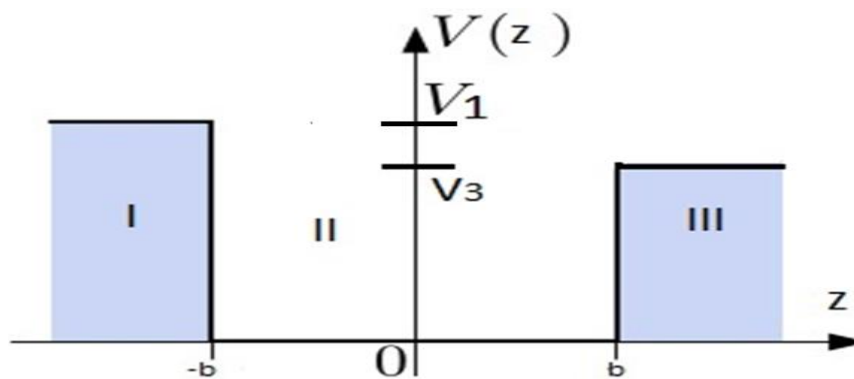


FIG.2.20. Diagrama de un pozo cuadrado asimétrico dividido en tres regiones.

Haciendo un análisis de la ecuación de Schrödinger en cada región del pozo (ver fig.2.20), análogo al caso simétrico y para $E < V_{III}$ (estados confinados), se llega al conjunto solución:

- $\psi_I = Ae^{(z+b)\kappa_I}$ (2.53)

- $\psi_{II} = Be^{ikz} + Ce^{-ikz}$ (2.54)

- $\psi_{III} = De^{-(z-b)\kappa_{III}}$ (2.55)

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \kappa_I = \sqrt{\frac{2m(V_I-E)}{\hbar^2}}, \kappa_{III} = \sqrt{\frac{2m(V_{III}-E)}{\hbar^2}}$$

Las condiciones de continuidad para la función de onda y su primera derivada permiten plantear:

1. $\psi_I(-b) = \psi_{II}(-b) \Rightarrow A = Be^{-ikb} + Ce^{ikb}$ (2.56)

2. $\psi'_I(-b) = \psi'_{II}(-b) \Rightarrow A\kappa_I = ikBe^{-ikb} - ikCe^{ikb}$ (2.57)

3. $\psi_{II}(b) = \psi_{III}(b) \Rightarrow D = Be^{ikb} + Ce^{-ikb}$ (2.58)

4. $\psi'_{II}(b) = \psi'_{III}(b) \Rightarrow -\kappa_{III}D = ikBe^{ikb} - ikCe^{-ikb}$ (2.59)

Dividiendo (2.57) por κ_I y restando (2.56) con lo anterior

$$B\left(1 - i\frac{k}{\kappa_I}\right)e^{-ikb} + C\left(1 + i\frac{k}{\kappa_I}\right)e^{ikb} = 0$$
 (2.60)

Dividiendo (2.59) por κ_{III} y restando (2.58) con lo anterior

$$Be^{ikb}\left(1 + i\frac{k}{\kappa_{III}}\right) + Ce^{-ikb}\left(1 - i\frac{k}{\kappa_{III}}\right) = 0$$
 (2.61)

El determinante de las ecuaciones igualado a cero es

$$\left(1 - i\frac{k}{\kappa_I}\right)\left(1 - i\frac{k}{\kappa_{III}}\right)e^{-2ikb} - \left(1 + i\frac{k}{\kappa_I}\right)\left(1 + i\frac{k}{\kappa_{III}}\right)e^{2ikb} = 0$$
 (2.62)

Teniendo en cuenta que

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x$$

$$\left[1 - \frac{k^2}{\kappa_I \kappa_{III}} - ik \left(\frac{1}{\kappa_I} + \frac{1}{\kappa_{III}}\right)\right] (\cos 2\alpha - i \sin 2\alpha) - \left[1 - \frac{k^2}{\kappa_I \kappa_{III}} + ik \left(\frac{1}{\kappa_I} + \frac{1}{\kappa_{III}}\right)\right] (\cos 2\alpha - i \sin 2\alpha) = 0 \quad (2.63)$$

Tomando la parte real de esta ecuación, se obtiene una identidad; mientras que, tomando la parte imaginaria, se obtiene:

$$\left(1 - \frac{k^2}{\kappa_I \kappa_{III}}\right) \sin 2\alpha + k \left(\frac{1}{\kappa_I} + \frac{1}{\kappa_{III}}\right) \cos 2\alpha = 0 \quad (2.64)$$

Que es la ecuación de autovalores del pozo cuadrado asimétrico

Con el fin de verificar esta ecuación se analiza la misma en el límite de pozo cuadrado simétrico, esto es: $\kappa_I \approx \kappa_{III} \approx \kappa$.

La ecuación de autovalores del PCA se transforma en

$$\operatorname{tg} 2\alpha = \frac{-2\frac{k}{\kappa}}{1 - \frac{k^2}{\kappa^2}} \quad (2.65)$$

Ahora bien, teniendo en cuenta la identidad

$$\operatorname{tg} 2\alpha = \frac{2 \operatorname{tg} \alpha}{1 - \operatorname{tg}^2 \alpha} \quad (2.66)$$

Entonces, se llega a una ecuación para $\operatorname{tg} \alpha$

$$\operatorname{tg}^2 \alpha + \frac{2}{\operatorname{tg} 2\alpha} \operatorname{tg} \alpha - 1 = 0 \quad (2.67)$$

Resolviendo la ecuación

$$\operatorname{tg} \alpha_{1,2} = \frac{-1}{\operatorname{tg} 2\alpha} \pm \frac{1}{\operatorname{tg} 2\alpha} (1 + \operatorname{tg}^2 2\alpha)^{\frac{1}{2}} \quad (2.68)$$

Tomando aparte

$$\sqrt{1 + tg^2(2\alpha)} = \sqrt{1 + \frac{\frac{4k^2}{\kappa^2}}{\left(1 - \frac{k^2}{\kappa^2}\right)^2}} = \frac{1}{\left(1 - \frac{k^2}{\kappa^2}\right)} \left(1 + \frac{k^2}{\kappa^2}\right) \quad (2.69)$$

Ahora, reemplazando lo anterior en (1.68)

$$tg\alpha = \frac{1 - \frac{k^2}{\kappa^2}}{2\frac{k}{\kappa}} \pm \frac{1 + \frac{k^2}{\kappa^2}}{2\frac{k}{\kappa}} \quad (2.70)$$

Considerando la suma

$$tg\alpha = \frac{\kappa}{k} \quad (2.71)$$

Y tomando la resta

$$cotg\alpha = \frac{-\kappa}{k} \quad (2.72)$$

Estas últimas son las ecuaciones de autovalores del pozo cuadrado simétrico, con lo que queda demostrado analíticamente que el caso asimétrico tiende al simétrico cuando las alturas de las paredes del pozo tienden a igualarse.

Para obtener las funciones de onda se procede en forma análoga al caso simétrico, mediante las ecuaciones 2.53 a 2.55) se expresa una constante en término de las otras (A, B y D en términos de C), para luego obtener aquella haciendo uso de la condición de normalización (ver apéndice 2).

2.6.4. RESULTADOS

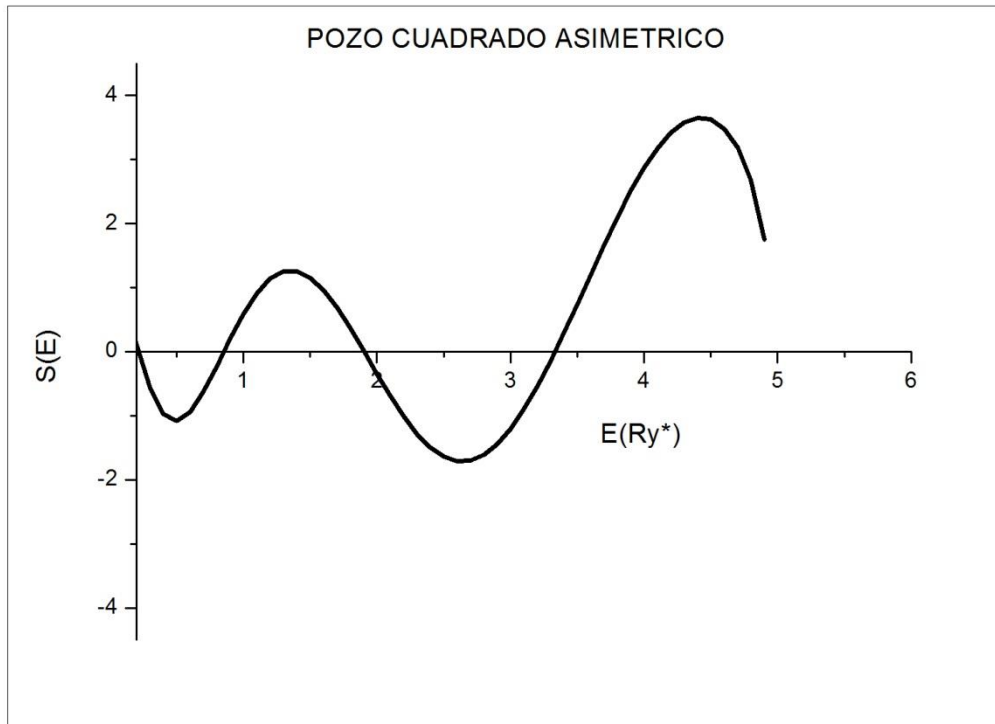


Fig. 2.21. Representación de la ecuación de autovalores (ec.2.44, denotada como $S(E)$) del pozo cuadrado asimétrico con $V_1 = 9$ y $V_3 = 5$ (magnitudes completamente adimensionalizadas).

En la fig.2.21, nuevamente, las intersecciones con los valores de EA en donde $S(EA)$ se hace cero, determinan los autovalores de energía (adimensionales) del pozo confinante. Esta figura se presentó con el fin mostrar la forma de la ecuación de autovalores para un determinado valor tanto de V_1 como de V_3 . A continuación se analiza cómo los valores de energía de los ceros del pozo cuadrado asimétrico se aproximan a los del pozo simétrico a medida que la relación entre las alturas de las paredes tiende a 1 ($V_3 \rightarrow V_1$).

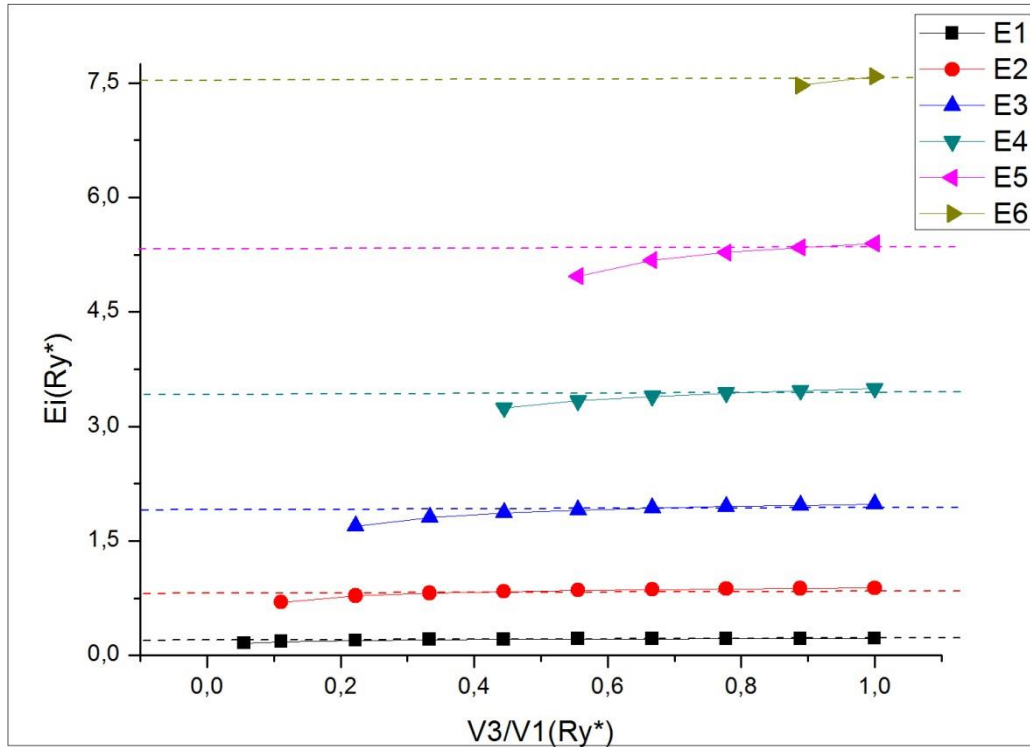


Fig. 2.22. Representación gráfica que muestra los estados confinados para distintas relaciones entre V_3 y V_1 . En líneas de trazos se indican los niveles de energía correspondientes a un pozo cuadrado simétrico de altura $V_0 = 9$.

En la fig.2.22. se ve que a medida que aumenta la relación V_3/V_1 ($V_1 = 9$), los niveles de energía del pozo asimétrico tienden, tanto en cantidad (si $V_3=1$, hay un nivel; si $V_3 = 2$, hay dos niveles, etc.) como en valor, al caso del pozo cuadrado simétrico (el caso $\frac{V_3}{V_1} = 1$ corresponde al pozo cuadrado simétrico). Además se observa que el nivel fundamental es el que menos variación presenta y se reafirma que aunque la altura del pozo sea muy pequeña, siempre hay al menos un nivel confinado, pues el nivel fundamental sigue estando por más pequeño que sea V_3 .

A continuación, se presentan los cuadrados de las funciones de onda (normalizadas) correspondientes a los primeros niveles confinados de los pozos cuadrado simétrico y asimétrico y se analizarán diferencias entre ambos casos.

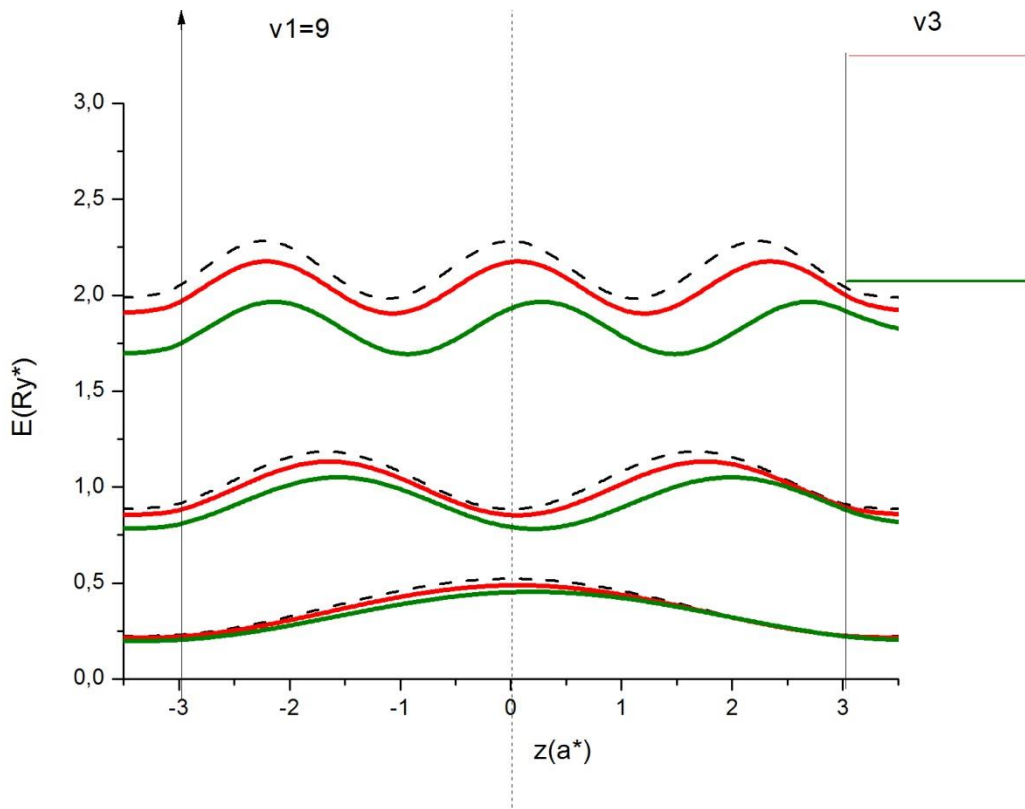


Fig. 2.23. Cuadrado de la función de onda normalizada para los tres primeros niveles del pozo cuadrado asimétrico con $V_1 = 9$ y $V_3 = 5$ (rojo), y $V_3 = 2$ (verde). Las gráficas se desplazaron verticalmente para mejorar su visualización: se ubicaron a la energía que corresponde a su autovalor. La línea de trazos corresponde al caso del pozo cuadrado simétrico.

En la fig.2.23, se observan las funciones de onda correspondientes a los tres primeros estados confinados para $V_3 = 2$ (en verde) y $V_3 = 5$ (en rojo), y el caso simétrico (en líneas de trazos). Se marcó el centro del pozo a fin de resaltar la asimetría de las funciones: cuanto mayor es la diferencia de “alturas” se evidencia que la función de onda, que para el caso simétrico (fig.2.19) tiene la misma amplitud y curvatura en ambos lados del pozo, comienza a perder dicha simetría. En la región donde el potencial es menor, la amplitud de la función de onda aumenta; esto significa que aumenta la probabilidad de encontrar la partícula en la región de la barrera derecha, respecto a la izquierda. Además, se observa que al aumentar V_3 (esto es, al reducir la asimetría del pozo) aumenta la energía de los niveles del pozo. Cabe aclarar que en lo anterior, las funciones de onda se posicionaron (verticalmente) teniendo en cuenta la energía del correspondiente autovalor.

2.6.5 POZO TRIANGULAR INFINITO

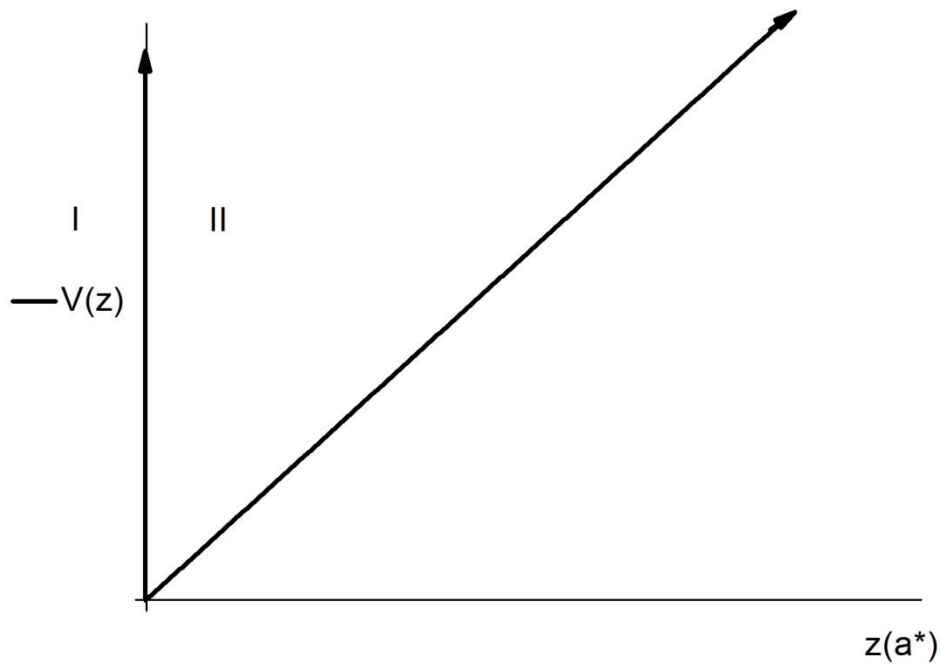


FIG.2.24. Esquema representando el pozo triangular asimétrico infinito dividido en dos regiones.

El pozo triangular de potencial, representado en la fig.2.24 resulta útil porque es la descripción más simple de un pozo de potencial formado por el doblamiento de bandas en la superficie de un semiconductor (band bending) o en la interfaz entre dos semiconductores. En el caso del band bending formado en la superficie, la región a la izquierda de $z = 0$ representa el vacío y a la derecha el volumen del semiconductor. Consiste de una barrera infinitamente alta para $z < 0$ con un potencial lineal $V(z) = eFz$ para $z > 0$ (e es la carga del electrón, F es el campo eléctrico asociado a este potencial). Es conveniente escribir $V(z)$ de esta manera para que así describa una carga en un campo (el producto eF se supone positivo).

Se debe resolver la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi}{dz^2} + (eFz - E)\psi = 0 \quad (2.73)$$

Donde E es la energía de la partícula. Evidentemente, en este caso, todos los autovalores de energía corresponden a estados confinados.

Con el fin de simplificar la ec. de Schrödinger y llevarla a la forma regular de una ecuación diferencial, se consideran los siguientes cambios de variables:

$$u = eF \left(z - \frac{E}{eF} \right) \quad (2.74)$$

Tal que

$$\frac{d}{dz} = \frac{d}{du} \frac{du}{dz} = \frac{eF}{\frac{\hbar^2}{2m}} \frac{d}{du}$$

y

$$\frac{d^2}{dz^2} = \left(\frac{eF}{\frac{\hbar^2}{2m}} \right)^2 \frac{d^2}{du^2}$$

Y luego

$$u' = \frac{u}{\left(e^2 F^2 \frac{\hbar^2}{2m} \right)^{\frac{1}{3}}} \quad (2.75)$$

Entonces, la ecuación de Schrödinger (2.73), en estas nuevas variables, queda

$$\left(\frac{d^2}{du'^2} - u' \right) \psi = 0 \quad (2.76)$$

Las funciones de Airy regular Ai e irregular Bi (ver figs. 2.25 y 2.26) son soluciones de la ec. 2.76 [35], como ambas funciones de Airy son linealmente independientes, se escribe la solución general de la ecuación de Schrödinger como combinación lineal de ambas.

$$\psi(z) = aAi(u') + bBi(u') \quad (2.77)$$

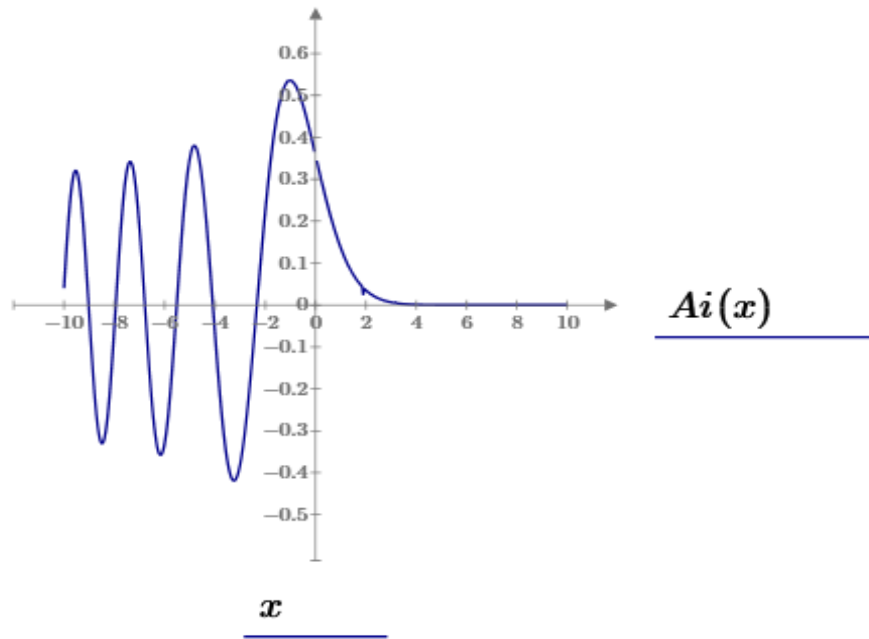


FIG.2.25. Función de Airy $Ai(x)$.

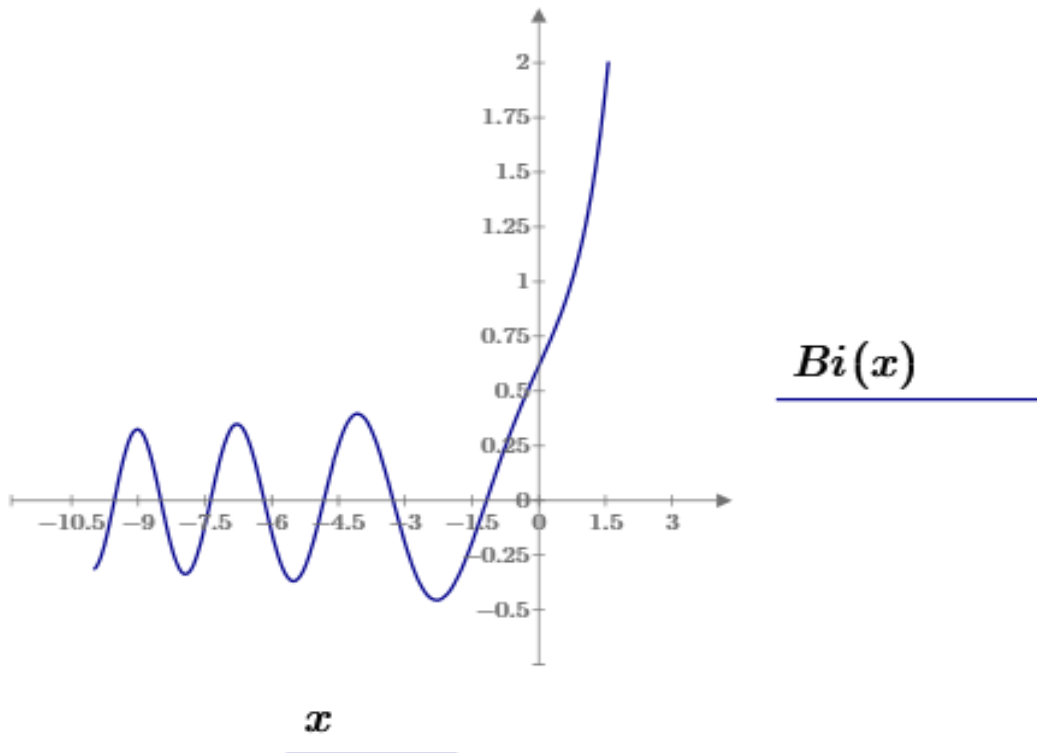


FIG.2.26. Función $Bi(x)$.

Teniendo en cuenta el cambio de variable (2.74) en (2.75), a fin de relacionar u' con z

$$u' = \frac{Fe \left(z - \frac{E}{Fe} \right)}{\left(e^2 F^2 \frac{\hbar^2}{2m^*} \right)^{\frac{1}{3}}} = \left(eF \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(z - \frac{E}{eF} \right) = \beta(z - \alpha) \quad (2.78)$$

Donde

$$\beta = \left(eF \frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.79)$$

$$\alpha = \frac{E}{eF} \quad (2.80)$$

Entonces, la función de onda en términos de z , en la región $z > 0$, queda:

$$\psi(z) = aAi(\beta(z - \alpha)) + bBi(\beta(z - \alpha)) \quad (2.81)$$

A continuación se particularizará la solución general para este problema particular. En el límite $z = \infty$ la función Bi diverge (ver fig.2.26). Dado que la función de onda debe ser finita en todo el espacio, es necesario exigir $b = 0$. De esta manera, la función de onda queda:

$$\psi(z) = aAi(\beta(z - \alpha)) \quad (2.82)$$

Mientras que para $z = 0$ la función Ai debe anularse (pues para $z \leq 0$ la altura de la barrera es infinita):

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow Ai(-\beta\alpha) = 0 \quad (2.83)$$

Esta última es la ecuación de autovalores del pozo.

Haciendo uso de la condición de normalización

$$\int_0^{\infty} \psi^2(z) dz = 1 \quad (2.84)$$

Se puede encontrar la constante de normalización a (ec.2.82) y tener así una expresión explícita para la función de onda dentro del pozo. Para obtener los valores de a se procede de la misma manera que en los casos anteriores.

2.6.6 RESULTADOS

Ahora, se representarán las funciones de onda del pozo triangular asimétrico:

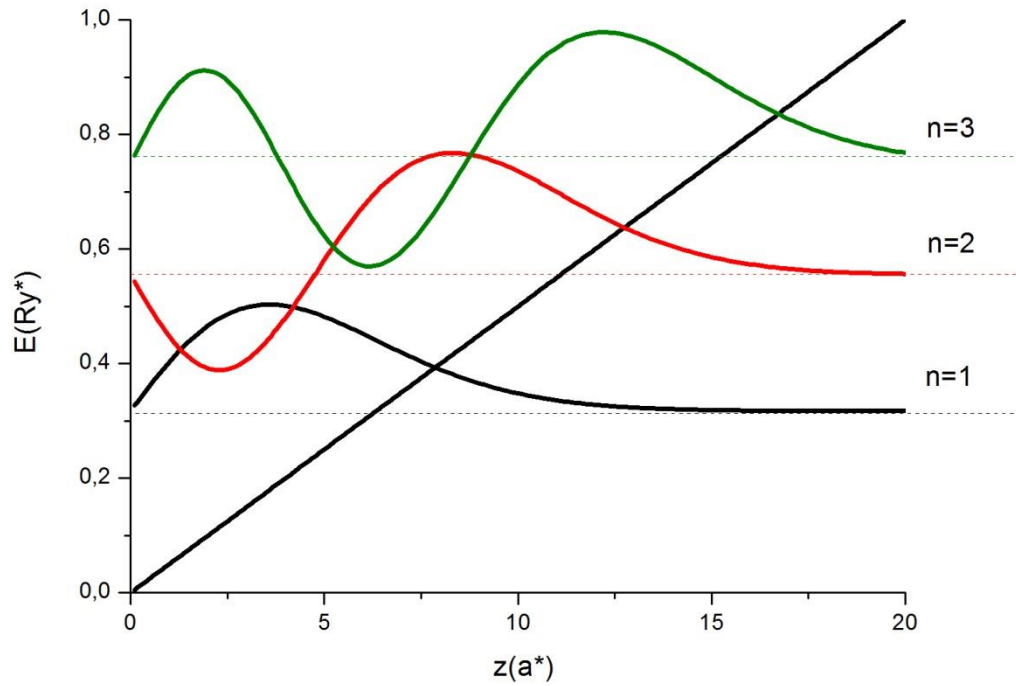


Fig.2.27. Representación de las funciones de onda correspondientes a los tres primeros niveles de energía de un pozo triangular asimétrico infinito de pendiente $\bar{E} = 0,05$. La energía se mide en unidades del Rydberg efectivo (ver apéndice 4).

En la fig. 2.27, el desplazamiento vertical de las funciones de onda se hizo para indicar la energía de los autovalores. A medida que el campo eléctrico aumenta, los niveles de energía se encuentran más separados uno de otros y hay un correspondiente aumento en sus autovalores. Los valores de los parámetros aquí tomados en cuenta no atañen a ningún semiconductor en particular, sino que fueron introducidos como valores de prueba para estudiar las propiedades de este potencial.

Cabe destacar que la distribución de carga que genera este potencial es la de un plano infinito: un plano infinito con densidad de carga superficial σ crea un campo eléctrico en la dirección perpendicular al plano de valor constante

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{2\epsilon_0} \quad (2.85)$$

Si z es la dirección perpendicular al plano y si este se encuentra en $z = 0$ el potencial eléctrico resulta

$$V(z) = \frac{\sigma}{2\epsilon_0} z \quad (2.86)$$

2.6.7 MODELO CUADRÁTICO DE POTENCIAL PARA DESCRIBIR EL DOBLAMIENTO DE BANDAS

En la sección anterior se introdujo un modelo lineal para el band bending, a continuación se verá un modelo más realista, pero que se resolverá por integración numérica.

Obtener el perfil de potencial $V(z)$ generado por una distribución espacial de carga $\rho(z)$, implica resolver la ecuación de Poisson:

$$\frac{d^2V}{dz^2} = \frac{-\rho(z)}{\epsilon\epsilon_0} \quad (2.87)$$

Donde ϵ es la constante dieléctrica relativa y ϵ_0 es la permitividad del vacío.

Normalmente es suficiente considerar la dependencia con una única coordenada z perpendicular a la superficie (ubicada en $z = 0$). La idea es resolver (2.87) para una determinada propuesta de distribución espacial de carga. Un modelo bastante simple de $\rho(z)$ se verá a continuación.

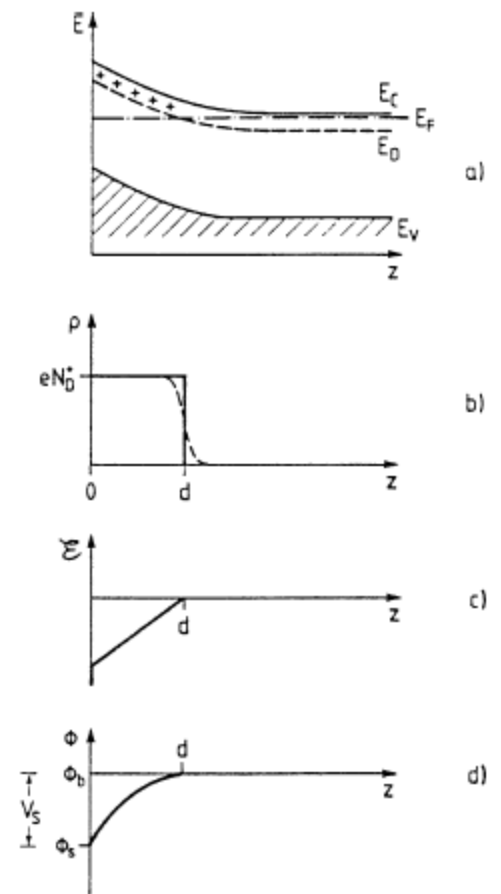
Una solución simple de la ecuación de Poisson (2.87) es posible para zonas de agotamiento "fuertes". Fuertes en el sentido que el máximo doblamiento de bandas $|eV_s|$ excede significativamente kT .

$$|eV_s| \gg kT \quad (2.88).$$

Se enfocará la atención en la zona de agotamiento de semiconductor tipo n (fig.2.27). El caso de uno tipo p se obtiene cambiando los signos correspondientes a la carga. En un semiconductor de tipo n la carga espacial positiva en la zona de agotamiento se debe a donores ionizados del bulk (densidad N_D , si está ionizado N_D^+). Por la ec. 2.88 los electrones libres en la banda de conducción pueden ser despreciados dentro de la zona de carga espacial. De acuerdo a la estadística de Fermi, la ocupación de los niveles

donores del bulk cambia de casi uno a cerca de cero dentro de aproximadamente $4kT$. Para doblamiento de bandas fuerte (ec.2.88), el cambio de ocupación que determina cuán abrupto (a lo largo de z) es el borde interior de la zona de agotamiento se produce en una distancia muy corta en comparación con el ancho de la zona de agotamiento d (Fig 2.27.a). Como se ve cualitativamente en la Fig.2.27.b. la dependencia con z de la densidad de carga espacial ρ puede ser aproximada por una función escalón con: $Q_{sc} = eN_D^+d \cong eN_Dd$

Fig. 2.27. a-d. Una zona de agotamiento en un semiconductor tipo n en la aproximación de Schottky: a) Esquema de bandas y niveles de impurezas donoras b) densidad volumétrica ρ de carga espacial: realista (línea de trazos) y la aproximación de Schottky (línea llena). d es el ancho de la zona de carga espacial y N_D^+ es la densidad de donores ionizados del bulk. c) Campo eléctrico $\varepsilon(z)$ en la zona de carga espacial. d) Potencial eléctrico $\phi(z)$ con valores ϕ_b y ϕ_s en el bulk y en la superficie, respectivamente.



Si, dentro de la región de carga espacial, se supone que los donores están completamente ionizados. La ecuación de Poisson (ec.2.87) se transforma

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = \frac{d^2V}{dz^2} = -\frac{d\varepsilon}{dz} = -\frac{\rho}{\epsilon\epsilon_0} = -\frac{eN_D}{\epsilon\epsilon_0}. \quad (2.89)$$

Una integración lleva al campo eléctrico $\varepsilon(z)$ dentro de la zona de carga espacial (fig 2.27.c):

$$\varepsilon(z) = \frac{eN_D}{\epsilon\epsilon_0}(z - d), \quad 0 \leq z \leq d. \quad (2.90)$$

Una segunda integración permite obtener el potencial $\phi(z)$ (Fig.2.27.d):

$$\phi(z) = \phi_b - \frac{eN_D}{\epsilon\epsilon_0}(z - d)^2, \quad 0 \leq z \leq d. \quad (2.91)$$

Y el potencial máximo V_s (band bending) en la superficie

$$V_s = \phi_s - \phi_b = -\frac{eN_D d^2}{\epsilon\epsilon_0} \quad (2.92)$$

A diferencia del signo, el cálculo para una zona de agotamiento de huecos en un material tipo p es análogo.

El potencial descrito por la ec.2.93 (ver fig.2.28) viene dado por

$$V(z) = \left\{ \begin{array}{ll} \infty, & \text{si } z \leq 0 \\ -\frac{e^2 N_D d^2}{2\epsilon\epsilon_0} (z - d)^2, & \text{si } 0 < z < d \\ V_0, & \text{si } z \geq d \end{array} \right\}$$

Donde d representa el ancho del band bending.

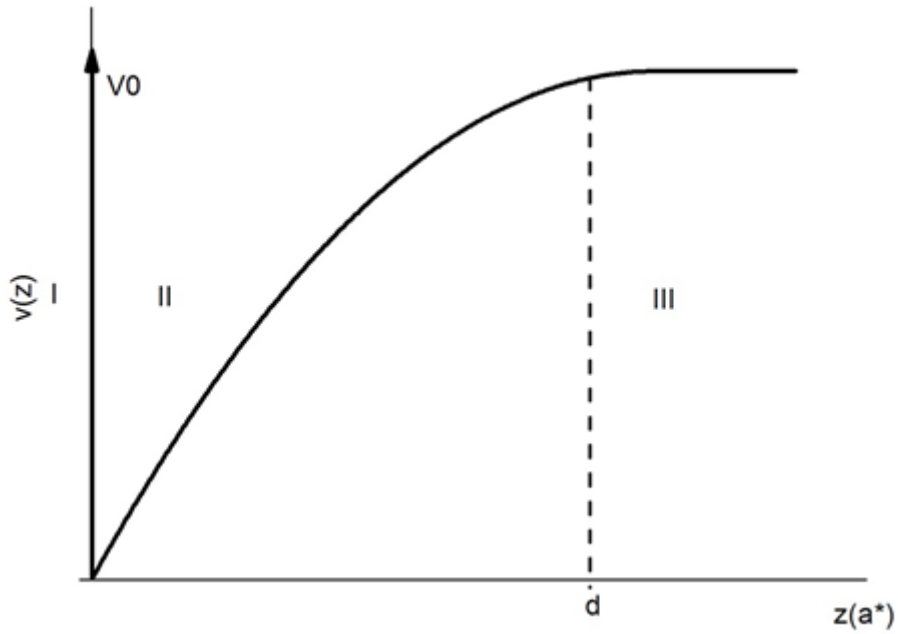


Fig.2.28. Esquema representando el pozo cuadrático asimétrico dividido en tres regiones.

La ecuación de Schrödinger a resolver es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{e^2 N_D}{2\epsilon\epsilon_0} (z-d)^2 \psi = E\psi \quad (2.93)$$

Dividiendo lo anterior miembro a miembro por $-\frac{\hbar^2}{2m}$ y reacomodando

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \left[\frac{2me^2 N_D}{\hbar^2 2\epsilon\epsilon_0} (z-d)^2 + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] \psi = 0 \quad (2.94)$$

A fin de lograr la adimensionalización de los parámetros que aparecen en (2.94), se opera como sigue:

Multiplicando a ambos miembros de (2.94) por el radio de Bohr efectivo a_0^{*2}

$$a_0^{*2} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \left[\frac{2me^2 N_D a_0^{*2}}{\hbar^2 2\epsilon\epsilon_0} (z-d)^2 + \bar{E} \right] \psi = 0 \quad (2.95)$$

Reacomodando el primer sumando de la ecuación anterior y, multiplicando y dividiendo el segundo sumando por a_0^{*2}

$$\frac{d^2\psi}{d\bar{z}^2} + [\bar{a}(\bar{z} - \bar{d})^2 + \bar{E}] \psi = 0 \quad (2.96)$$

Donde

$$\bar{a} = \frac{me^2 N_D a_0^{*4}}{\hbar^2 \epsilon \epsilon_0} = \frac{\bar{V}_0}{d^2} \quad (2.97)$$

Y, nuevamente, el parámetro adimensional se denota por una barra sobre el parámetro.

La resolución de la ecuación (2.96) se lleva a cabo de forma numérica, a través del programa Mathematica. Dicho programa, a partir del método de factorización de Arnoldi [36], determina los niveles de energía del pozo de forma creciente.

CAPÍTULO 3

3.1 POZO TRIANGULAR ASIMÉTRICO ACOTADO

En esta sección se estudiará un modelo de doblamiento de bandas que consiste en un potencial que varía linealmente en la zona de band bending: el potencial lineal acotado. Bajo la aproximación de masa efectiva se resolverá de forma exacta la ecuación de Schrödinger para una partícula en este potencial.

El análisis de este modelo incluirá:

- Una evaluación, tanto analítica como gráfica de los niveles de energía del pozo triangular acotado en dos casos límites: límite al potencial triangular infinito o “cuña”, y límite al continuo.
- Determinar qué perfil de potencial lineal (infinito o acotado) representa mejor al modelo cuadrático.

Una vez evaluado el modelo, se lo aplicará al caso de band bending en el ZnO y el STO: analizando los niveles del pozo con respecto al caso parabólico, se hará un diseño de un pozo triangular asimétrico acotado ajustado al pozo cuadrático, de manera tal que el apartamiento de los mismos sea el menor posible. Para este diseño de pozo, se obtendrán: el número estados confinados, sus correspondientes energías, funciones de onda y densidades de carga electrónicas.

Se trata de un potencial lineal truncado en la dirección z (dirección de crecimiento del semiconductor); este modelo es una mejor aproximación al potencial real que el potencial triangular infinito estudiado en la literatura [7] y revisado en este manuscrito en la sección 2.6.5. De todos modos cabe aclarar que el mismo se ajusta a una distribución bi-dimensional de carga sobre un único plano (superficie de un semiconductor o interfaz entre semiconductores): Supóngase un capacitor formado por dos placas iguales de área S , separadas una distancia d , pequeña en comparación con las dimensiones de las placas. El campo eléctrico se cancela en la región del espacio situado fuera de las placas, y se suma en el espacio situado entre las placas. Por tanto, solamente existe campo entre las placas del condensador, siendo despreciable fuera de las mismas (fig.3.1.a). Asimismo, como el campo es constante, la diferencia de potencial entre las placas se calcula multiplicando el módulo del campo por la separación entre las mismas (fig.3.1.b).

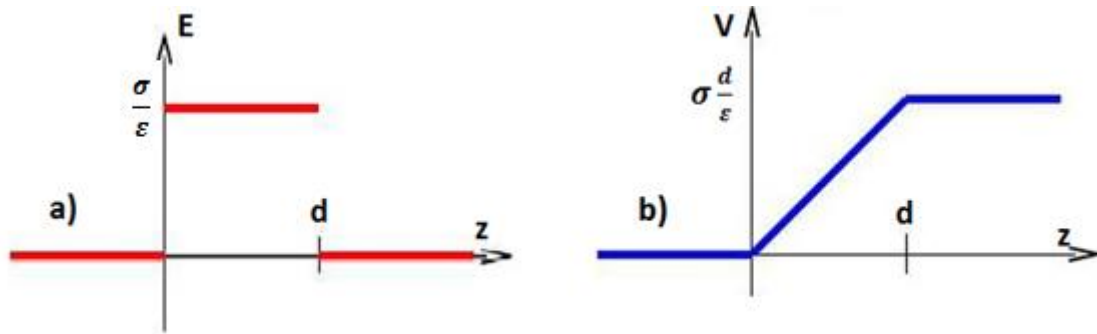


Fig.3.1. a) Campo eléctrico de un capacitor de capas paralelas. b) Potencial eléctrico de un capacitor de placas paralelas.

Por lo tanto, la distribución de carga que ajusta al modelo de potencial triangular acotado es la de dos placas cargadas separadas una distancia igual al ancho del pozo. Para completar el esquema de nuestro modelo, aplicado al band bending en la superficie de un semiconductor, debe considerarse que la región negativa de z está conectada a un potencial mucho mayor que la profundidad del pozo de potencial.

Este modelo se esquematiza en la figura 3.2; se trata de un potencial por partes:

$$V(z) = \begin{cases} \infty, & \text{si } z < 0 \\ eFz, & \text{si } 0 < z < d \\ V_0, & \text{si } z \geq d \end{cases}$$

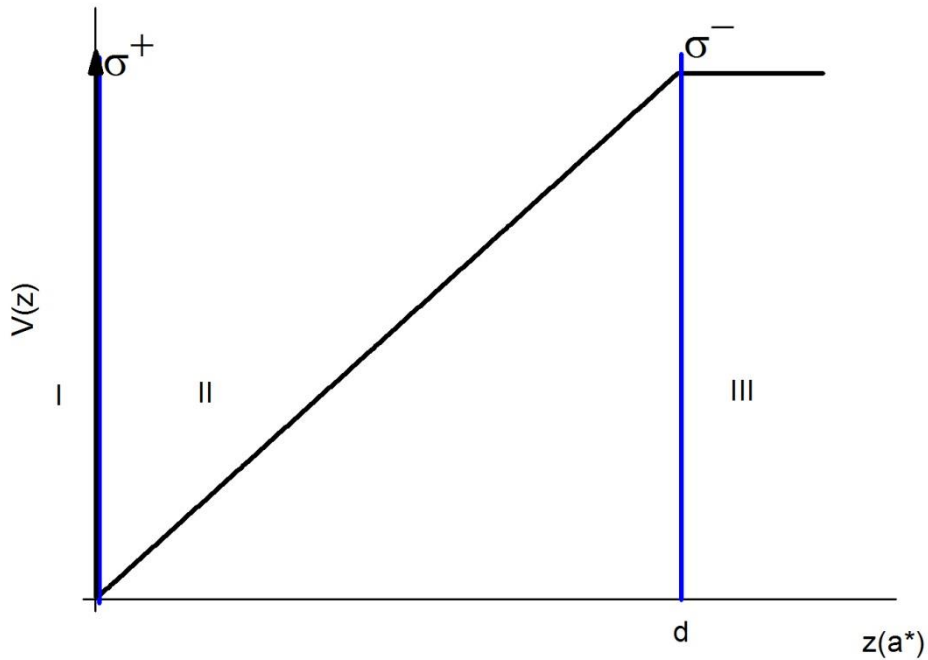


Fig.3.2. Esquema representando el pozo triangular asimétrico (de ancho d) acotado dividido en tres regiones.

Como este potencial es esencialmente una modificación del caso del pozo triangular infinito, en la región I (ψ_I) se tiene que la función de onda debe ser nula (barrera infinita) y en la región II (ψ_{II}) la solución para la función de onda es de la forma general dada por la ecuación 2.62. Para la función de onda en la tercera región (ψ_{III}), se tiene en cuenta que más allá del pozo la función de onda será una exponencial decreciente, siempre que se esté interesado en estados confinados ($E < V_0$).

Así, si la energía es menor que la profundidad del pozo (pues se están estudiando espectros de estados ligados), se puede escribir el conjunto de funciones de onda para las tres regiones según:

$$\psi(z) = \left\{ \begin{array}{ll} 0, & z \leq 0 \\ aAi(\beta(z - \alpha)) + bBi(\beta(z - \alpha)), & 0 < z \leq d \\ ce^{-\kappa(z-d)}, & z > d \end{array} \right\} \quad (3.1)$$

Donde d es el ancho del pozo, a , b y c son constantes de normalización y

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (3.2)$$

Cabe aclarar que, de manera análoga a la resolución de la ecuación de Schrödinger para el pozo cuadrado simétrico, la solución general en la región III del pozo es una combinación lineal de funciones exponenciales; donde nuevamente solo persiste el término de la exponencial decreciente pues la función de onda debe permanecer finita para todo z y el término $e^{\kappa(z-d)}$ no satisface dicho requerimiento para $z \rightarrow \infty$.

Las condiciones de continuidad para la función de onda y su primera derivada permiten plantear:

$$1. \quad \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow 0 = aAi(-\beta\alpha) + bBi(-\beta\alpha) \quad (3.3)$$

$$2. \quad \psi_{II}(d) = \psi_{III}(d) \Rightarrow aAi(\beta(d - \alpha)) + bBi(\beta(d - \alpha)) = c \quad (3.4)$$

$$3. \quad \psi'_{II}(d) = \psi'_{III}(d) \Rightarrow aAi'[-\beta(\alpha - d)] + bBi'[-\beta(\alpha - d)] = -\kappa c \quad (3.5)$$

Resolviendo el determinante 3x3 del sistema de ecuaciones formado por las ecs.(3.3), (3.4) y (3.5) e igualado a cero, se obtiene:

$$\beta e^{-\kappa d}(-A_1 B'_2 + B'_1 A_2) + \kappa e^{-\kappa d}(A_2 B_1 - B_2 A_1) = 0 \quad (3.6)$$

Donde $A_1 = Ai(-\beta\alpha)$, $A_2 = Ai(-\beta(\alpha - d))$, $B_1 = Bi(-\beta\alpha)$, $B_2 = Bi(-\beta(\alpha - d))$.

Reordenando (3.6)

$$\beta(A'_2 B_1 - A_1 B'_2) + \kappa(A_2 B_1 - B_2 A_1) = 0 \quad (3.7)$$

Esta última es la ecuación de autovalores para el pozo triangular asimétrico acotado.

Para obtener las expresiones de las funciones de onda, se trabaja para dejar una constante de normalización en término de las otras (a y b en términos de c), para luego, haciendo uso de la condición de normalización, obtener expresiones para las funciones de onda en cada región del pozo (ver apéndice 3).

3.2 RESULTADOS

En primer lugar, se hizo una evaluación de los niveles de energía del pozo triangular acotado en dos casos límites: cuando el ancho d aumenta manteniendo la altura V_0 constante (límite al potencial triangular infinito o “cuña”), y cuando disminuye V_0 con d constante (límite al continuo). Dichos límites se evaluaron tanto analítica como gráficamente.

Cabe aclarar que existen otras maneras de ir al límite del potencial cuña: i) aumentar V_0 , manteniendo d constante y ii) aumentar V_0 y d , manteniendo la relación V_0/d constante.

3.2.1 LÍMITE AL POTENCIAL CUÑA

Se verificará que tomando el límite $d \rightarrow \infty$, en (3.7), se obtiene la ecuación de autovalores del pozo triangular asimétrico infinito (2.83).

En el apéndice 5 se demuestra que la expresiones adimensionales de α y β son

$$\alpha = \frac{E}{V_0} d \quad (3.8)$$

$$\beta = \left(\frac{V_0}{d}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (3.9)$$

A partir de lo anterior, se tiene que cuando $d \rightarrow \infty$

$$-\alpha\beta \rightarrow \infty$$

Y además

$$-\beta(\alpha - d) \rightarrow \infty$$

Y, si se observan las figs.2.25 y 2.26, en donde se muestra el comportamiento de las funciones de Airy, se puede concluir que cuando $d \rightarrow \infty$

$$A_1 \rightarrow Ai(-\infty), B_1 \rightarrow Bi(-\infty), B_2 \rightarrow \infty, B'_2 \rightarrow \infty \text{ y } A_2, A'_2 \rightarrow 0,$$

Entonces, en este límite, la ecuación de autovalores (3.7) queda

$$A_1(-\beta B'_2 - \kappa B_2) = 0 \quad (3.10)$$

Si la ec.3.10 se redujera a $A_1 = 0$, entonces quedaría demostrado que en este límite la ecuación de autovalores del pozo triangular acotado tiende a la del pozo triangular infinito. Por lo que se debe probar que la suma entre paréntesis en la ecuación 3.10 es distinta de cero para cualquier valor de energía. Esto es, se debe probar que

$$\frac{B'_2}{B_2} \neq -\frac{\kappa}{\beta} \quad (3.11)$$

Esta verificación se llevó a cabo gráficamente para energías menores al borde del pozo. Representando gráficamente ambos miembros de la ec. (3.11) se tiene

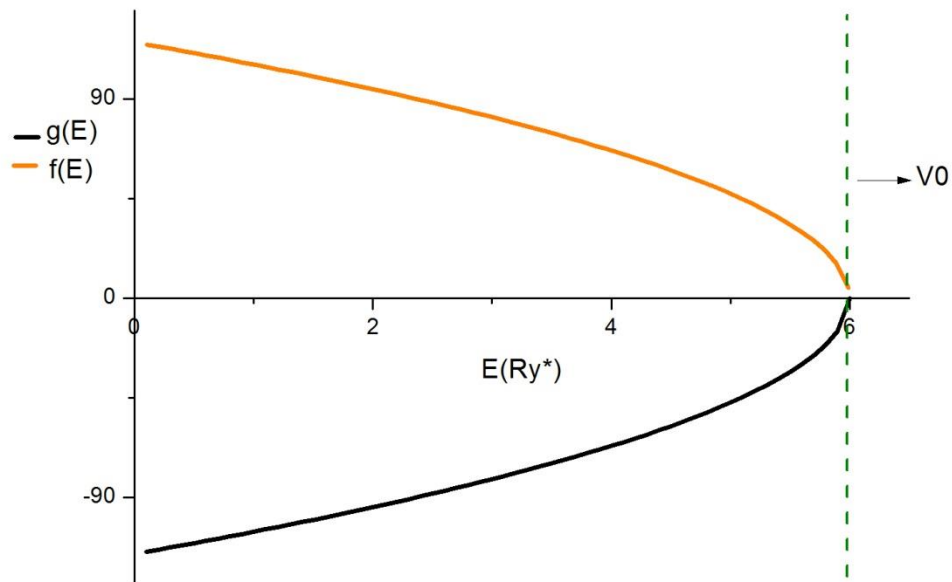


Fig.3.3. Representación gráfica de $\frac{B'_2}{B_2}$ (traza naranja) y $-\frac{\kappa}{\beta}$ (traza negra). Se consideró un ancho de pozo d (adimensionalizado en términos del radio de Bohr efectivo) muy grande (del orden de 10^6) puesto que se está analizando el límite $d \rightarrow \infty$ y un valor de V_0 adimensional igual a 6.

Donde

$$f = \frac{B'_2}{B_2} = \frac{4[-\beta(\alpha - d)]^{\frac{3}{2}} - 1}{4[-\beta(\alpha - d)]} \quad (3.12)$$

$$g = -\frac{\kappa}{\beta} \quad (3.13)$$

Por lo que queda demostrado que $f \neq g$. Es decir

$$Ai(-\beta\alpha) = 0$$

Siendo esta última la ecuación de autovalores del pozo triangular asimétrico infinito (o de cuña) como se ve en la ec. (2.83)

Dicho límite también puede ser analizado evaluando la diferencia entre $\beta\alpha$ para un pozo triangular y esta misma cantidad para un pozo triangular acotado, en función del ancho de este último (fig.3.4).

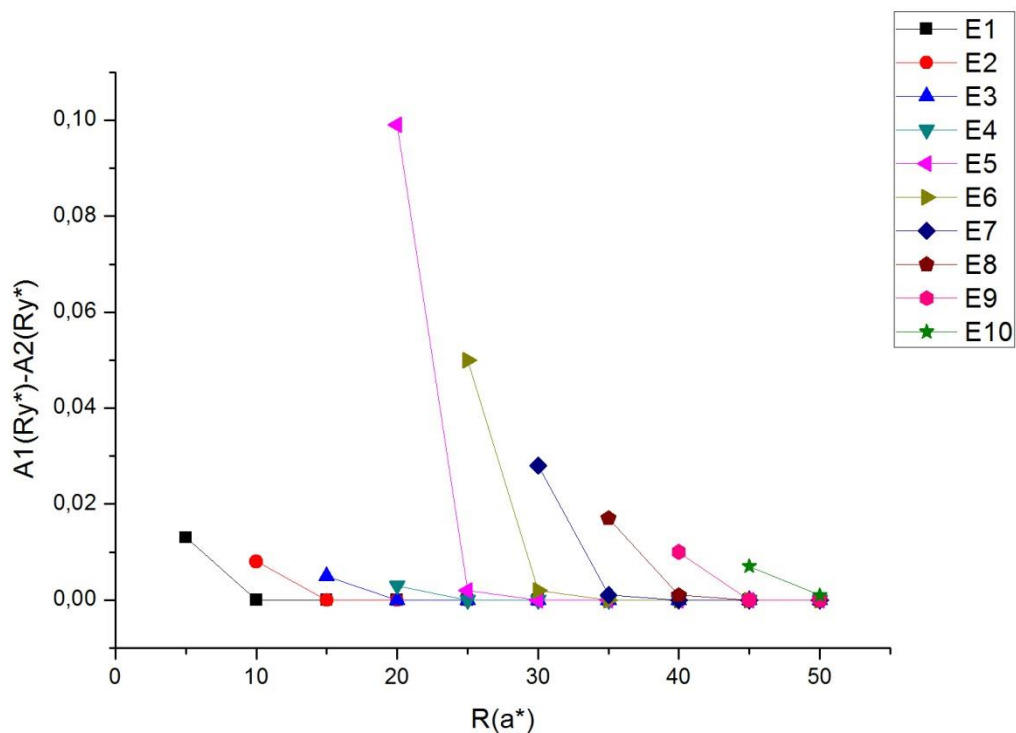


Fig.3.4. Diferencia entre $\beta\alpha$ para un pozo triangular infinito (A_1) y $\beta\alpha$ para un pozo triangular acotado (A_2) en función del ancho de este último. V_0 se mantuvo constante.

En la fig.3.4 se puede apreciar que a medida que el ancho del pozo acotado aumenta, $A_1 \rightarrow A_2$ (pues su resta tiende a cero) para todos los niveles, por lo que se puede concluir que el pozo acotado tiende al infinito para anchos grandes pues el producto $\beta\alpha$ en este último determina los autovalores de energía. Es decir, en el límite $d \rightarrow \infty$ los niveles del pozo acotado tienden a los del pozo infinito.

3.2.2 LÍMITE AL CONTINUO

Si $V_0 \rightarrow 0$, entonces $V_0 - E \rightarrow 0$ pues a medida que la altura del pozo disminuye, también lo hace la cantidad de estados confinados hasta que queda un solo nivel de energía (un pozo confina al menos un nivel). Si la altura del pozo continúa decreciendo, el valor de energía de dicho nivel tiende cada vez más a V_0 (ver fig.3.5). Por lo tanto, según la ec.3.2., $\kappa \rightarrow 0$.

Además, en este límite β también tiende a cero por la dependencia que tiene esta cantidad con V_0 , como se observa en la ec. A5-15 (apéndice 5).

Entonces, cuando la altura del pozo tiende a cero, la ecuación de autovalores del pozo triangular acotado (ec.3.7) se verifica para cualquier valor de energía, lo cual es equivalente a decir que se tiene un espectro continuo de energía, que es lo esperado para un potencial chato.

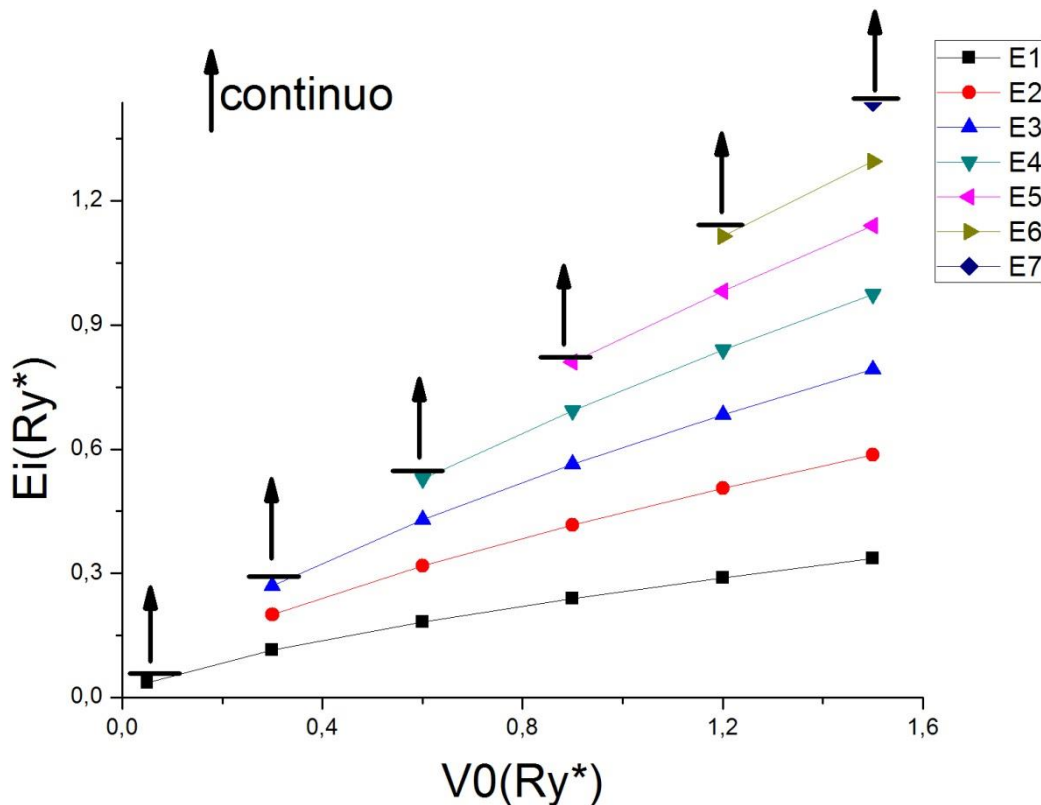


Fig.3.5. Variación en los niveles de energía de un pozo triangular asimétrico de ancho constante ($d = 28$) a medida que la altura del pozo va disminuyendo.

En la fig. 3.5. se puede observar que cuando V_0 tiende a cero, el continuo se va cerca de cero.

3.2.3 PERFIL MÁS REPRESENTATIVO DEL POZO LINEAL ACOTADO

El cálculo más realista en la representación del perfil del doblamiento de bandas es autoconsistente [36-41], en el cual se resuelven sucesiva e iterativamente las ecuaciones de Poisson (ec.2.87) y la ecuación de Schrödinger en la aproximación de masa efectiva (ec.2.31). El procedimiento iterativo para obtener soluciones autoconsistentes de dichas ecuaciones ligadas puede resumirse de la siguiente manera:

Comenzando con un potencial de prueba, se resuelve la ecuación 2.31 y los autovalores de energía y funciones de onda se emplean para calcular la densidad de carga $\rho(z)$. Con esto es posible determinar el perfil de potencial generado por esta distribución espacial de carga "de prueba", a través de la ecuación de Poisson. Este proceso continúa hasta que tanto la densidad de carga como el potencial satisfagan simultáneamente las ecuaciones 2.31 y 2.87.

Dado que este tipo de cálculo excede los objetivos de la presente Tesis, se tomará como referencia los resultados de un potencial cuadrático.

Del análisis llevado a cabo en la sección anterior, uno puede preguntarse qué perfil de potencial lineal es más adecuado para representar el pozo de band bending cuadrático. Para responder esta interrogante se procedió de dos maneras, usando parámetros para el caso del óxido de zinc [42]:

Primero, se obtuvo el conjunto de niveles de energía de un perfil parabólico de un ancho $\bar{R} = 28$ y altura $\bar{V}_0 = 1,24$ (fig.3.6-a). Para determinar el perfil de potencial que mejor caracterice el cuadrático se siguieron dos criterios:

1. Se buscaron parámetros del pozo lineal acotado que reproduzcan la misma cantidad de estados que el parabólico (fig.3.6-b). Luego, se evaluó el espectro de energías de un pozo lineal infinito con la misma pendiente que el acotado para comparar con el espectro de nuestro modelo. (fig.3.6-c.)
2. Se determinaron qué parámetros del lineal acotado dan un mejor ajuste de energías, en comparación con el caso cuadrático (fig.3.7-b). Después, en un perfil lineal infinito con la misma pendiente, se analizó su espectro para comparación del modelo. (fig.3.7-c).

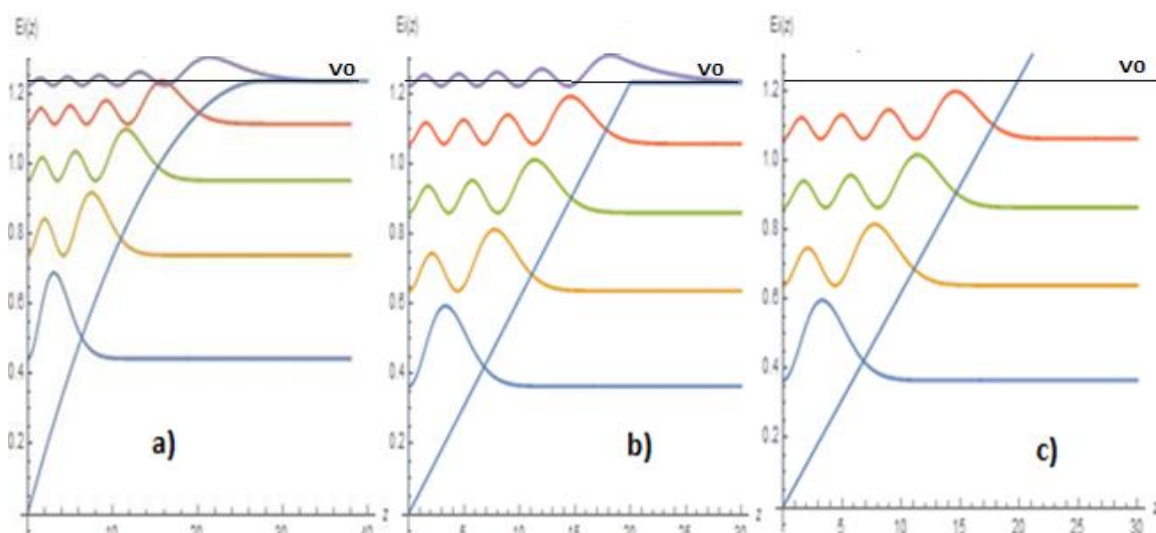


Fig.3.6. Conjunto de niveles de energía de un perfil: a) parabólico de ancho $\bar{R} = 28$ y altura $\bar{V}_0 = 1,24$, b) lineal acotado de ancho $\bar{R} = 20$ y altura $\bar{V}_0 = 1,24$ y c) lineal infinito con la misma pendiente que el pozo acotado.

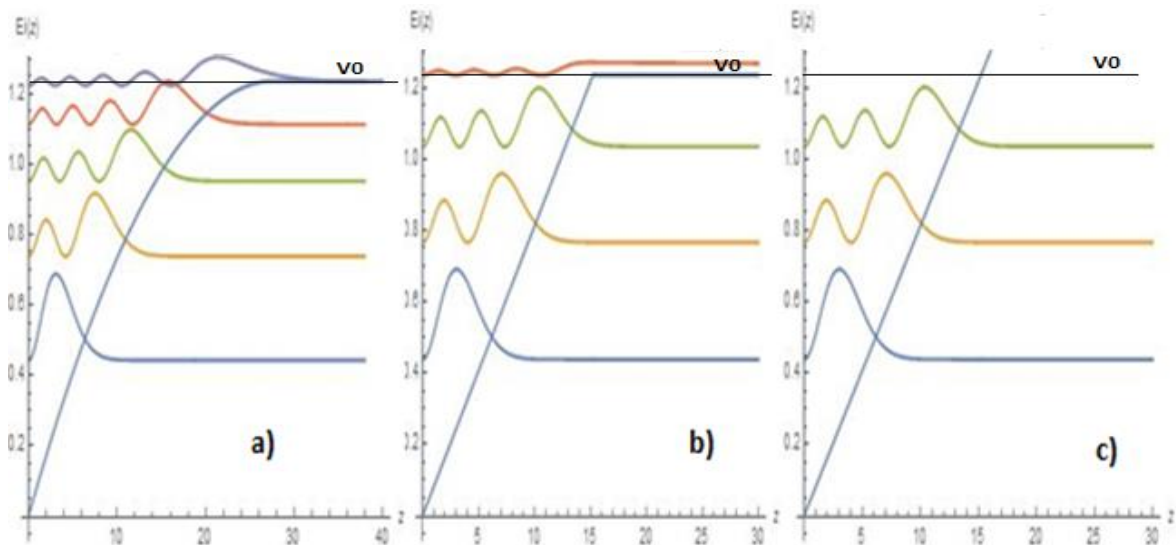


Fig.3.7. Conjunto de niveles de energía de un perfil: a) parabólico de ancho $\bar{R} = 28$ y altura $\bar{V}_0 = 1,24$, b) lineal acotado de ancho $\bar{R} = 15$ y altura $\bar{V}_0 = 1,24$ y c) lineal infinito con la misma pendiente que el pozo acotado.

En la fig.3.6 se muestran los espectros para los tres potenciales, siguiendo el primer criterio. Allí se puede observar que el perfil de potencial que mejor representa al potencial parabólico es el lineal acotado, pues con una pendiente idéntica a la de este último, un perfil lineal infinito no logra confinar la misma cantidad de niveles (hasta V_0) que el caso cuadrático.

De la fig.3.7 se muestran los espectros para los tres potenciales, siguiendo el segundo criterio. Se puede concluir el perfil que mejor ajusta al potencial de band bending sigue siendo el lineal acotado pues los niveles de energía superiores se apartan menos del caso parabólico: en el caso infinito se tienen, hasta V_0 , tres niveles confinados, mientras que en el pozo acotado se tiene un cuarto nivel confinado.

3.2.4 ESTUDIO DE PARÁMETROS DEL POZO ACOTADO QUE MEJOR AJUSTEN EL CASO PARABÓLICO.

En la sección anterior se vio que el perfil de potencial que mejor representa al potencial de band bending real es el pozo lineal acotado.

A continuación, se estudiará el comportamiento de los niveles (fundamental y excitados) para un rango de tamaño de pozo consistente con dimensiones relevantes de un

potencial cuadrático. El objetivo es diseñar un pozo triangular asimétrico acotado que mejor ajuste su espectro de niveles al del modelo cuadrático.

Los parámetros que caracterizan un potencial cuadrático están relacionados por la expresión [43-44]:

$$d = \left[\frac{2\varepsilon\varepsilon_0\Phi_s}{e^2N_{3D}} \right]^{1/2} \quad (3.14)$$

Donde ε es la constante dieléctrica relativa del semiconductor en cuestión, ε_0 es la permitividad del vacío, Φ_s es la altura del potencial de barrera, e es la carga electrónica, y N_{3D} es número de impurezas ionizadas por unidad de volumen.

Entonces, para cada ancho de pozo, se obtuvieron los niveles del pozo triangular acotado y del cuadrático. Luego se hizo la diferencia entre los niveles de ambos perfiles, variando el ancho del pozo triangular y dejando fijo el del cuadrático. Esto a efectos de ver bajo qué condiciones el modelo de potencial propuesto ajusta mejor un perfil de band bending cuadrático y, a su vez, evaluar el apartamiento de dicho modelo. El rango de variación del ancho del pozo triangular acotado se tomó entre $d/2$ y d , manteniendo en todo momento la altura del pozo constante. Esta situación se ilustra en la figura 3.8.

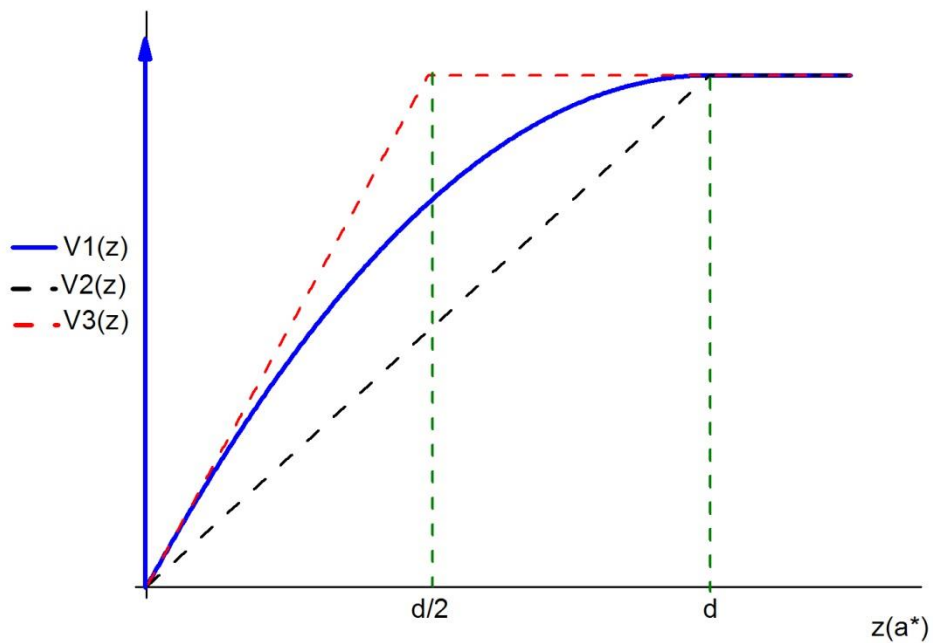


Fig.3.8. Esquema mostrando un pozo cuadrático de ancho d (traza azul) y, superpuesto, un pozo triangular asimétrico acotado con el mismo ancho (traza negra punteada), y un pozo triangular asimétrico acotado de ancho $d/2$ (traza roja punteada).

CASO ZnO

En el caso del óxido de zinc se tiene un pozo confinante para huecos (fig.2.27.a). Pero, a fines prácticos, se trabajó sobre un perfil de potencial como el de la fig.2.28, pero introduciendo parámetros para huecos en el ZnO . Estos parámetros son:

- Masa efectiva para huecos: $m = 0,59m_0$,
- $\epsilon_{ZnO} = 8,5$,
- $a_0^* = 0,76nm$ (para huecos),
- y Φ_s variando desde 0,2 a 0,4 eV [43-46].

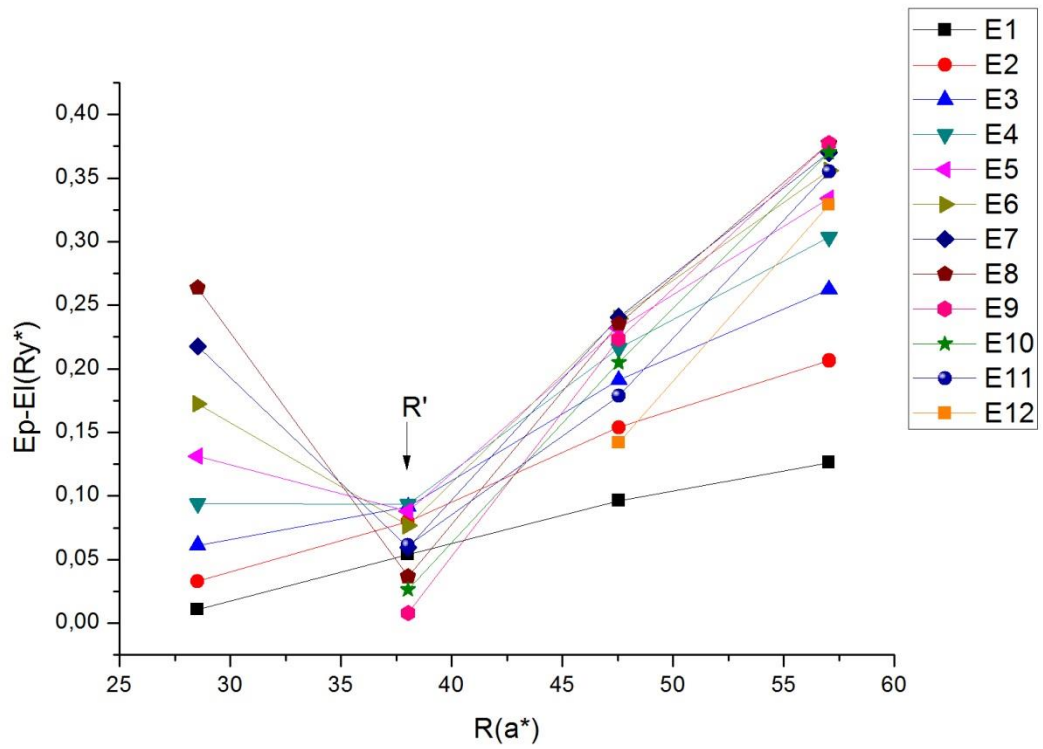


Fig.3.9. Diferencia entre los niveles de energía de pozo lineales acotados de anchos variando entre $d/2$ y d , y los correspondientes estados de un pozo parabólico de ancho invariable igual a d (57). En ambos casos la profundidad del pozo es $V_0=1,8$ (0,2 eV).

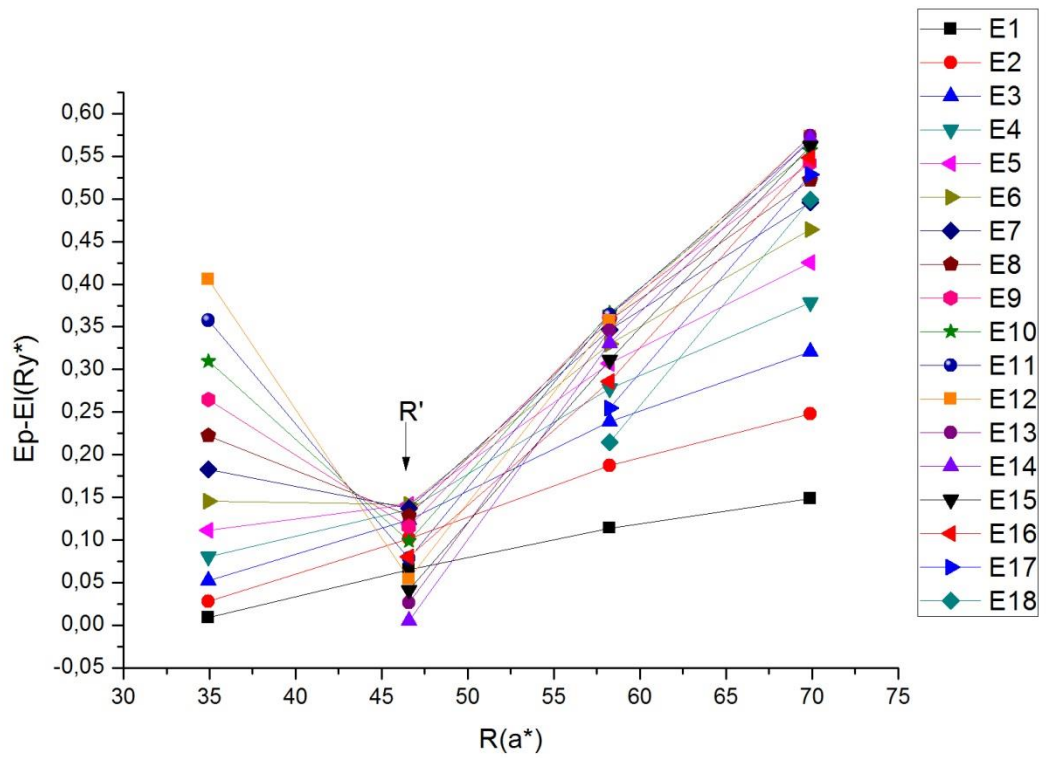


Fig.3.10. Diferencia entre los niveles de energía de pozo lineales acotados de anchos variando entre $d/2$ y d , y los correspondientes estados de un pozo parabólico de ancho invariable igual a d (70). En ambos casos la profundidad del pozo es $V_0=2,7$ (0,3 eV).

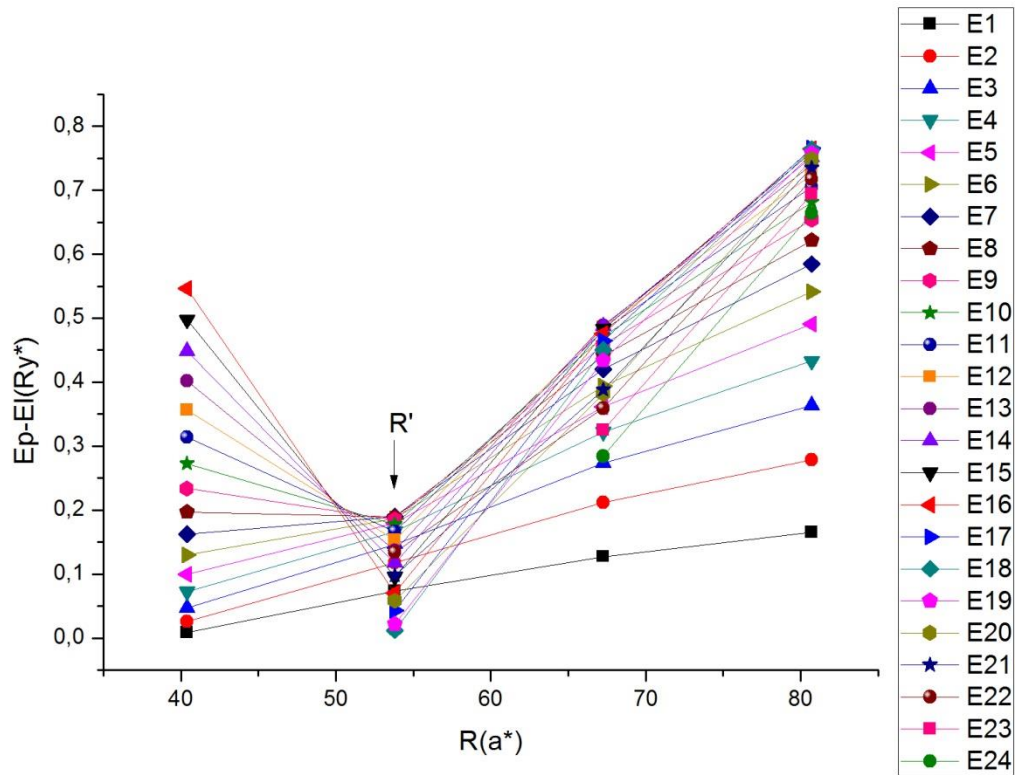


Fig. 3.11. Diferencia entre los niveles de energía de pozo lineales acotados de anchos variando entre $d/2$ y d , y los correspondientes estados de un pozo parabólico de ancho invariable igual a d (80). En ambos casos la profundidad del pozo es $V_0=3,6$ (0,4 eV).

CASO STO

En el caso del STO se tiene un pozo confinante para electrones. Los parámetros introducidos para esta heteroestructura son [47]:

- Masa efectiva para electrones: $m = 1,33m_0$,
- $\epsilon_{STO} = 100$ (a temperatura ambiente).
- $a_0^* = 4 \text{ nm}$ (para huecos),
- $\gamma \Phi_s = 0,5 \text{ eV}$.

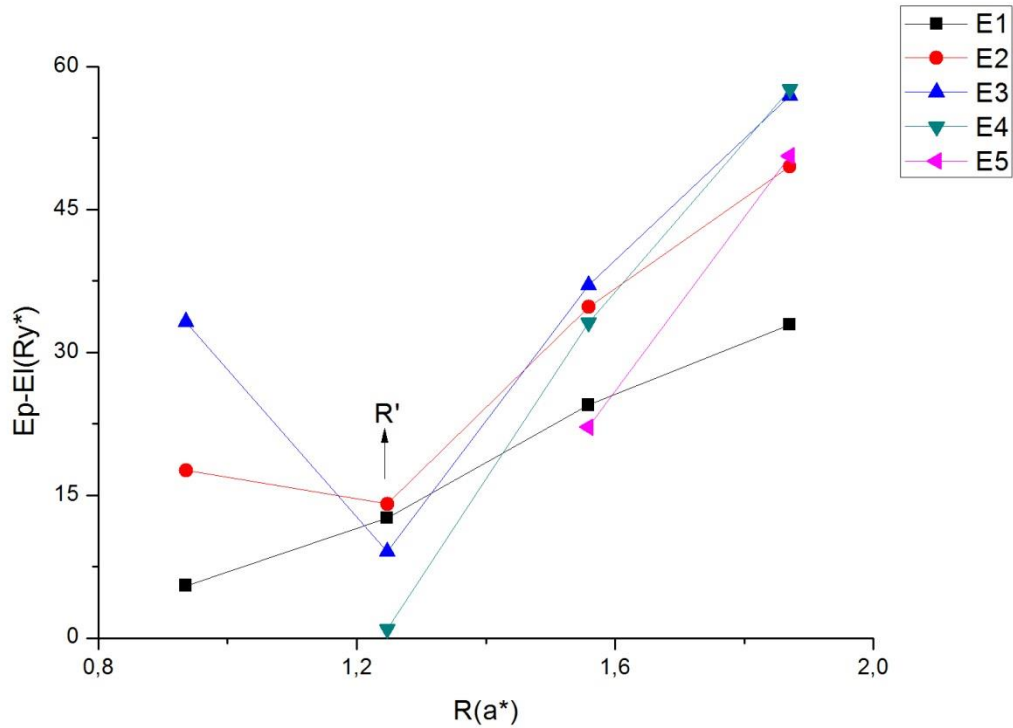


Fig. 3.12. Diferencia entre los niveles de energía de pozo lineales acotados de anchos variando entre $d/2$ y d , y los correspondientes estados de un pozo parabólico de ancho invariable igual a d (1,9). En ambos casos la profundidad del pozo es $V_0=276$ (0,5 eV).

En las figs. 3.9-3.12 se puede observar que, el grado de desviación del caso lineal respecto del parabólico depende del ancho R del pozo y de qué nivel se tenga en cuenta: para las alturas de pozo estudiadas, el apartamiento del pozo acotado en los primeros niveles aumenta con R . El apartamiento de los niveles superficiales disminuye (partiendo de un ancho $d/2$) hasta un punto R' a partir del cual comienza a haber más apartamiento para estos niveles en consideración. Este punto tiene la particularidad de presentar la menor desviación global, esto es, el apartamiento de todos los niveles respecto al caso parabólico se ve disminuido. Se observó, en todos los casos, que el punto R' que mejor representaría un caso real de band bending está relacionado con el ancho inicial del pozo d por

$$R' = \frac{2}{3}d \quad (3.15)$$

En este punto, la diferencia entre la pendiente del pozo acotado y la del parabólico es mínima (del orden de 10^{-2}).

Es así que el ancho de pozo R' definido a partir de un ancho d original, resulta ser el parámetro que minimiza el error cometido al representar el caso cuadrático a partir del modelo lineal acotado. Cabe aclarar, que aunque R' sea un buen parámetro en la representación del pozo parabólico, no siempre logra reproducir los niveles de mayor energía encontrados en este último. Por lo que si se necesita trabajar con dichos niveles exclusivamente, sería más conveniente aumentar el ancho del pozo acotado respecto del valor "óptimo".

3.2.5 FUNCIONES DE ONDA Y DENSIDADES DE CARGA

A continuación se estudian las funciones de onda y las correspondientes densidades de carga de un pozo triangular acotado en dos casos:

CASO ZnO

Se consideraron los parámetros de pozo introducidos por Yukawa [42] para el caso del ZnO (fig.3.13).

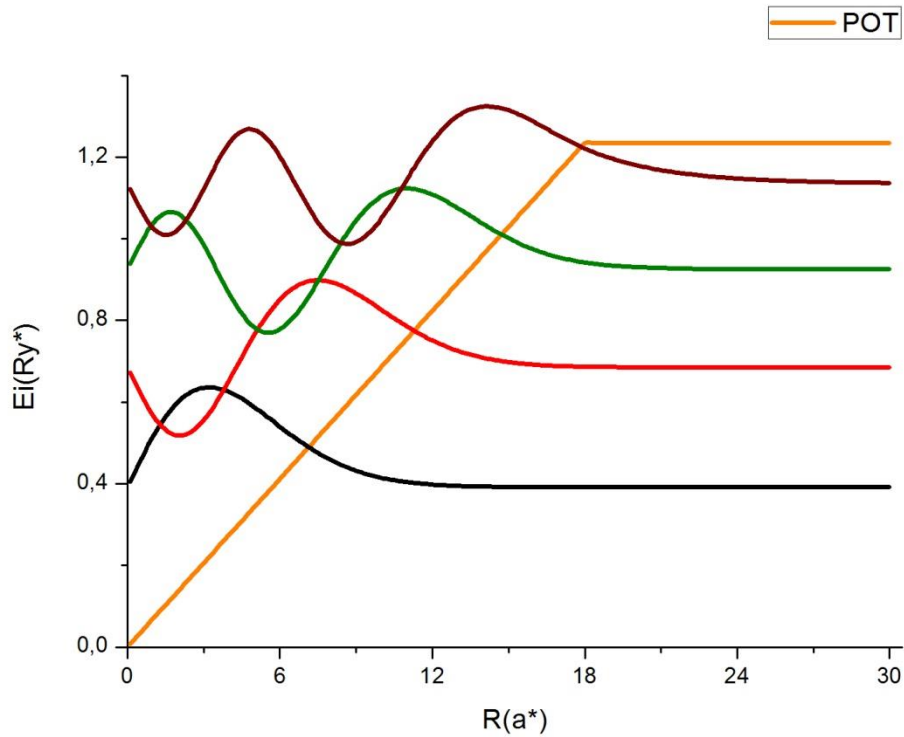


Fig.3.13. Funciones de onda correspondientes a los cuatro estados confinados de un pozo triangular acotado de parámetros $\bar{R}=18$ y $V_0 = 1,24$

Es posible determinar, a partir de las funciones de onda, la densidad de carga pues en mecánica cuántica la densidad de carga n está relacionada con las funciones de onda para cada nivel $\psi_i(z)$ por la ecuación

$$n(z) = q \sum_i |\psi_i(z)|^2 \quad (3.16)$$

Donde q es la carga de la partícula y $|\psi(z)|^2 = \psi^*(z) * \psi(z)$ es la función densidad de probabilidad.

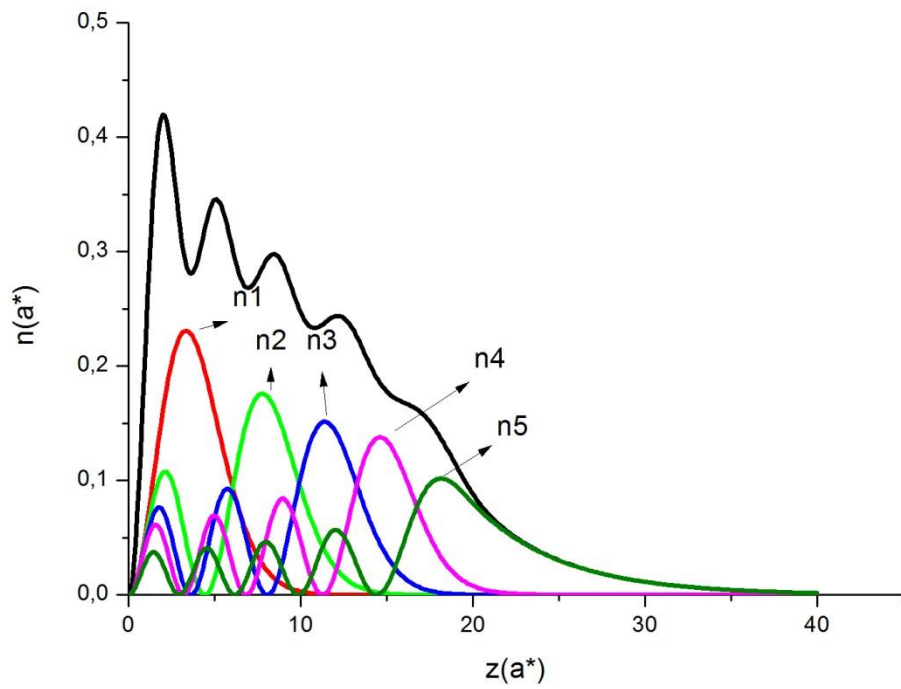


Fig.3.14. Densidad total de carga (línea negra) y densidades parciales correspondientes a los cinco niveles de energía de un pozo triangular acotado de parámetros $\bar{R} = 20$ y $\bar{V}_0 = 1,24$

CASO STO

Procediendo de la misma manera que para el óxido de zinc, se determinaron las densidades de carga (total y parciales) para el STO [42]

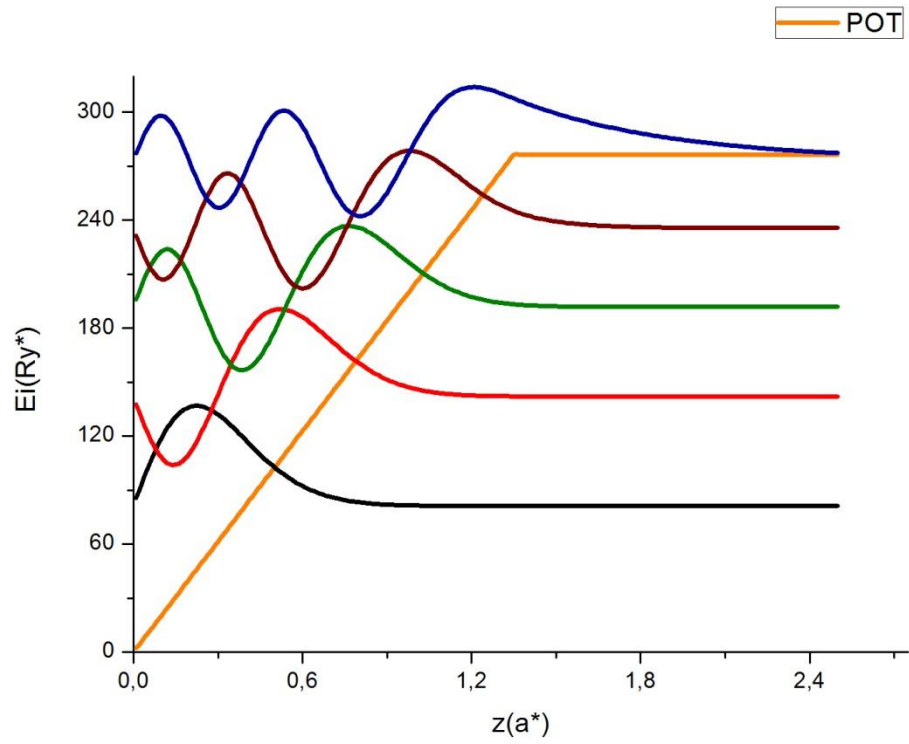


Fig.3.15. Funciones de onda correspondientes a los cinco estados confinados de un pozo triangular acotado de parámetros $\bar{R}=1,35$ y $V_0 = 276$

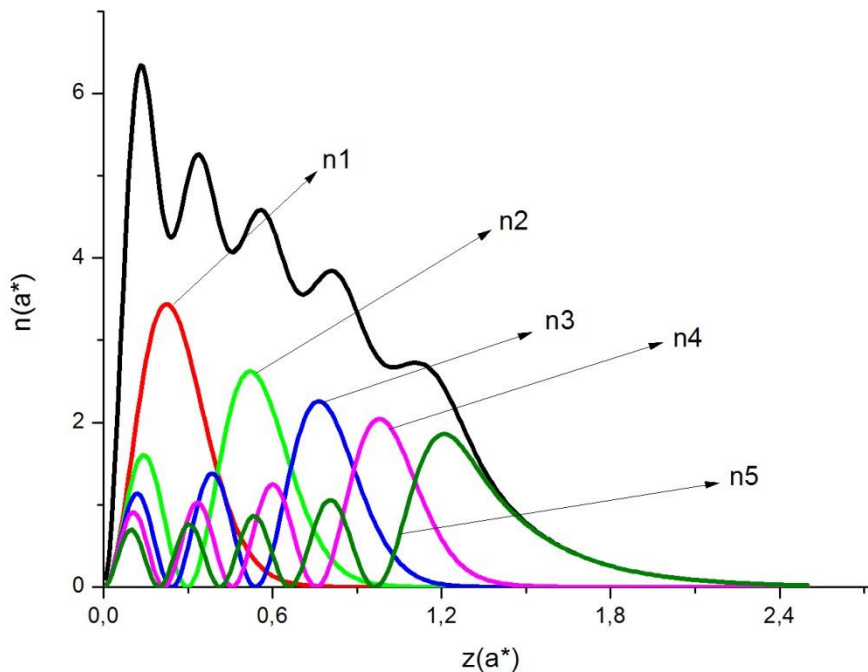


Fig.3.16. Densidad total de carga (línea negra) y densidades parciales correspondientes a los cinco niveles de energía de un pozo triangular acotado de parámetros $\bar{R} = 1,3$ y $\bar{V}_0 = 276$

En las figs. 3.13 y 3.15, el desplazamiento vertical de las funciones de onda se hizo para indicar la energía de los autovalores. Es de notar que debido a las dimensiones del pozo para el STO, los niveles confinados se encuentran más separados uno de otros y hay un aumento en el autovalor de energía (respecto al ZnO). En ambos casos se observa, como es de esperarse, que el número de nodos en las funciones de onda se corresponde con el nivel de energía: un nodo para el estado fundamental, dos nodos para el primer estado excitado, etc. Además, se muestra que la amplitud de las funciones de onda aumenta en el borde del pozo: esto significa que aumenta la probabilidad de encontrar la partícula en la dicha región. Por último, se ve que las funciones de onda se anulan en $z = 0$, como se había planteado inicialmente en la resolución del pozo.

En las figs.3.14 y 3.16, se puede observar la dependencia de la densidad de carga con la coordenada espacial: disminuye a medida que aumenta z , haciéndose mínima en el borde del pozo. Cabe aclarar que tanto en la determinación de funciones de onda como en el

cálculo de la densidad de carga se consideró el pozo lineal acotado pues en el presente trabajo no se llegó a una resolución exacta del caso cuadrático, por lo que no se dispone de expresiones analíticas para sus funciones de onda. Los parámetros usados son los que mejor ajusten al pozo parabólico. Cabe aclarar que en ambos casos, las cinco oscilaciones observadas en la densidad de carga se corresponden con niveles de energía llenos.

4. CONCLUSIONES

En el presente trabajo se estudió un modelo de doblamiento de bandas que consiste en un potencial que varía linealmente en la zona de band bending: el potencial lineal acotado.

Bajo la aproximación de masa efectiva se resolvió de forma exacta la ecuación de Schrödinger para una partícula en este potencial. La ecuación de autovalores se obtuvo analíticamente, mientras que el espectro de autovalores numéricamente.

El siguiente paso en el análisis del modelo fue ver si un pozo triangular acotado representa mejor el caso más realista de band bending consistente en un perfil cuadrático, en comparación con el caso del perfil triangular infinito. Esto se llevó a cabo usando parámetros arbitrarios, los cuales simplificaban la interpretación de los resultados. Estudiando dichos espectros del pozo parabólico y haciendo un contraste con ambos perfiles lineales se llegó a la conclusión que el modelo lineal acotado es más adecuado para estudiar un potencial de band bending.

Una vez evaluado el modelo triangular acotado, se lo aplicó al caso de band bending para el ZnO, esta vez con parámetros más convencionales [43-46]; y al caso del doblamiento de bandas del STO: primero se analizó el apartamiento de los niveles del pozo con respecto al caso parabólico. Con este fin, se estudió el comportamiento de los niveles (fundamental y excitados) para un rango de tamaño de pozo consistente con dimensiones relevantes de un potencial cuadrático y así se logró el diseño del pozo acotado que minimiza el apartamiento entre ambos perfiles de potencial.

Es necesario tener en cuenta que los parámetros óptimos para representar un determinado potencial parabólico para algunos semiconductores no logran reproducir los niveles más de mayor energía. Como estos niveles son de vital importancia en cuestiones

como las transiciones ópticas, por ejemplo, en estos casos se hace necesario apartarse un poco del parámetro “óptimo” de manera de lograr que los estados más superficiales entren en el potencial modelo.

Con los potenciales lineales que mejor representen un determinado caso de doblamiento de bandas se obtuvo: el número estados confinados, sus correspondientes energías, funciones de onda y densidades de carga.

5. PERSPECTIVAS A FUTURO

Frente al cierre de esta Tesis de Licenciatura, quedan ciertas cuestiones a tratar a futuro: resta aún resolver analíticamente el caso del pozo cuadrático asimétrico, controlar con los resultados numéricos y obtener funciones de onda para los estados fundamentales y primeros excitados.

A partir del diseño del pozo triangular acotado que mejor ajuste al caso parabólico, se puede trabajar para obtener: la matriz de recombinación electrón-hueco, tiempo de vida media de fotoportadores, tiempos característicos de decaimiento de fotocoductividad, etc. Todo esto resulta posible pues, en el modelo lineal de band bending aquí estudiado, se tienen expresiones analíticas tanto para los autovalores de energía como para las funciones de onda.

Haciendo una contrastación del perfil cuadrático estudiado en este trabajo con un pozo de potencial obtenido a partir de un cálculo autoconsistente [42], se llegó a la conclusión que; si bien el perfil parabólico logra confinar la misma cantidad de niveles que el caso autoconsistente, no ajusta muy bien a este último. Esto se traduce en un apartamiento significativo en los autovalores de energía para los primeros niveles. Una posible solución a este inconveniente sería resolver la ecuación de Schrödinger (de manera exacta y numérica) para un potencial cúbico generado por una distribución de carga que varía linealmente con la coordenada espacial z , en vez de la función escalón que da lugar al potencial cuadrático.

6. REFERENCIAS

- [1] Bo Lojek, *History of Semiconductor Engineering*; Pringer-Verlag Berlin Heidelberg (2007).
- [2] R. T. Tung, *Materials Science and Engineering R 35 (2001)*, 1-138.
- [3] S.M. Sze, *PHYSICS OF SEMICONDUCTOR DEVICES, Second Edition*, John Wiley and Sons, 1981.
- [4] Z. Zhang and J.T.Yates Jr., *Chem. Rev.* 112, 5520 (2012).
- [5] Jen-Ru Chen et al, *Nanoletters* (2013).
- [6] W. Meevasana et al. *NATURE MATERIALS* 2011, 10, 114.
- [7] John H. Davies, *THE PHYSICS OF LOW-DIMENSIONAL SEMICONDUCTORS. AN INTRODUCTION*, Cambridge University Press, Cambridge, 1998.
- [8] L. L. Yang, Q. X. Zhao, M. Q. Israr, J. R. Sadaf, M. Willander, G. Pozina, and J. H. Yang, *J. Appl. Phys.* 108, 103513 (2010).
- [9] J. M. Ferreyra et al, "Interplay Between Band Bending and Acceptor Levels in Li-doped ZnO Microwires". *Solid State Communications* 257, 42 (2017).
- [10] N. Bachi, et al, "Band Bending Effects on the Photoconducting Properties of SrTiO₃ Thin Films". *Appl. Phys. Lett.* 110, 91103 (2017).
- [11] M. Villafuerte et al, *JAP* 115, 133101 (2014).
- [12] G. Bridoux et al, *BRB* 92, 155202 (2015).
- [13] J. Singh, *ELECTRONIC AND OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR STRUCTURES*, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [14] R. J. Matyi, Chapter 2 of *Heterostructures and Quantum Devices*, W.R. Frensley and N. G. Einspruch Editors, *A Volume of VLSI Electronics: Microstructure Science* (Academic Press, San Diego). Publication date: March 25, 1994.

- [15] G. C. Osbourn, J. Appl. Phys. 53, 1586 (1982).
- [16] T. P. Pearsall, editor, "Strained-Layer Superlattices: Materials Science and Technology", Vol. 33 of "Semiconductors and Semimetals", (R. K. Willardson and A. C. Beer, Series editor), Academic Press, San Diego, 1991.
- [17] C. A. King, Chapter 5 of Heterostructures and Quantum Devices, W.R. Frensley and N. G. Einspruch Editors, A Volume of VLSI Electronics: Microstructure Science (Academic Press, San Diego). Publication date: March 25, 1994.
- [18] A. G. Milnes and D. L. Feucht, "Heterojunctions and Metal-Semiconductor Junctions", Academic Press, New York, 1972.
- [19] G.A Baraff, J.A Appelbaum, and D. R. Hamann, Phys. Rev. Lett. 38, 237 (1976).
- [20] W. E. Pickett, S. G. Louie, and M. L. Cohen, Phys. Rev. Lett. 39, 109 (1977).
- [21] Tank, C. M., et al., Electric Field Enhanced Photocatalytic Properties of TiO₂ Nanoparticles Immobilized in Porous Silicon Template. Solid State Sciences, 2011. 13 (8): P. 1500-1504.
- [22] Jiang Z., et al., Photocatalysis Enhancement by Electric Field: TiO₂ Thin Film for Degradation of Dye X-3b. Chemosphere, 2004. 56 (5): p. 503-508.
- [23] Feenstra, R. M. and P. Martensson, Fermi-Level Pinning at the Sb/GaAs (110) Surface Studied by Scanning Tunneling Spectroscopy. Physical Review Letters, 1988. 61 (4). P. 447-450.
- [24] Himpsel, F. J., G. Hollinger, and R.A. Pollak, Determination of the Fermi-Level Pinning Position at Si(111) Surfaces. Physical Review B, 1983. 28 (12): P. 7014-7018.
- [25] Dow, J. D. and R. E. Allen, Surface Defects and Fermi Level Pinning in InP. Journal of Vacuum Science and Technology, 1982. 20 (3): P. 659-661.
- [26] Cho, A. Y., The Technology and Physics of Molecular Beam Epitaxy, New York: Plenum Press, 1985.

- [27] Foxton, C. T., and J. J. Harris, *J. Cryst. Growth*, Vol 81, 1984, pp. 1-4.
- [28] Razeghi, M., *The MOCVD Challenge, Volume 1: A Survey of GaInAsP-InP for Photonic and Electronic Applications*, Bristol, England: Adam Hilger, 1989.
- [29] Razeghi, M., *The MOCVD Challenge, Volume 2: A Survey of GaInAsP-GaAs for Photonic and Electronic Device Applications*, Bristol, England: Institute of Physics, 1995.
- [30] Stringfellow, G. B., *Organometallic Vapor-Phase Epitaxy: Theory and Practice*, Boston, MA: Academic Press, 1989.
- [31] Razeghi, M., *Fundamentals of Solid State Engineering*, Boston, MA: Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [32] Peter Y. Yu, Manuel Cardona, *Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties*, Fourth Edition, Springer, New York, 2010.
- [33] W. Kohn, *Shallow Impurity States in Silicon and Germanium*, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, Pennsylvania.
- [34] Donald A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices*, Fourth Edition, Mc Graw Hill, New York, NY, 2012.
- [35] Milton Abramowitz and Irene A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 1954.
- [36] Erez Shami, *Analysis and Numerical Performance of Methods of Solving the Time Independent Schrödinger Equation for Simulation in Strong-Field Physics*, B.A., University of Colorado Boulder, 2016.
- [37] Yunkai Zhou, et al., "Self-Consistent-Field Calculations Using Chebyshev-Filtered Subspace Iteration".
- [38] Mehmet Saltin, Mehmet Temak, "Self-Consistent calculation of semiconductor heterojunctions by using quantum genetic algorithm".
- [39] Juan José Urabano Mayorgas, "Modelado analítico del potencial eléctrico y la carga

en inversión en MOSFET de doble puerta nanométricos incluyendo efectos cuánticos”, Universidad de Granada, Granada (2013).

[40] M. J. Hargrove and A. K. Hennig, “Self-Consistent of the Schrödinger and Poisson Equations Applied to Quantum Well Heterostructures”, Dartmouth College, Hanover.

[41] I-H. Tan, G.L. Snider, L.D. Chang, and E.L. Hu, “A Self-Consistent solution of Schrödinger-Poisson equations using a nonuniform mesh, University of California, Santa Barbara, California (1990).

[42] R. Yukawa, K. Ozawa, S. Yamamoto, R.-Y. Liu, I. Matsuda, Anisotropic effective mass approximation model to calculate multiple subband structures at wide-gap semiconductor surfaces: Application to accumulation layers of SrTiO₃ and ZnO, Surface Science 641 (2015) 224-230.

[43] Z. M. Liao, K. J. Liu, J. M. Zhang, J. Xu, and D. P. Yu, Phys. Lett. A 367, 207 (2007).

[44] Z. M. Liao, H. Z. Zhang, Y. B. Zhou, J. Xu, J. M. Zhang, and D. P. Yu, Phys. Lett. A 372, 4505 (2008).

[45] K. Vanheusden, W. L. Warren, C. H. Seager, D. R. Tallant, and J. A. Voigt, J. Appl. Phys. 79, 7983 (1996).

[46] L.L. Yang, et al., “Indirect optical transition due to surface band bending in ZnO nanotubes”, J. Appl. Phys, 108, 103513 (2010).

[47] Lin, X., Bridoux, G., Gourgout, A., Seyfarth, G., Krämer, S., Nardone, M., Fauqué, B., and Behnia, K., “Critical Doping for the Onset of a Two-Band Superconducting Ground State in SrTiO_{3-δ}, Phys. Rev. Lett. 112, 207002 (2014).

APÉNDICE 1: OBTENCIÓN DE LAS FUNCIONES DE ONDA DEL POZO CUADRADO SIMÉTRICO

Reemplazando C de (2.43) en (2.44) y acomodando:

$$B = -Ae^{-2ikb} \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \quad (A1 - 1)$$

Volviendo a (2.43)

$$C = Ae^{-ikb} - Ae^{-ikb} \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \quad (A1 - 2)$$

Reemplazando B en (1.45)

$$F = Ae^{ikb} - Ae^{-3ikb} \frac{\kappa - ik}{\kappa + ik} \quad (A1 - 3)$$

Teniendo las constantes B,C y F en términos de A, se procede a usar la condición de normalización:

$$\int_{-\infty}^{-b} \psi_I^* \psi_I dz + \int_{-b}^b \psi_{II}^* \psi_{II} dz + \int_b^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dz = 1 \quad (A1 - 4)$$

Donde

$$\int_{-\infty}^{-b} \psi_I^* \psi_I dz = A^2 \frac{4k^2}{\kappa^2 + k^2} \int_{-\infty}^{-b} e^{2\kappa(z+b)} dz \quad (A1 - 5)$$

$$\int_{-b}^b \psi_{II}^* \psi_{II} dz = 2A^2 \int_{-b}^b dz - \frac{A^2}{\kappa^2 + k^2} \int_{-b}^b \{2(\kappa^2 - k^2) \cos[2k(b+z)] - 4\kappa k \operatorname{sen}[2k(b+z)]\} dz \quad (A1 - 6)$$

$$\int_b^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dz = A^2 \frac{4k^2}{\kappa^2 + k^2} \int_b^{\infty} e^{-2\kappa(z+b)} dz \quad (A1 - 7)$$

Resolviendo estas integrales se determina la constante A (y, con ella, B,C y F). Pero estas constantes se ven afectadas por el autovalor de energía (a través de κ y k), el cual se obtiene resolviendo la ecuación de autovalores correspondiente, analítica o numéricamente. Dado que la ecuación de autovalores en este caso es trascendente, se resolvió numéricamente, para lo cual se empleó rutinas de evaluación de ceros de una

función que poseen programas como Mathcad, Mathematica, etc.

APÉNDICE 2: OBTENCIÓN DE LAS FUNCIONES DE ONDA DEL POZO CUADRADO ASIMÉTRICO

Reemplazando A de (2.56) en (2.57) y acomodando:

$$B = -C e^{2ikb} \frac{ik + \kappa_I}{\kappa_I - ik} \quad (A2 - 1)$$

Volviendo a (2.56)

$$A = C e^{ikb} - C e^{ikb} \frac{ik + \kappa_I}{\kappa_I - ik} \quad (A2 - 2)$$

Reemplazando B en (2.58)

$$D = C e^{-ikb} - C e^{3ikb} \frac{ik + \kappa_I}{\kappa_I - ik} \quad (A2 - 3)$$

Teniendo las constantes B,A y D en términos de C, se pasa a usar la condición de normalización:

$$\int_{-\infty}^{-b} \psi_I^* \psi_I dz + \int_{-b}^b \psi_{II}^* \psi_{II} dz + \int_b^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dz = 1$$

Donde

$$\int_{-\infty}^{-b} \psi_I^* \psi_I dz = C^2 \frac{4k^2}{\kappa_I^2 + k^2} \int_{-\infty}^{-b} e^{2\kappa_I(z+b)} dz \quad (A2 - 4)$$

$$\int_{-b}^b \psi_{II}^* \psi_{II} dz = 2C^2 \int_{-b}^b dz - \frac{C^2}{\kappa_I^2 + k^2} \int_{-b}^b \{2(\kappa_I^2 - k^2) \cos[2k(b+z)] - 4\kappa_I k \operatorname{sen}[2k(b+z)]\} dz \quad (A2-5)$$

$$\int_b^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dz = 2C^2 \int_b^{\infty} e^{-2\kappa_{III}(z-b)} dz - \frac{C^2}{\kappa_I^2 + k^2} \int_{-b}^b e^{-2\kappa_{III}(z-b)} \{2(\kappa_I^2 - k^2) \cos(2kb) - 4\kappa_I k \operatorname{sen}(2kb)\} dz \quad (A2-6)$$

Resolviendo estas integrales y, teniendo en cuenta la condición de normalización, se puede encontrar la constante C (y, con ella, A,B y D, para el correspondiente autovalor de energía).

APÉNDICE 3: OBTENCIÓN DE LAS FUNCIONES DE ONDA DEL POZO TRIANGULAR ACOTADO

Despejando a de (3.3)

$$a = \frac{-bBi(-\beta\alpha)}{Ai(-\beta\alpha)} \quad (A3 - 1)$$

Reemplazando a en (3.4) Y acomodando

$$b = \frac{-Ai(-\beta\alpha)}{Bi(-\beta\alpha)Ai(\beta(r-\alpha)) - Bi(\beta(r-\alpha))Ai(-\beta\alpha)} ce^{-\kappa d} \quad (A3 - 2)$$

Volviendo a (3.3)

$$a = \frac{Bi(-\beta\alpha)}{Bi(-\beta\alpha)Ai(\beta(r-\alpha)) - Bi(\beta(r-\alpha))Ai(-\beta\alpha)} ce^{-\kappa d} \quad (A3 - 3)$$

Teniendo las constantes a, b en términos de c , se procede a usar la condición de normalización:

$$\int_{-\infty}^0 \psi_I^2 dz + \int_0^r \psi_{II}^2 dz + \int_r^\infty \psi_{III}^2 dz = 1 \quad (A3 - 4)$$

Donde

$$\int_{-\infty}^0 \psi_I^2 dz = 0 \quad (A3 - 5)$$

$$\int_0^r \psi_{II}^2 dz = t \int_0^d [Bi(-\beta\alpha)Ai(\beta(z-\alpha)) - Bi(\beta(z-\alpha))Ai(-\beta\alpha)]^2 dz \quad (A3 - 6)$$

$$\text{Con } t = \left[\frac{ce^{-\kappa d}}{Bi(-\beta\alpha)Ai(\beta(d-\alpha)) - Bi(\beta(d-\alpha))Ai(-\beta\alpha)} \right]^2 \quad (A3 - 7)$$

$$\int_d^\infty \psi_{III}^2 dz = C^2 \int_d^\infty e^{-2\kappa z} dz \quad (A3 - 8)$$

Resolviendo estas integrales y, teniendo en cuenta la condición de normalización, se puede encontrar la constante c (y, con ella, a y b). Pero estas constantes se ven afectadas por el autovalor de energía (a través de κ y α), por lo que se hace necesario encontrar los autovalores del pozo primero, lo cual se lleva a cabo numéricamente a través del programa Mathcad.

APÉNDICE 4: ADIMENSIONALIZACIÓN DE MAGNITUDES

El objetivo de adimensionalizar las ecuaciones de autovalores y de funciones de onda es conseguir simplificar la resolución analítica y numérica del problema y lidiar con valores de las magnitudes expresadas en función de cantidades universales, evitando valores muy grandes o muy pequeños.

La adimensionalización se llevará a cabo, en término de dos parámetros:

1. Radio de Bohr efectivo: denotado como a^* , se obtiene a partir del radio de Bohr a_0 (órbita de radio menor o la órbita de menor energía en el átomo de hidrógeno), teniendo en cuenta que los portadores no se encuentran en el vacío, sino en un medio con cierta permitividad ε y en donde estos tienen masa efectiva m^*

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_0e^2} \quad \rightarrow \quad a^* = a_0 \frac{\varepsilon m_0}{\varepsilon_0 m^*}$$

2. Rydberg efectivo: denotado como Ry^* , se obtiene a partir de la constante de Rydberg Ry teniendo en cuenta las mismas consideraciones del caso anterior.

$$Ry \equiv hcR_\infty = \frac{e^2}{2a_0\varepsilon_0} \quad \rightarrow \quad Ry^* = Ry \frac{m^*\varepsilon_0^2}{m_0\varepsilon^2} = \frac{\hbar^2}{2m^*a^{*2}}$$

La adimensionalización de los parámetros que aparecen en las ecuaciones para los pozos cuadrados (simétrico y asimétrico) y triangulares (infinito y asimétrico) se lleva a cabo multiplicando y dividiendo convenientemente el parámetro original por, ya sea, el rydberg o el radio de Bohr efectivo. El parámetro adimensional se denota por una barra sobre el nombre del parámetro (por ejemplo, \bar{x}).

APÉNDICE 5: PARÁMETROS INVOLUCRADOS EN LOS PERFILES DE POTENCIAL

POZO CUADRADO SIMÉTRICO

Operando en términos del Rydberg y radio de Bohr efectivos

$$\alpha = kb = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} Ry^*} \sqrt{\frac{E}{Ry^*}} b = \sqrt{\bar{E}} \frac{b}{a^*} = \sqrt{\bar{E}} \bar{b} \quad (A5 - 1)$$

$$\frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{(V_0 - E)/Ry^*}{E/Ry^*}} = \sqrt{\frac{\bar{V}_0 - \bar{E}}{\bar{E}}} \quad (A5 - 2)$$

Donde b es el semiancho del pozo.

POZO CUADRADO ASIMÉTRICO

$$\frac{k^2}{\kappa_I \kappa_{III}} = \sqrt{\frac{E^2}{(V_1 - E)(V_3 - E)}} = \sqrt{\frac{\frac{E^2}{Ry^{*2}}}{\frac{(V_1 - E)(V_3 - E)}{Ry^* Ry^*}}} = \frac{\bar{E}}{\sqrt{(\bar{V}_1 - \bar{E})(\bar{V}_3 - \bar{E})}} \quad (A5 - 3)$$

$$\frac{k}{\kappa_I} = \sqrt{\frac{\bar{E}}{(\bar{V}_1 - \bar{E})}}, \quad \frac{k}{\kappa_{III}} = \sqrt{\frac{\bar{E}}{(\bar{V}_3 - \bar{E})}} \quad (A5 - 4)$$

$$\frac{k^2}{\kappa_I + k^2} = \frac{E}{V_1} = \frac{\bar{E}}{\bar{V}_1} \quad (A5 - 5)$$

$$\frac{\kappa_I^2 - k^2}{\kappa_I^2 + k^2} = \frac{\frac{2m}{\hbar^2} V_1}{\frac{2m}{\hbar^2} (V_1 - 2E)} = \frac{\bar{V}_1 - 2\bar{E}}{\bar{V}_1} \quad (A5 - 6)$$

$$\frac{k\kappa_I}{\kappa_I^2 + k^2} = \frac{\sqrt{E(V_1 - E)}}{V_1} = \frac{\sqrt{\bar{E}(\bar{V}_1 - \bar{E})}}{\bar{V}_1} \quad (A5 - 7)$$

$$\kappa_I a^* = \bar{\kappa}_I = \sqrt{\bar{V}_1 - \bar{E}} \quad (A5 - 8)$$

Donde se debe recordar que

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \kappa_I = \sqrt{\frac{2m(V_1-E)}{\hbar^2}}, \kappa_{III} = \sqrt{\frac{2m(V_3-E)}{\hbar^2}} \quad (A5 - 9)$$

POZOS TRIANGULARES: INFINITO Y ASIMÉTRICO

A partir del radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo

$$\alpha = \frac{E/Ry^*}{eFR/Ry^*} d \rightarrow \frac{\alpha}{a^*} = \bar{\alpha} = \frac{\bar{E}}{eF d/Ry^*} \bar{d} \quad (A5 - 10)$$

Pero

$$eFd = V_0 \quad (A5 - 11)$$

Entonces

$$\bar{\alpha} = \frac{\bar{E}}{\bar{V}_0} \bar{d} \quad (A5 - 12)$$

Ahora

$$\beta = \left(\frac{2m^* eF}{\hbar^2} \right)^{1/3} \quad (A5 - 13)$$

Entonces

$$\beta = \left(\frac{2m^* a^{*2} eFd}{\hbar^2 a^{*2} d} \right)^{1/3} = \frac{2m^* a^{*2} ed}{\hbar^2 a^{*2} d} \quad (A5 - 14)$$

Entonces

$$\beta a^* = \bar{\beta} = \left(\frac{\bar{V}_0}{\bar{d}} \right)^{1/3} \quad (A5 - 15)$$