



Ajuste de los niveles de energía en pozos cuánticos delta-dopados

Volodymyr Akimov

Tesis doctoral presentada para optar al título de Doctor en Física

Asesor

Carlos Albero Duque Echeverri, Doctor (PhD) en Física

Universidad de Antioquia
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Doctorado en Física
Medellín, Antioquia, Colombia
2021

Cita	(Volodymyr Akimov, 2021)
Referencia	Akimov, V. (2021). <i>Ajuste de los niveles de energía en pozos cuánticos delta-dopados</i> [Tesis doctoral]. Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.
Estilo APA 7 (2020)	



Doctorado en Física, Cohorte I.

Grupo de Investigación Materia Condensada.

Centro de Investigación en Ciencias Exactas y Naturales (CIEN).



Biblioteca Carlos Gaviria Díaz

Repositorio Institucional: <http://bibliotecadigital.udea.edu.co>

Universidad de Antioquia - www.udea.edu.co

Rector: John Jairo Arboleda.

Decano/Director: Adriana Echavarría Isaza.

Jefe departamento: Leonardo A. Pachón Contreras.

El contenido de esta obra corresponde al derecho de expresión de los autores y no compromete el pensamiento institucional de la Universidad de Antioquia ni desata su responsabilidad frente a terceros. Los autores asumen la responsabilidad por los derechos de autor y conexos.

Lista de las publicaciones asociadas a la tesis del doctorado en física de la FCEN - UdeA:

1. **V Akimov**, V Tulupenko, C A Duque, A L Morales, R Demediuk, A Tiutiunyk, D Laroze, V Kovalov and D Sushchenko. Background impurities and a delta-doped QW. Part I: Center doping. *Semicond. Sci. Technol.*, 34, 125009 (2019), doi: 10.1088/1361-6641/ab4c7a
2. V. Tulupenko, **V. Akimov**, R. Demediuk, C. Duque, O. Fomina, D. Sushchenko. Effect of Sparse Doping in Barriers on the Energy Structure of Center-Delta-Doped QW. 2019 IEEE 39th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), Kyiv, Ukraine, 2019, pp. 177-180. doi: 10.1109/ELNANO.2019.8783451
3. V. Tulupenko, **V. Akimov**, R. Demediuk, A. Tiutiunyk, C. Duque et al. Hydrogenic impurity states in a delta-layer within quantum wells in a transversal electric field. IEEE 40th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO) Kyiv, Ukraine, 2020, pp. 109-113, doi: 10.1109/ELNANO50318.2020.9088792.
4. **V Akimov**, V Tulupenko, C A Duque, A L Morales, R Demediuk, A Tiutiunyk, D Laroze, V Kovalov and D Sushchenko. Background impurities in a delta-doped QW. Part II: Edge doping. *Semicond. Sci. Technol.*, 36 045011 (2021), doi: 10.1088/1361-6641/abe65b

Contenido

1	Introducción.....	7
1.1	Pozos cuánticos.....	7
1.2	Transiciones entre subbandas en un QW.....	8
1.3	Radiación en los THz.....	9
1.4	Impurezas en dispositivos ópticos de nanoestructuras semiconductores.....	11
1.5	Concepción de un nuevo tipo de dispositivo ajustable en el rango de los THz.....	12
1.6	Objetivos generales y específicos.....	13
2	Sistema bajo estudio.....	15
2.1	Estructura de pozos cuánticos de SiGe.....	15
2.2	Suposiciones y limitaciones.....	16
2.2.1	Concentración de impurezas en una capa delta.....	16
2.2.2	Fluctuaciones del potencial en el plano del pozo cuántico.....	17
2.2.3	Tensión interna en QWs de SiGe.....	18
2.2.4	Sobre el desplazamiento químico.....	18
3	Métodos.....	20
3.1	Posiciones de subbandas de energía y funciones de onda.....	20
3.2	Nivel de Fermi.....	21
3.3	Potencial de Hartree.....	22
3.4	Energía de enlace de la impureza.....	22
3.5	Método autoconsistente.....	24
3.6	Caso particular: impurezas de base.....	26
3.6.1	Nivel de Fermi y electroneutralidad.....	26
3.6.2	Modificación de algoritmo autoconsistente.....	28
3.7	Efectos ópticos lineales y no lineales basados en transiciones entre subbandas.....	30
3.8	Efectos de muchos cuerpos.....	31
4	Resultados y discusión.....	33
4.1	Energías y funciones de onda.....	33
4.2	Cambios en el pico de absorción lineal. Estimación de rangos de sintonización.....	35
4.3	Influencia de la no linealidad en la absorción y refracción.....	39
4.4	Nuevo tipo de modulador THz.....	43
4.5	Influencia del campo eléctrico transversal.....	47
4.6	Influencia de la impureza de base.....	50
4.6.1	Transición al límite de QW rectangular no perturbado.....	50
4.6.2	Resultados a temperatura de 4K.....	52
4.6.3	Temperaturas elevadas. IBEs y concentración de electrones en el QW.....	54
4.6.4	Separación de energías a temperaturas elevadas.....	58

4.6.5	La baja concentración de impurezas de base.....	58
4.6.6	Menor profundidad del QW	59
5	Conclusiones.....	60
	Bibliografía.....	62

Lista de abreviaciones

1D – 1-dimensional

2D – 2-dimensional

2DEG – 2-dimensional electron gas / gas de electrones bidimensionales

3D – 3-dimensional

BI – Background Impurities / Impurezas de base

CVD – Chemical Vapor Deposition / Deposición química de vapor

IBE – Impurity Binding Energy / Energía de enlace de impureza

IR – Infrared / Infrarrojo

MBE – Molecular Beam Epitaxy / Crecimiento epitaxial por haces moleculares

ME – Matrix Element / Elemento de matriz

MQW – Multiple Quantum Wells / Múltiples pozos cuánticos

QCL – Quantum Cascade Laser / Láser de cascada cuántica

QW – Quantum Well / Pozo cuántico

QWIP – Quantum Well Infrared Photodetectors / Fotodetectores de infrarrojo de pozo cuántico

THz – Terahertz

WF – Wave Function / Función de onda

1 Introducción

En esta tesis se propone una configuración novedosa de un dispositivo óptico de pozo cuántico, basada en transiciones ópticas intersubbandas. El dopaje del pozo cuántico (QW, por sus siglas en inglés) permite ajustar la separación de niveles de energía cuantizados mediante el tamaño (que corresponde a la frecuencia de funcionamiento del dispositivo), a través del control del grado de ionización de las impurezas. En este estudio se realizan extensos estudios numéricos de estructuras formadas por $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}$, con barridos paramétricos para varias variables, incluidas las relacionadas con la geometría. Como técnica numérica, se utilizan cálculos autoconsistentes, que incluyen la obtención de la energía de enlace de impureza como parte de la iteración. Se estudian las posiciones de los niveles de energía y las funciones de onda en el pozo cuántico. Así mismo, el coeficiente de absorción incluyendo el aporte lineal y no lineal y el cambio en el índice de refracción para las transiciones intersubbanda. Adicionalmente, se estudia el efecto del campo eléctrico transversal y de las impurezas denominadas de base.

1.1 Pozos cuánticos

Las heteroestructuras semiconductoras son uniones monocristalinas de diferentes materiales con el mismo tipo de red cristalina. La síntesis de estos materiales se hace mediante técnicas como el crecimiento epitaxial por haces moleculares (MBE) [1] y la deposición química de vapor (CVD) [2] y se fabrican de manera tal que dentro de un cristal hay regiones constituidas por diferentes materiales. Los materiales unidos tienen un gap diferente y forman heterouniones. La diferencia entre las bandas prohibidas, en la frontera entre las regiones con diferentes materiales, genera una discontinuidad de banda. Las tecnologías y la actividad para la obtención de heteroestructuras de semiconductores, con parámetros geométricos dados, se denomina ingeniería de banda prohibida. Generalmente, las posiciones relativas entre las bandas de los materiales que forman la heterounión se tratan como una propiedad fundamental [3]. Por la simplicidad y especificidad, en los siguientes conceptos expresados, hablamos solo de la banda de conducción y no se tiene en cuenta la banda de valencia.

Si los materiales forman (1) tres capas planas, (2) el ancho de la segunda capa (central) es comparable a la longitud de onda de De Broglie de electrón en la banda de conducción y (3) la unión de la banda de conducción de la primera y tercera capas (límites) son más altos en energía que la de la capa central, por lo tanto, el perfil de la banda de conducción forma un pozo (ver Fig. 1.1). Aquí los materiales de los extremos forman barreras y el material central forma un pozo de potencial. En el pozo, los electrones de la banda de conducción pueden tener estados cuantizados en una dirección (perpendicular a la capa) y continuos en las otras dos dimensiones del espacio. Dicha estructura electrónica se llama pozo cuántico (QW, por sus siglas en inglés). La dirección perpendicular a las capas se denomina dirección de crecimiento de la heteroestructura (por razones tecnológicas) y se asocia generalmente con la dirección z . Las dimensiones en el plano del QW se denotan como x e y . Los electrones con movimiento en el plano (x, y) y confinados en la dirección z se denomina gas electrónico bidimensional (2DEG) en analogía con el gas electrónico tridimensional (3DEG) en cristales semiconductores en bulk. El continuo 2D de estados electrónicos, asociado con el nivel cuantizado por el tamaño se denomina subbanda. Así, el pozo cuántico forma una serie de subbandas cuantizadas por tamaño que se pueden llenar con 2DEG además del continuo 3D de estados electrónicos en el cristal en bulk.

Las aplicaciones de las heteroestructuras semiconductoras [4] se pueden dividir en dos grandes grupos, fundamentalmente, la fabricación de dispositivos electrónicos y ópticos. El ejemplo más conocido de dispositivo óptico basado en semiconductores son los diodos emisores de luz (LED) [5]. Las aplicaciones electrónicas incluyen entre otros a los circuitos integrados monolíticos o chips de computadora.

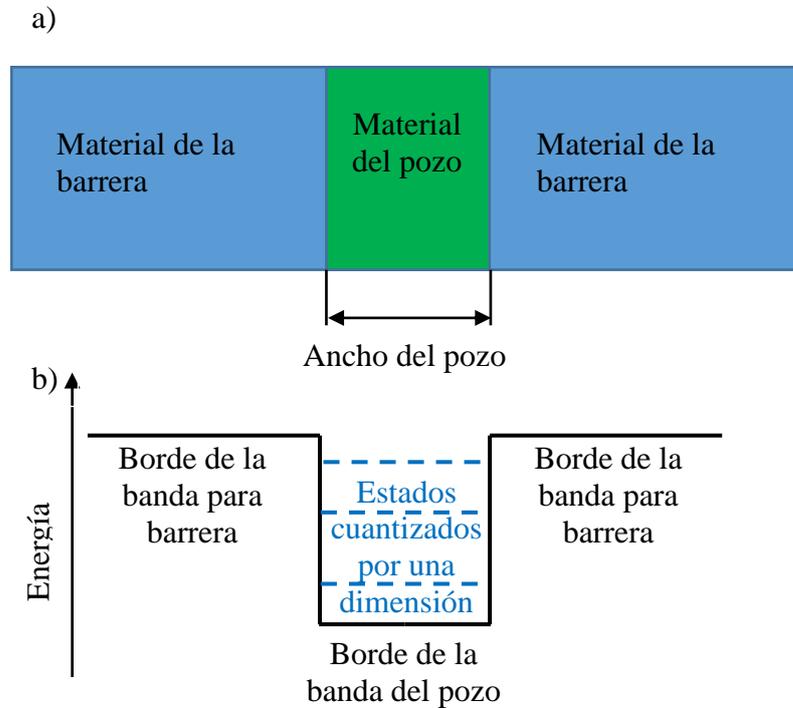


Fig. 1.1. (a) Heteroestructura de pozo cuántico semiconductor y (b) su respectivo perfil de energía para la banda de conducción

1.2 Transiciones entre subbandas en un QW

La mayoría de los dispositivos ópticos basados en heteroestructuras de semiconductores hacen uso de las transiciones entre bandas. Esas transiciones ocurren entre las bandas de valencia y conducción. Las energías de tales transiciones están determinadas fundamentalmente por la banda prohibida del material. Sin embargo, las transiciones ópticas entre los diferentes estados dentro de la misma banda (transiciones intrabanda [6]) también son posibles. Un tipo particular de transiciones electrónicas intrabanda son las transiciones ópticas entre las subbandas de pozos cuánticos [7], que se denominan transiciones ópticas entre subbandas. En este contexto, "óptico" significa que la transición ocurre para la absorción o emisión de un fotón (ver Fig. 1.2), de modo que tales transiciones tienen influencia sobre los espectros de absorción o emisión de la heteroestructura y pueden usarse para construir un dispositivo óptico.

Se destacan dos clases de dispositivos ópticos basados en transiciones entre subbandas en pozos cuánticos: fotodetectores de infrarrojo basados en pozos cuánticos (QWIP, por sus siglas en inglés) [8], que usan absorción y láseres de cascada cuántica (QCL, por sus siglas en inglés) [9,10], que usan la emisión estimulada. Muchas implementaciones de estos diseños están disponibles en el mercado y tienen una amplia gama de aplicaciones. Sin embargo, la dificultad de ajustar las frecuencias de funcionamiento de los dispositivos se considera hoy día una gran desventaja. En esta tesis se propone una forma para lograr un control sobre la frecuencia, mediante el cambio en el grado de ionización de impurezas. De esta manera, se propone una

modificación de los dispositivos actuales para proporcionar un rango de sintonización más amplio y podrían lograrse nuevos diseños de dispositivos ópticos con frecuencias ajustables en el rango de los THz, los cuales funcionarían como filtros y moduladores.

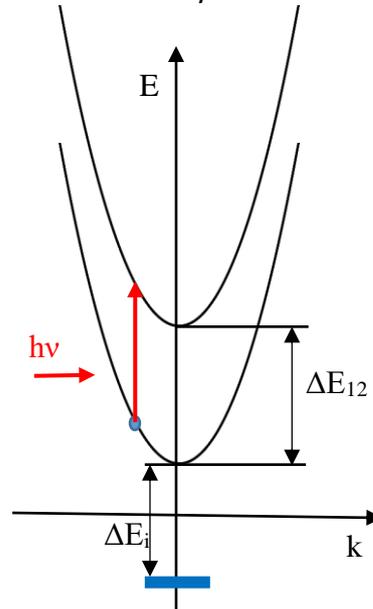


Fig 1.2 Transición óptica de absorción entre subbandas. E - energía, k - vector de onda, línea horizontal gruesa en la parte inferior - estado de impureza, parábolas - relación de dispersión para subbandas, ΔE_i - energía de enlace de impureza, ΔE_{12} - separación de energía entre los mínimos de dos subbandas, $h\nu$ - energía de fotones.

Note en los diseños mencionados anteriormente (QCL y QWIP) se aplica un campo eléctrico en la dirección de crecimiento del QW o perpendicular al plano del QW, el cual se denomina campo eléctrico transversal.

1.3 Radiación en los THz

Para los semiconductores más comunes, las frecuencias de las transiciones ópticas entre subbandas se encuentran entre IR medio y los TeraHertz (THz). Las frecuencias más bajas, esto es, microondas y más bajas, normalmente no se pueden obtener mediante métodos fotónicos y se discuten por tanto en términos de la electrónica. En particular, si hablamos en términos de fotónica, en el caso de las transiciones entre subbandas, si dos subbandas están tan cercanas en que la diferencia corresponde a las microondas (por debajo de 300 GHz o 1 meV), las transiciones entre las subbandas están definidas en términos de las tasas de fonones acústicos y las incertidumbres de diferente tipo (tanto estadística como de Heisenberg), no permiten obtener picos pronunciados en las propiedades ópticas. El límite superior de las energías está definido por las discontinuidades de banda que se pueden obtener para los materiales dados. En general, se consideran de un orden de magnitud por debajo del gap característico de los materiales.

Actualmente, en el rango dado, el más atractivo para la ingeniería (y con mayores dificultades) es el rango THz, que está en el límite óptico (infrarrojos, IR) y electrónico (microondas) [11], ver Fig. 1.3.

Para el término terahercios, el prefijo tera significa 10^{12} y la frecuencia $\nu = 1\text{THz} = 10^{12}\text{Hz}$ y, en consecuencia, el período $T = 1 / \nu = 10^{-12}\text{s} = 1\text{ps}$. La longitud de onda correspondiente (en el vacío) es $\lambda = 3 \times 10^{-4}\text{m} = 0.3\text{mm} = 300\mu\text{m}$ y número de onda $k = 1 / \lambda = 33.3\text{cm}^{-1}$. La energía

del fotón por 1 THz es de $4.1 \times 10^{-3} \text{ eV} = 4.1 \text{ meV}$ y equivalente en temperatura (definida a partir de $\epsilon = k_B T$, con $k_B = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J / K}$ siendo la constante de Boltzmann) $T = 48 \text{ K}$. El rango THz no tiene una definición estricta en la literatura: diferentes autores usan diferentes rangos. Uno de ellos considera que el rango de THz está entre 0.1 y 10 THz (con $\lambda = 3 \text{ mm}$ y $30 \mu\text{m}$), otros lo definen entre 0.1 y 50 THz ($\lambda = 6 \mu\text{m}$). También se pueden encontrar otras definiciones. En mi opinión, el rango apropiado es entre 0.4 mm (0.75 THz) y $40 \mu\text{m}$ (7.5 THz). Por un lado, este cubre completamente la banda de la denominada brecha THz y, por otro lado, existen razones físicas para restringirse a la banda del espectro mencionada. El punto es que a ambos lados del rango de frecuencias de los THz (longitud de onda) se utilizan diferentes conceptos físicos para crear dispositivos, que dependen del valor de la longitud de onda. El extremo de longitud de onda larga limita con el rango de todo el espectro de ondas electromagnéticas (a veces también se denomina rango submilimétrico), que dentro del concepto de dualidad onda-partícula, se ajusta a la definición de onda en lugar de partícula. En consecuencia, las formas electrónicas clásicas de generación de radiación electromagnética (en la que la radiación se trata como una onda electromagnética) se utilizan de manera eficiente en submilímetros y en los rangos de longitud de onda más largos.

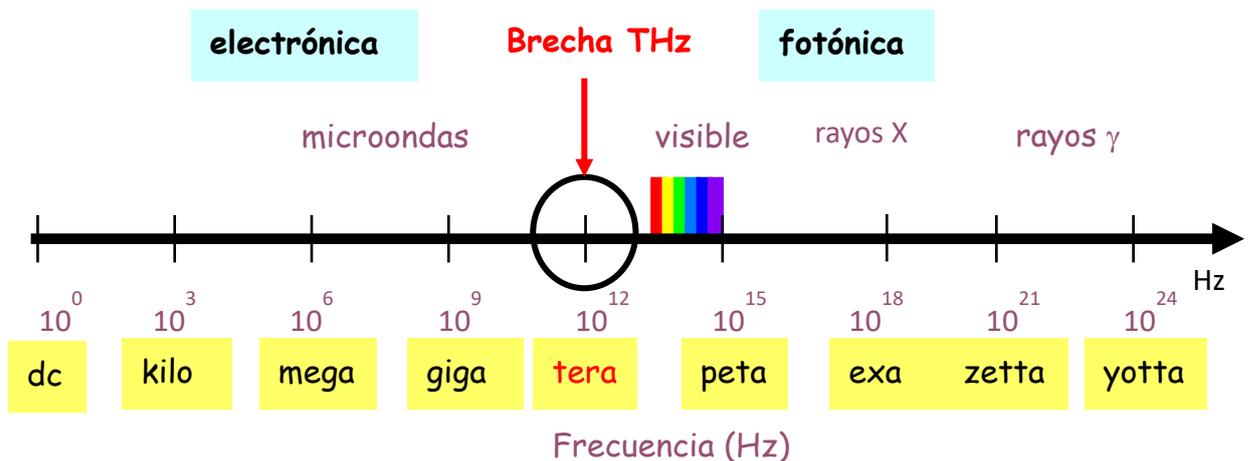


Fig 1.3 Rango de frecuencia de los TeraHertz.

Las peculiaridades de la banda THz se evidencian en varios factores. El primero es la baja energía de los fotones en los THz. Recordemos que la energía cinética promedio de las moléculas en gases o electrones libres en el campo de la materia condensada, así como la energía de oscilación promedio de los átomos alrededor de sus posiciones de equilibrio a temperatura ambiente es de 27 meV y muy importante en física, la temperatura para el nitrógeno líquido es de aproximadamente 7 meV, mientras que la energía de un fotón de 1 THz es de 4.1 meV. Significa que es extremadamente difícil crear una distribución de manera artificial que cumpla con estabilidad en la población de inversión de electrones (o huecos) a estas dos temperaturas para el uso práctico, ya que el movimiento browniano de las partículas destruye cualquier distribución ordenada. Además, la baja energía de la radiación THz crea grandes dificultades en el procesamiento de la información proveniente de esta radiación porque tiene que hacerse bajo un gran ruido térmico. De hecho, aunque la mayor parte de la energía emitida por la radiación térmica de objetos entre 300 K y 77 K no está en el rango de THz y, en principio, no es tan difícil bloquear esta radiación usando filtros ópticos, debemos recordar que cualquier objeto con temperatura diferente de 0 K emite radiación en el rango de THz, ya que se trata de una distribución espectral de emisión, implica un amplio rango de frecuencias. La segunda

característica es que la atmósfera de la Tierra absorbe muy bien la radiación THz, como se muestra, por ejemplo, en la Figura 14 de la referencia [12]. En esa imagen se ve que el principal absorbente de los THz es el vapor de agua. Significa que la radiación THz no puede propagarse en la atmósfera de la Tierra una gran distancia y está limitada por el vacío o guías de onda ultradelgadas llenas de un gas inerte. Además, espectros vibracionales y rotacionales de muchas moléculas están en el rango de los THz. La tercera característica notable de la radiación THz es que muchos materiales son transparentes a estas frecuencias, tales como los plásticos, cerámicos y la ropa. Una cuarta característica se deriva del primer ítem, pero debido a su gran importancia lo enuncio por separado. Aquí queremos decir que, debido a la baja energía de los fotones en los THz, son inofensivos para el tejido humano y, teniendo en cuenta su absorción por el agua, así como su gran capacidad de penetración, pueden usarse en medicina para variados propósitos.

La radiación THz tiene muchas potenciales aplicaciones en medicina ([13, 14, 15]), en seguridad [16, 17], monitoreo atmosférico [18], inspección de materiales, control de calidad [19] etc.

1.4 Impurezas en dispositivos ópticos de nanoestructuras semiconductoras

La importancia de las nanoestructuras de semiconductores como dispositivos ópticos activos y pasivos en la ciencia y la tecnología contemporánea difícilmente podría considerarse sobreestimada. El dopaje siempre ha estado entre los problemas más importantes en la física de semiconductores, ya que determina las características principales de la gran mayoría de dispositivos semiconductores. El desarrollo de nanotecnologías [de aquí en adelante haremos referencia al caso particular de los pozos cuánticos rectangulares (QW), la cual es la nanoestructura objeto de estudio en esta tesis] ha llevado a enfocarse en estudios relacionados con las propiedades de impurezas. En primer lugar, la atención se centró en lograr un aumento de la movilidad de los portadores de carga y fue la razón para buscar la eliminación de impurezas de los QW. Con este propósito se estudiaron los procesos de dopaje modulado [20] y dopaje delta en la barrera [21], que hicieron posible combinar una alta concentración y movilidad de portadores. Por otro lado, una fuerza del oscilador (*oscillator strength*, del inglés) alta para las transiciones ópticas entre subbandas permitió utilizar esas estructuras tanto para generar la emisión de radiación (por ejemplo, láser de cascada cuántica [9]) como para aplicaciones de detector (fotodetector de infrarrojo de pozos cuánticos [22]). A pesar de que los QW activos a veces están fuertemente dopados, las impurezas, sin embargo, juegan un papel auxiliar en estas estructuras. Por lo tanto, se puede concluir que, todavía no existe un dispositivo real basado en las propiedades de impurezas en los QW. De hecho, las impurezas en un QW son un interesante tema de estudio. El punto para destacar es que la energía de enlace de la impureza (IBE) es muy sensible a la variación de prácticamente todos los parámetros del QW. En este punto, vale la pena recordar un trabajo de Bastard, publicado hace más de treinta años [23]. En ese trabajo se abordó el caso de QWs con confinamiento infinito y se demostró que la IBE dependía del ancho del pozo, así como de la posición de la impureza dentro del pozo. Desde entonces, los investigadores han demostrado la dependencia de la IBE con: la profundidad y el ancho del QW [24, 25], el ancho de las barreras para estructuras multi-QW [26], la relación de dispersión no parabólica [27], la diferencia entre las masas efectivas de las regiones de pozo y barrera [28], la diferencia de la constante dieléctrica entre los materiales de barrera y pozo [29], y el apantallamiento por electrones libres [30, 31]. Además, de la influencia de muchos otros factores

externos sobre la IBE tales como: campos eléctricos y magnéticos y tensión uniaxial [32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39], presión hidrostática [40, 41, 42] y la radiación láser de alta intensidad [43, 44, 45, 46], efectos que han hecho parte de diferentes investigaciones. Además, el efecto de la temperatura se analizó mediante el uso de la ecuación de Schrödinger bajo la aproximación de masa efectiva para electrones como función de la temperatura, la constante dieléctrica y la profundidad del pozo [47, 48, 49].

1.5 Concepción de un nuevo tipo de dispositivo ajustable en el rango de los THz

Una capa delta de impurezas colocada dentro del pozo cuántico puede usarse como un factor que permite el control de las energías de transiciones ópticas entre subbandas o, en otras palabras, abre posibilidades para la creación de nuevos tipos de sintonización mediante un campo eléctrico longitudinal externo al dispositivo óptico en los THz. La idea es la siguiente: Inicialmente, la impureza no está ionizada (lo que implica baja temperatura) y el perfil de potencial del QW tiene, por ejemplo, una forma rectangular clásica. Cuando se aplica un campo eléctrico en el plano del QW, se genera corriente eléctrica, la impureza se ioniza mediante un mecanismo de impacto y la redistribución de carga en la dirección perpendicular al plano QW distorsiona el perfil del potencial. El perfil distorsionado cambia (normalmente aumenta) las separaciones de energía entre las subbandas cuantizadas debidas al tamaño, así como la energía de la respuesta óptica máxima con un comportamiento creciente. El efecto se ilustra en la Figura 1.4.

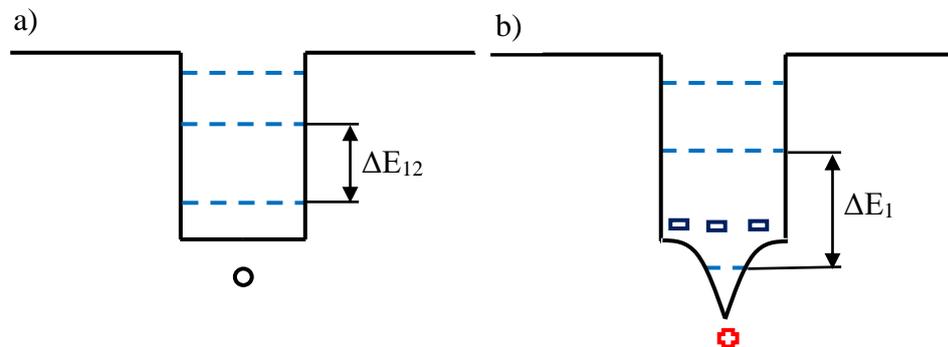


Fig. 1.4 Perfil del QW con impureza no ionizada (a) y parcialmente ionizada (b) con una capa delta de impurezas situada en el centro del pozo. ΔE_{12} - separación de energía entre dos niveles bajos. Círculo negro: impureza neutra, cruz roja: centros de impurezas ionizadas, signos menos azules: electrones en subbandas.

Evidentemente el efecto descrito anteriormente depende del grado de ionización de la impureza, uno de los parámetros clave para el estudio de este efecto es la energía de enlace de la impureza. Para la mayoría de los diseños en la ciencia de semiconductores, el IBE para las heteroestructuras se toma aproximadamente como el del material en bulk, que es bien conocido experimentalmente para la mayoría de los materiales semiconductores. Sin embargo, se sabe que en nanoestructuras, particularmente en pozos cuánticos, el IBE difiere esencialmente de los materiales en bulk y depende en particular de la posición en el pozo [23]. Así como la mayoría de los dispositivos existentes, si no todos, basados en transiciones entre subbandas, se dopan en las regiones pasivas y la impureza superficial se usa solo como fuente de electrones libres, las variaciones exactas en la magnitud de la IBE no suelen jugar un papel importante en el rendimiento del dispositivo y en su mayoría no es necesario tenerlos en cuenta. Sin embargo, para la correcta estimación cuantitativa de los efectos relacionados con el cambio del grado de

ionización de impurezas como el descrito anteriormente, conocer la magnitud exacta de la IBE es el factor clave.

Hay muchos trabajos hasta hoy que se dedican a estudios numéricos de la IBE en los pozos cuánticos de diferentes formas de su perfil y para diferentes condiciones y efectos como los reportados en [50, 51, 52], entre otros. Las peculiaridades del presente trabajo en comparación con la mayoría de otros de naturaleza similar son las siguientes: Primero, aquí el método de cálculo de IBE es un cálculo autoconsistente modificado, que es crucial en el caso de las capas delta de impurezas con grado de ionización variable porque la capa delta ionizada total o parcialmente puede influir fuertemente en el perfil de potencial del pozo, que, a su vez, también influye en la IBE, por lo tanto, en el grado de ionización. Para tener en cuenta esta influencia mutua se usa el método iterativo autoconsistente. En segundo lugar, se utiliza un método de expansión en lugar de las comunes técnicas de variación, por lo que puede ser un punto de referencia más para la comparación cualitativa y cuantitativa con otros trabajos, incluso para el caso de la impureza no ionizada (a bajas temperaturas).

1.6 Objetivos generales y específicos

El objetivo general de este trabajo es el estudio numérico de todos los efectos y regularidades que surgen en nanoestructuras semiconductores QW delta-dopadas desde el punto de vista de su propiedades electrónicas y ópticas, teniendo en cuenta como objetivo final el diseño de nuevos dispositivos ópticos sintonizables basados en transiciones entre niveles cuantizados en tales pozos cuánticos.

Los objetivos específicos del trabajo son los siguientes:

1. Proponer y justificar los materiales y parámetros geométricos de la heteroestructura semiconductor óptima para obtener el efecto de sintonización en dispositivos ópticos activos y pasivos en el rango de los THz y/o el IR lejano.
2. Diseñar e implementar el procedimiento numérico autoconsistente para la simulación de las propiedades de la banda y ópticas en la estructura QW delta-dopada con incorporación del cálculo de la energía de enlace de impurezas. Definir y enunciar los rangos de aplicabilidad del método.
3. Diseñar e implementar las modificaciones del método en los casos particulares de campo eléctrico transversal y barreras infinitas con impureza de base.
4. Estudiar numéricamente los efectos de la posición de las subbandas de energía, la separación de energía, el nivel de Fermi y la energía de enlace de impurezas dependiendo de parámetros tales como tamaños geométricos, concentración de impurezas y grado de ionización. Verificar y buscar coincidencias con los resultados reportados en la literatura.
5. Calcular y analizar las propiedades ópticas lineales y no lineales relacionadas con las transiciones entre subbandas en las estructuras bajo estudio.
6. Estimar el posible rango de frecuencia de sintonización de los posibles dispositivos ópticos propuestos. Discutir las perspectivas de implementación de los tipos particulares de dispositivos.
7. Estudiar numéricamente y discutir la influencia del campo eléctrico transversal aplicado a la estructura sobre las características básicas de las estructuras mencionadas y el posible desempeño de los dispositivos ópticos.

8. Estudiar numéricamente y discutir los rangos de la posible influencia de la impureza de fondo tecnológica sobre las características básicas de las dichas estructuras y el posible rendimiento de los dispositivos ópticos.

2 Sistema bajo estudio

2.1 Estructura de pozos cuánticos de SiGe

El sistema bajo estudio corresponde a estructuras rectangulares de $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ QW, delta-dopadas con fósforo en el centro o en el borde, ver Figura 2.1. Tal elección está justificada por: primero, es un QW tipo n, cuyos cálculos son más simples que para el tipo p. En segundo lugar, la energía de enlace de la impureza de fósforo para el QW de silicio dopado en el centro de un pozo de ancho $L = 20$ nm, que usamos en nuestros cálculos, debe estar en el rango de 30 a 40 meV [53] y, de acuerdo con varias referencias [23, 24, 25, 28, 35], para las estructuras dopadas en los bordes debe ser menor a la mitad. Por lo tanto, el grado de ionización y, por consiguiente, el potencial de la capa delta, para ambos casos de dopaje delta, cambian notablemente en el rango de temperatura de interés. Además, la estructura elegida está formada por componentes ampliamente utilizados en la industria electrónica. Y, por último, pero no menos importante, esta estructura ha sido cuidadosamente estudiada en la referencia [53] para el caso de la temperatura de 0 K. Significa que podemos verificar nuestros resultados con los obtenidos en ese trabajo en casos específicos. Sus autores tomaron los parámetros de la referencia [54], esos mismos valores fueron tomados en este trabajo. Por lo tanto, para tales $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ QW, utilizamos el valor de 200 meV para la profundidad del QW de acuerdo con el trabajo [54], a pesar de que en la literatura se encuentran nuevos valores [55, 56, 57].

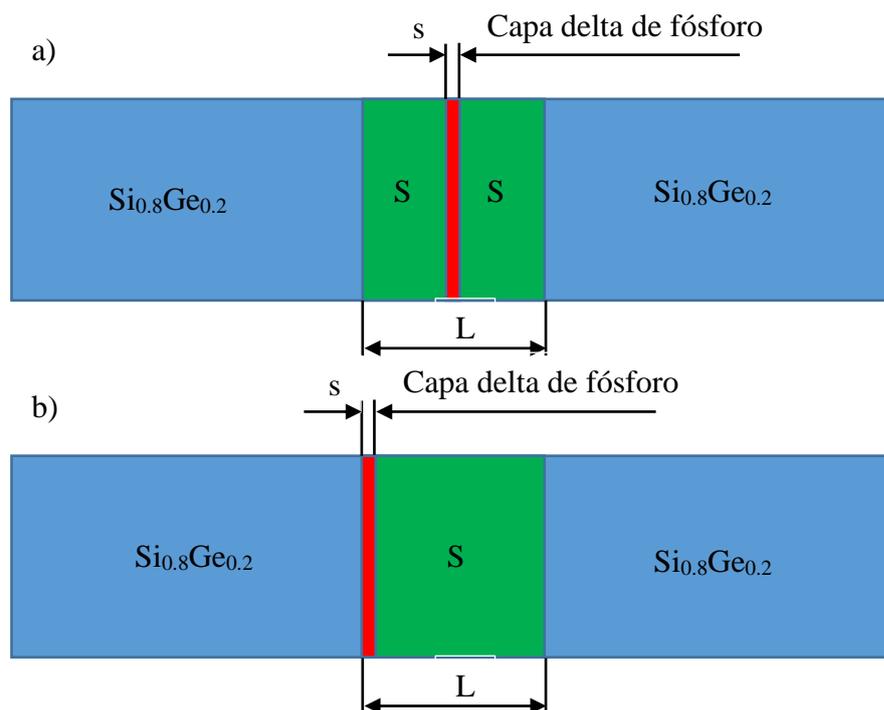


Fig. 2.1. Representación esquemática de la heteroestructura bajo estudio a) dopada en el centro, b) dopada en el borde del pozo. s - ancho de la capa delta, L - ancho del pozo.

En algunos estudios, el ancho de pozo L es variable, pero como punto de referencia tomamos dos anchos de pozo, de 10 y 20 nm. Tales anchos nos permiten obtener energías de transición entre subbandas correspondientes a la región del espectro de los THz. La selección del ancho también se basa en los argumentos dados en la sección de suposiciones y limitaciones. El

ancho de la capa delta se tomó como 1 nm, lo que se puede lograr tecnológicamente y corresponde a aproximadamente 2 parámetros de red.

Consideramos dos configuraciones: En la mayor parte del estudio, usamos la configuración MQW, que corresponde a una estructura periódica e infinita. Los QW en la estructura están lo suficientemente lejos el uno del otro, lo que permite despreciar el acoplamiento entre estados ligados y lo suficientemente cercanos como para suponer que el nivel de Fermi de la estructura está definido por las impurezas en las capas delta y despreciar las impurezas de base y los portadores intrínsecos. Otra configuración es un solo pozo cuántico con barreras infinitas. Esta configuración implica que el nivel de Fermi se define por el bulk y se utiliza para estudiar la posible influencia de las impurezas de base en sus extremos. Para ambas configuraciones, el cristal se considera infinito en todas las direcciones, de modo que despreciamos la influencia de los estados superficiales en el nivel de Fermi.

Las temperaturas que tomamos para la mayoría de los cálculos son 300 K, 77 K y 4 K, que son valores de referencia típicos en la física del estado sólido, ya que se refieren a las temperaturas del medio ambiente, el nitrógeno líquido y el helio líquido, respectivamente. $T = 4$ K en realidad corresponde al caso de la ionización cero de impurezas de la capa delta y es nuestro equivalente de temperatura cero, valor que por razones del cálculo numérico se tomó diferente de cero.

2.2 Suposiciones y limitaciones

Calculamos la IBE bajo la aproximación de masa efectiva. Tal como en el trabajo [53], despreciamos una pequeña diferencia entre las masas paralelas $m_{||}$ y constantes dieléctricas ϵ para los materiales de la barrera y el pozo. También suponemos que las energías de la subbanda son isotrópicas y parabólicas en el plano QW del espacio k . La base para tal suposición es el trabajo [27] en el que se muestra, que si el ancho de un QW L no es menor que dos radios de Bohr a_B ($L \geq 2a_B$), entonces la influencia de la no parabolicidad en el estado de la impureza de base puede ignorarse. Esta condición se cumple bien en nuestro trabajo para la concentración de dopaje delta $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Este valor es lo suficientemente grande como para considerar que la carga de impurezas ionizadas se distribuye uniformemente en el plano delta dopado a $T = 300$ K. Por otro lado, cumple también la condición [30] de que las distancias entre impurezas $a > 2 \times 1.3a_B$, lo que permite ignorar los fenómenos de interacción de muchas partículas y tratar las impurezas de manera aislada. En nuestros cálculos usamos el ancho de la capa delta-dopada con $s = 1$ nm, ya que es el ancho típico para estructuras similares, como el caso investigado experimentalmente en [58].

2.2.1 Concentración de impurezas en una capa delta

Es claro que para lograr un efecto pronunciado de la ionización de una capa delta, hay que usar una concentración de impurezas lo suficientemente alta. Pero, también es evidente, que la concentración no debe ser demasiado alta; para evitar la formación de bandas de impurezas (aquí hablamos de la banda de impurezas formada por la superposición de las funciones de onda de la impureza, y no de la propagación de las energías de ionización de impurezas) o, lo que es peor, la aparición de colas de la densidad de estados en la banda prohibida, dado que solo en el caso de una sola impureza es posible entender la influencia del grado de ionización en la capa delta sobre la IBE. Por otro lado, la concentración no puede ser inferior a un cierto valor crítico, para poder utilizar el concepto de un potencial Hartree constante

a lo largo de la capa delta a temperaturas de nitrógeno líquido y ambiente. Del lado de las altas concentraciones, la restricción natural (y bastante fuerte) puede ser el valor crítico N_M , para la transición de metal-semiconductor de Mott. Este valor se puede estimar a partir de la relación $a_B N_M^{1/2} = 0.37$ [59], y para el material usado $a_B \cong 2 \text{ nm}$, $N_M = 3.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

A nivel tecnológico, el límite de la concentración volumétrica de impurezas se caracteriza por el límite de solubilidad sólida, que para el caso de la impureza de fósforo en silicio es de $4 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ [60], página 89, y corresponde a la distancia media entre los átomos de impureza de 3 nm o concentración en el plano de 10^{17} m^{-2} . La densidad superficial máxima que utilizamos es de 10^{12} cm^{-2} (10^{16} m^{-2}) por lo que estamos dentro de los límites. Otra característica importante es la longitud de difusión asociada al proceso de recocido (annealing) que limita el ancho de la capa delta. Dependiendo de las características particulares de la tecnología, en la literatura de trabajos experimental se encuentran valores de difusión P en Si de 1 nm [61] a 0,29 nm [62] a temperaturas más bajas, por lo que nuestro ancho de la capa delta de 1 nm (aproximadamente dos capas atómicas) parece razonable.

2.2.2 Fluctuaciones del potencial en el plano del pozo cuántico

El límite inferior en la concentración se puede determinar a partir de las siguientes consideraciones: Se sabe [63] que las impurezas pueden dar lugar a un potencial fluctuante con el tamaño máximo r_s , que, en principio, debe tenerse en cuenta en el Hamiltoniano del problema. En nuestro caso, cuando ignoramos la concentración de las impurezas de base, el número de electrones en las subbandas es igual al número de donadores ionizados en la capa delta. Significa [63] que el tamaño de una fluctuación máxima es igual a la distancia media entre las impurezas ionizadas $r_s = d^+ = 1/\sqrt{N_d^+}$. Entonces, la razón para despreciar las fluctuaciones es que no hay una configuración fija de los átomos de impurezas ionizadas, sino que cambia constantemente con el tiempo, ya que el proceso de ionización de los átomos es aleatorio. Y si en cualquier lugar de la capa delta surge un potencial cambiante; en primer lugar, estará inmediatamente apantallado en cierta medida por electrones libres, y, en segundo lugar, las probabilidades de ionización de impurezas también disminuirán inmediatamente en esta y en áreas adyacentes de la capa delta. Al decir aquí "inmediatamente", queremos decir que los tiempos correspondientes, τ , son del orden de 10^{-10} s. Este es el tiempo de vida media de un electrón en la banda de conducción relacionada a la captura por estados de impurezas excitados más altos [64], dentro del rango de temperatura 4 ... 100 K. Con base en este tiempo, el valor más bajo de la concentración de impurezas se puede estimar a partir de la desigualdad, indicando que el camino libre medio del electrón ($l \cong v\tau \approx \sqrt{kT/m_{||}}\tau$ con k siendo la constante de Boltzmann) no debe ser menor que la distancia entre los donantes ionizados: $l \geq d^+$. Podemos imponer una restricción más fuerte, si recordamos que la frase "el camino libre medio de los electrones" tiene sentido solo si no es menor que la longitud de onda de De Broglie ($\lambda = \frac{h}{p} \approx \frac{h}{\sqrt{mkT}}$ [65] siendo h la constante de Plank y p el momento de los electrones). Eso significa que el límite inferior de la concentración de impurezas se puede estimar a partir de la desigualdad $\lambda \geq \frac{1}{\sqrt{N_d^+}}$ y depende de

la temperatura: $N_d^+ \geq \frac{m_{||} kT}{h^2}$. Por ejemplo, $N_d^+ \geq 4.2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ para $T = 77 \text{ K}$, y $N_d^+ \geq 1.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ para $T = 300 \text{ K}$. Nuevamente, debemos enfatizar que, en realidad, el límite inferior de la

concentración de impurezas tiene que ser menor que los valores mencionados, en el mismo grado en que la longitud de onda de electrón de De Broglie es menor que su trayectoria libre media. Por lo tanto, al encontrar la IBE, se puede omitir la fluctuación del potencial en el hamiltoniano. La fórmula para esa estimación se puede escribir como

$$sN_{\delta} > \frac{m_{||}kT \left(1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_{\delta}}{kT}\right)\right)}{h^2} \quad (2.1)$$

En consecuencia, con base en todo lo mencionado anteriormente, hemos elegido los valores de entrada de la concentración de impurezas en la capa delta como $0.6 \times$, $1.2 \times$ y $2.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

2.2.3 Tensión interna en QWs de SiGe

Tomamos los parámetros de la estructura crecida en la dirección cristalográfica [100]. Nuestra elección del ancho del QW ($L = 20\text{nm}$) se basa por un lado en los resultados del trabajo [66], donde se demostró que cuanto más ancho es un QW, más fuerte es la influencia de la ionización de la capa delta en la IBE y sobre fenómenos asociados. Por otro lado, para el límite superior, estamos limitados por el llamado ancho crítico [56], debajo del cual los QW pueden verse como QWs tensionados debido al desajuste del parámetro de red entre los materiales de la barrera y el pozo. $L = 20 \text{ nm}$ parece ser un buen valor para estos dos límites. Por lo tanto, nuestro QW presenta una tensión interna debido a que la constante de red para las barreras de SiGe es mayor que para el Si. Significa esto que el QW puede considerarse sometido a una tensión uniaxial a lo largo de la dirección de crecimiento z de la estructura. La tensión depende del contenido x en porcentaje de Ge y se tiene en cuenta indirectamente en la profundidad del QW. Por otro lado, es bien sabido que la presión uniaxial separa los niveles de impurezas [67]. Esto da como resultado el levantamiento de la degeneración en los valles de la banda de conducción del Si para los electrones y , en nuestro caso en dirección de crecimiento [100]. La separación entre los cuatro valles superiores de energía Δ_4 y otros dos Δ_2 es de más de 110 meV [66, 68, 56]. A su vez, una separación tan grande nos permite considerar solo los dos valles más bajos (incluso a temperatura $T = 300 \text{ K}$) con las masas efectivas a lo largo de la capa $m_{||} = 0,19m_0$, y en la dirección de crecimiento $m_{\perp} = 0,92m_0$ siendo m_0 la masa del electrón libre. Además, un ancho de QW relativamente grande nos permite despreciar la no parabolicidad de los niveles de energía cuantizados en el pozo cuántico. Esto se justifica en que en el trabajo [27] se demostró que si el ancho del QW L no fuera inferior a dos radios de Bohr a_B ($L \geq 2 a_B$), la influencia de la no parabolicidad en el estado de impureza de base podría despreciarse. Para los radios de Bohr $a_B \cong 2\text{nm}$ [66] esta condición se cumple suficientemente. Además, no tenemos en cuenta en nuestros cálculos la separación de las energías de enlace de la impureza. Más adelante, en su lugar, siguiendo el trabajo [53] consideraremos la influencia conjunta de la separación y el cambio químico en la energía de ionización de impurezas más adelante.

2.2.4 Sobre el desplazamiento químico

Es bien sabido que el enfoque de masa efectiva utilizada para los cálculos del estado fundamental de impureza no permite la inclusión del desplazamiento químico (o efecto de celda central). Esto se vuelve particularmente importante cuando se trata de Si, o estructuras basadas en Si. De hecho, el cálculo de la IBE para el fósforo (donador poco profundo) en Si, bajo la aproximación de masa efectiva da el valor de 29 meV [69], mientras que su valor real es de $45,6$

meV; ver, por ejemplo, los valores en el trabajo [70]. La diferencia de 16,6meV (que no es insignificante) se atribuye al desplazamiento químico. Por lo tanto, para ajustar los resultados de los cálculos teóricos (provenientes de la teoría de masa efectiva) y experimentales, hay que considerar el desplazamiento químico. Para eso proponemos agregar 8 meV a todos nuestros resultados obtenidos aquí. Al hacerlo, nos basamos en el trabajo [66], en el que se encontró que este valor debe agregarse al IBE para la misma estructura que la nuestra, y para que el ancho QW L no sea inferior a 7 nm. Estimamos que la incertidumbre de este valor no es superior a 1 meV.

3 Métodos

3.1 Posiciones de subbandas de energía y funciones de onda

Los niveles de energía E_j y las funciones envolventes de las subbandas confinadas en la dirección z - ($\xi_j(z)$) se consideran los valores propios y las funciones propias del Hamiltoniano unidimensional (que depende solo de z)

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + e\varphi(z), \quad (3.1)$$

donde m_\perp es la masa efectiva en la dirección z , perpendicular al plano QW, $V(z)$ es el perfil del potencial QW a temperatura cero (QW rectangular no perturbado): $V(z) = \begin{cases} 0, & |z| > L/2 \\ -V_b, & |z| \leq L/2 \end{cases}$, $\varphi(z)$ - potencial electrostático debido a una distribución no uniforme de cargas a lo largo del eje z (de ahora en adelante también lo llamaremos potencial de Hartree), y todas las demás cantidades y sus variables representativas son comúnmente conocidas y utilizadas en la literatura científica. La ecuación de Schrödinger correspondiente, escrita en la forma de BenDaniel-Duke [71] está dada por:

$$H_0 \xi_j(z) = E_j \xi_j(z) \quad (3.2)$$

La solución de la ecuación. (3.2) se obtiene mediante el método de disparo (“shooting method”, el cual es uno de los métodos numéricos estándares para resolver el problema de autovalores y autofunciones en una dimensión) descrito en el libro [72]. Así como ignoramos las diferencias entre las masas efectivas para la barrera y el QW, las condiciones de frontera tipo Ben Daniel-Duke [71] en las interfaces $|z| = L/2$ se convierte en la condición de continuidad de la función de onda y su derivada con respecto a z . El número de niveles de energía cuantizados N tomados en cuenta ($j = 1, 2 \dots N$) se escogen como el máximo entre las dos opciones siguientes: La primera es que la diferencia entre las energías de los niveles N y 1 no debe ser inferior a $3kT$: $E_N - E_1 \geq 3kT$, teniendo en cuenta que en esta condición la población de la subbanda N se está volviendo insignificamente pequeña y no puede influir significativamente en el potencial φ_{QW} dentro del QW. La segunda opción es que la diferencia entre las energías de un estado de impureza calculado con N y $N-1$ niveles de cuantización espacial (ver la descripción en la sección 3.4) debe ser inferior a $0,1\text{meV}$: $E_\delta^N - E_\delta^{N-1} \leq 0.1 \text{ meV}$. Los cálculos mostraron que para la primera opción $N = 9$ (a una temperatura de 300K) y para la segunda $N = 7$. En consecuencia, tomamos en cuenta 7 niveles de energía cuantizados para las temperaturas de 4 y 77 K y 9 niveles para la temperatura ambiente (300 K).

En el caso del campo eléctrico transversal aplicado, la ecuación (3.1) se transforma en

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_\perp} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) + e\varphi(z) + eEz. \quad (3.3)$$

Es decir, se agrega un término constante para modelar el campo eléctrico. Este término proporciona dificultades adicionales para el método numérico. Para un rango de integración suficientemente grande sobre z , el potencial en uno de los bordes puede ser menor que algunos de los valores propios en la cantidad necesaria de funciones propias. Técnicamente significa que el estado electrónico no está localizado y que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo no es aplicable. En ese caso, superamos ese problema a nivel numérico introduciendo el método Big Quantum Box, es decir, modificando el potencial del pozo a

$$V(z) = \begin{cases} 0, & \frac{L_1}{2} > |z| > \frac{L}{2} \\ -V_b, & \frac{L}{2} \geq |z| \\ \infty, & |z| \geq \frac{L_1}{2} \end{cases}, \quad (3.4)$$

donde L_1 es el ancho del Big Quantum Box con barreras infinitas, $L_1 > L$.

L_1 se seleccionó manualmente durante el proceso de cálculo de manera que (i) el ancho de la barrera finita sea al menos comparable con el ancho del pozo; y (ii) los centros de masa de todas las funciones de onda al cuadrado deben estar dentro del pozo. Realmente, ese fue el criterio cuando la deslocalización de los WF se puede despreciar.

Como resultado de la solución numérica de la ecuación 3.2, obtenemos el conjunto de estados ligados en la dirección z , estados con energía E_i y sus funciones de onda correspondientes ξ_j , que describen a su vez las subbandas correspondientes. Aquí $i = 1, 2, 3 \dots$ y el estado fundamental corresponde a $i = 1$.

3.2 Nivel de Fermi

El nivel de Fermi se encontró a partir de la condición de electro neutralidad para toda la estructura, la cual se expresa mediante:

$$\int_{-\infty}^{\infty} N^{\pm}(z) dz = 0 \quad (3.5)$$

Aquí $N^{\pm}(z)$ es la concentración de carga y es igual a la diferencia entre las concentraciones de los centros de donadores ionizados $N_D^+(z)$ y los electrones libres $N^-(z)$:

$$N^{\pm}(z) = N_D^+(z) - N^-(z) \quad (3.6)$$

Aquí despreciamos los huecos asumiendo que su cantidad es pequeña. Eso nos permite omitir las complejidades en la banda de valencia alrededor del QW. Los centros de donadores ionizados se encuentran dentro de la capa delta y cumplen la estadística de Fermi:

$$N_D^+(z) = \begin{cases} N_{\delta}^+(z) = \frac{N_{\delta}}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_{\delta}}{kT}\right)}, & |z| < \frac{s}{2} \\ 0 - \text{en otros casos} \end{cases} \quad (3.7)$$

Aquí hicimos las siguientes suposiciones: (i) La distribución de la impureza a lo largo del ancho de la capa delta s es uniforme: $N_{\delta}(z) = \begin{cases} N_{\delta} = \frac{n_{\delta}}{s}, & |z| < s/2 \\ 0, & |z| \geq s/2 \end{cases}$, lo cual proviene de la referencia [66]. (ii) El IBE es el mismo a lo largo del ancho de la capa delta y se calcula para el centro de la misma tal como se describe en la sección correspondiente: $\varepsilon_{\delta}(z) = \text{const} = \varepsilon_{\delta}(z=0)$, $\varepsilon_{\delta} = E_1 - E_{\delta}$ (E_1 es la energía fundamental en la primera subbanda de cuantización). La razón de esto es que el ancho de la capa delta s es relativamente pequeño. La distribución de electrones $N^-(z)$ consiste en un gas de electrones en las subbandas cuantizadas del QW:

$$N^-(z) = N_{QW}(z) = \frac{m_{||} kT}{\pi \hbar^2} \sum_j^N \ln \left(1 + \exp \frac{E_F - E_j}{kT} \right) |\xi_j(z)|^2 \quad (3.8)$$

En consecuencia, la concentración total de electrones en la superficie de las subbandas del QW es

$$n_{QW} = \int_{-\infty}^{\infty} N_{QW}(z) dz = \frac{m_{||} kT}{\pi \hbar^2} \sum_j^N \ln \left(1 + \exp \frac{E_F - E_j}{kT} \right), \quad (3.9)$$

Como resultado de la solución numérica de la ecuación 3.5, obtenemos el nivel de Fermi E_F . La ecuación se resolvió utilizando el método de bisección.

3.3 Potencial de Hartree

El potencial de Hartree $\varphi(z)$ de la ecuación (3.1) se obtiene de la ecuación de Poisson escrita para el área del pozo cuántico, donde las cargas se distribuyen de manera no uniforme a lo largo de:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \frac{e}{\epsilon \epsilon_0} N^\pm(z). \quad (3.10)$$

La distribución de la carga $N^\pm(z)$ se discutió en la sección anterior. La ecuación se resuelve mediante integración directa con el método Runge-Kutta IV.

3.4 Energía de enlace de la impureza

La IBE para la capa delta se obtiene al introducir en el modelo H_0 (3.1) el potencial de Coulomb del átomo de impureza ionizada. Siguiendo [73], es conveniente usar coordenadas cilíndricas r, θ, z para aprovechar la simetría del problema, lo que resulta en que la función de onda total $\Psi(R, \theta, z)$ se puede escribir como

$$\Psi(R, \theta, z) \equiv \exp(im\theta) \psi_m(R, z). \quad (3.11)$$

Aquí $i = \sqrt{-1}$, y m es el número cuántico azimutal, que corresponde a un número entero. Para encontrar $\psi_m(R, z)$ dividimos el hamiltoniano en dos partes

$$H = H_0 + H_1 \quad (3.12)$$

la primera parte depende solo de la coordenada z - vea la ecuación (3.1). A su vez, la parte H_1 incluye todas las otras coordenadas que por el término de Coulomb no son separables:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m_{||}} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0\sqrt{R^2+(z-z_D)^2}} \quad (3.13)$$

Aquí $m_{||}$ es la masa efectiva longitudinal de electrones (en el plano QW), z_D - es la posición del centro de impurezas. Entonces se expande una función de onda desconocida en el Hamiltoniano total (3.12) en series de funciones propias de subbandas $\xi_j(z)$ del Hamiltoniano H_0 :

$$\Psi(R, \theta, z) \equiv \exp(im\theta) \sum_j f_j^m(R, z) \xi_j(z). \quad (3.14)$$

y se reemplaza la expresión (3.14) en la ecuación de Schrödinger del Hamiltoniano completo H :

$$\left[H_0 - \frac{\hbar^2}{2m_{||}} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0\sqrt{R^2+(z-z_D)^2}} \right] \Psi(R, \theta, z) = E\Psi(R, \theta, z). \quad (3.15)$$

Después de diferenciar la ecuación (3.15) con respecto a θ , y multiplicar por $\xi_N^*(z)$, ($N = 0, 1, 2, \dots$) la ecuación (3.15) en la izquierda e integrar con respecto a z obtenemos:

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{d}{dR} + \left(k_N^2 - \frac{m^2}{R^2} \right) \right] f_N^m(R) = U_{Nn}(R) f_n^m. \quad (3.16)$$

Aquí $U_{Nn}(R) = \frac{2m_{||}}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \int \xi_N^*(R) \frac{e^2}{\sqrt{R^2+(z-z_D)^2}} \xi_n(z) dz$, $k_N^2 = \frac{2m_{||}}{\hbar^2} (E - E_N)$, y E_N ($N=1, 2, 3, \dots$) es la energía de la subbanda cuantizada por el espacio. La ecuación (3.16) con el lado

derecho igual a cero (lo que significa sin el término de Coulomb) es tipo Bessel de orden entero m , y la función de onda permitida solo se puede obtener para $E > E_N$ y luego la solución general es la suma de las funciones de Bessel de los tipos, primero (J) y segundo (N)

$$f_N^m(R) = C_N J_m(k_N R) + S_N N_m(k_N R) \quad (3.17)$$

Con C_N y S_N constantes arbitrarias. Debido a que las funciones de Bessel de segunda clase tienen singularidades en cero, el coeficiente S_N debe ser igual a cero y, en consecuencia

$$\Psi(R, \theta, z) = C_N \exp(im\theta) J_m(k_N R) \xi_N(z). \quad (3.18)$$

Pero nuestra tarea es encontrar la solución para $E < E_N$ (lo que significa que $k_N^2 < 0$) en la ecuación completa (3.16). En este caso, en lugar de la ecuación (3.16) tenemos

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{d}{dR} - \left(k_N^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) \right] f_N(R) = \sum_n U_{Nn}(R) f_n. \quad (3.19)$$

Buscamos la solución de la ecuación (3.19) usando la función de Green $G_N(R, R', E)$, que por definición en [74] es la solución de la ecuación

$$\left[\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R} \frac{d}{dR} - \left(k_N^2 + \frac{m^2}{R^2} \right) \right] G_N(R, R', E) = \frac{1}{R} \delta(R - R'). \quad (3.20)$$

y, en consecuencia [73, 74]

$$G_N(R, R', E) = \begin{cases} -K_m(k_N R') I_m(k_N R), & R < R' \\ -I_m(k_N R') K_m(k_N R), & R > R' \end{cases} \quad (3.21)$$

Aquí K_m e I_m son las funciones de Bessel modificadas. Así, por definición de la función de Green

$$\begin{aligned} f_N(R) &= \int_0^\infty R' dR' G_N(R, R', E) \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R') = \\ &= -K_m(k_N R) \int_0^R R' dR' I_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R') \\ &= -I_m(k_N R) \int_R^\infty R' dR' K_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R') \end{aligned} \quad (3.22)$$

La última ecuación puede reescribirse en una forma más conveniente, análoga a (3.17)

$$f_N(R) = C_N J_m(k_N R) + S_N N_m(k_N R). \quad (3.23)$$

Donde

$$\begin{aligned} C_N(R) &= - \int_R^\infty R' dR' K_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R') \\ S_N(R) &= - \int_0^R R' dR' I_m(k_N R') \sum_n U_{Nn}(R') f_n(R') \end{aligned} \quad (3.24)$$

Después de diferenciar con respecto a la variable del límite superior (parámetro R), de (3.24) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{dC_N}{dR} &= R K_m(k_N R) \sum_n U_{Nn}(R) f_n(R) \\ \frac{dS_N}{dR} &= -R I_m(k_N R) \sum_n U_{Nn}(R) f_n(R) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Luego, sustituyendo (3.23) en (3.25) tenemos el sistema de ecuaciones diferenciales continuas que se pueden resolver numéricamente por el método Runge-Kutta de cuarto orden o alguno similar. Las suposiciones hechas son los siguientes: (i) el número de ecuaciones es finito, es decir, el número de subbandas cuantizadas por el espacio en nuestro pozo cuántico debe truncarse a un valor razonable (utilizamos 7 y 9 subbandas); (ii) el rango de integración sobre R está limitado a un valor R_{max} , tomado de consideraciones generales: la función de onda en R_{max}

debería ser despreciablemente pequeña (tomamos $R_{max} = 6a_B$); (iii) debe haber algunos valores iniciales para $C_N(R)$ y $S_N(R)$. De las propiedades de las funciones de Bessel modificadas se sigue que $C_N(\infty) = S_N(R_{max}) = S_N(0) = 0$ y podemos tomar la otra parte de las condiciones de frontera como $C_N(0) = S_N(R_{max}) = \delta_{Nn}$. Estas condiciones de frontera para $R = 0$ y $R = R_{max}$ solo se cumplen para valores discretos de E . Para encontrar dichos valores, podemos utilizar el método de disparo. Es decir, elegimos algunos R_0 ($0 < R_0 < R_{max}$) e integramos para todos los n de 0 a R_0 , obteniendo $C_{Nn}(R_{0+})$ y $S_{Nn}(R_{0+})$. De la misma manera integramos para todos los n desde R_{max} a R_0 , obteniendo $C_{Nn}(R_{0-})$ and $S_{Nn}(R_{0-})$. Usamos $R_0 = 3a_B$, ahora todos los valores de integración obtenidos en ambos lados deben igualarse entre sí y ya que las funciones son continuas, pueden escribirse como [73]:

$$\begin{aligned} \sum_n C_{Nn}(R_{0-})C_n(0) &= \sum_n C_{Nn}(R_{0+})S_n(R_{max}) \\ \sum_n S_{Nn}(R_{0-})C_n(0) &= \sum_n S_{Nn}(R_{0+})S_n(R_{max}) \end{aligned} \quad (3.26)$$

El sistema (3.26) es el sistema de ecuaciones algebraicas lineales con variables desconocidas $C_n(0)$ y $S_n(R_{max})$. Se resuelve si su determinante (que es la función de la energía) es igual a cero. En nuestro caso, el determinante es de orden 14 (para las 7 subbandas tenidas en cuenta) o de orden 18 (para 9 subbandas) y se obtiene solución numérica.

3.5 Método autoconsistente

El método autoconsistente 1D de Schrödinger-Poisson aplicado a las heteroestructuras 2D semiconductoras se utiliza ampliamente y se encuentra implementado en muchos software disponibles comercialmente. Sin embargo, hasta donde sabemos, todas esas implementaciones no implican la posibilidad de incluir el cálculo de IBE en el procedimiento autoconsistente, que es un punto crucial en nuestro caso. El IBE tiene un fuerte efecto sobre el grado de ionización, el cual es un factor clave para nuestra idea de controlar la frecuencia de funcionamiento del dispositivo óptico. Dentro de nuestro modelo y sus parámetros, la IBE tiene una fuerte influencia tanto para el potencial de Hartree como para la estructura electrónica y, en consecuencia, no se puede suponer que como constante durante del desarrollo de los cálculos. Por lo tanto, implementamos un procedimiento autoconsistente modificado que incluye el cálculo de IBE en cada iteración.

La variación del esquema clásico del método se presenta en la Figura 3.1. Incluye los siguientes pasos, descritos en las secciones anteriores. 1. Solución de la ecuación de Schrödinger en la que se usa el perfil del potencial como dato de entrada y entrega los niveles de energía de las subbandas y sus funciones de onda (Sección 3.1). 2. Solución de la ecuación de electroneutralidad para un perfil de energía dado, posiciones de subbandas y funciones de onda, lo que proporciona el nivel de Fermi y, en consecuencia, la distribución de carga (Sección 3.2). Normalmente este paso usa la IBE como una constante. 3. Solución de las ecuaciones de Poisson basados en la distribución de carga, lo que proporciona el potencial de Hartree que modifica el potencial de energía para el paso 1 (Sección 3.3).

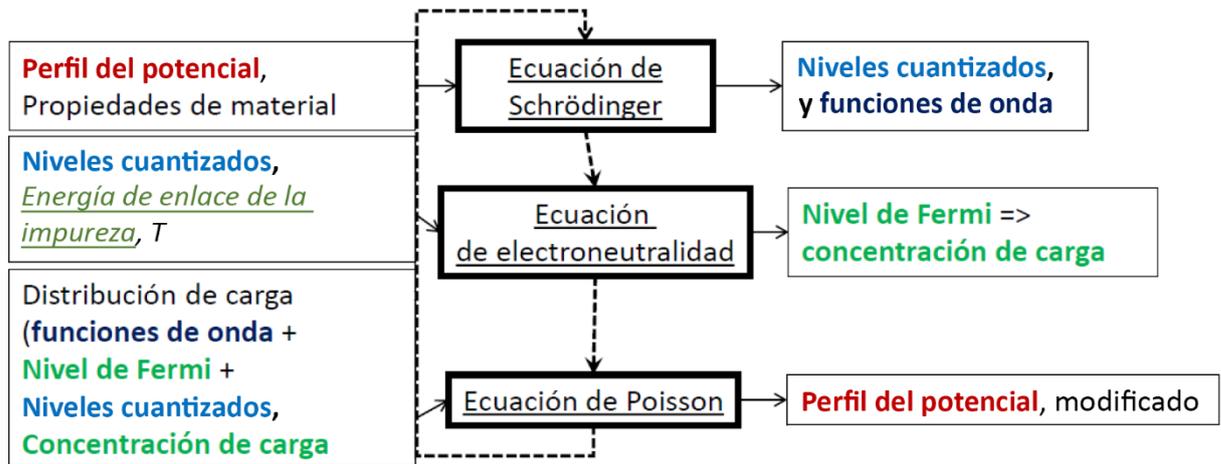


Fig 3.1. Esquema general del método Schrödinger-Poisson de cálculo autoconsistente para el problema 1D.

En nuestro método (Fig. 3.2) introdujimos el cálculo de IBE basados en las funciones de onda y las posiciones de energía de las subbandas (Sección 3.5). Como criterio de convergencia, asumimos la condición de que la diferencia entre IBE para las dos últimas iteraciones debe ser ≤ 0.1 meV.

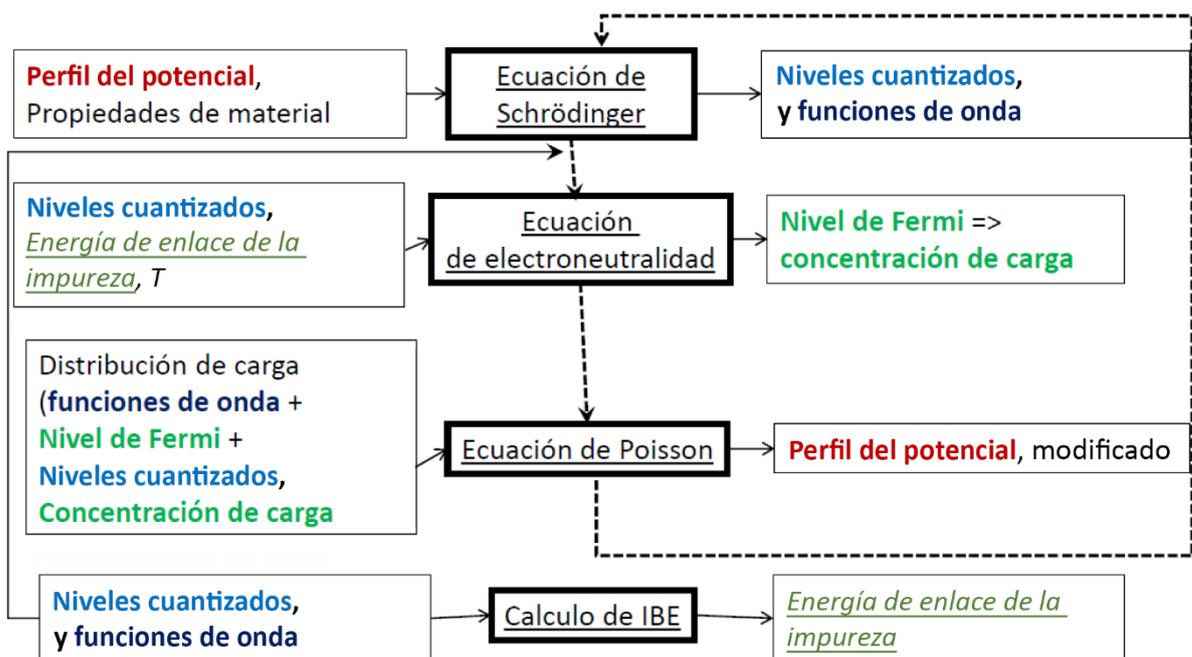


Fig. 3.2. Esquema general de nuestra modificación del método Schrödinger-Poisson de cálculo autoconsistente para el problema 1D.

3.6 Caso particular: impurezas de base

Cuando consideramos una configuración de un solo pozo e intentamos estimar la influencia de la impureza de base en las características de nuestra heteroestructura, el método cambia significativamente. A continuación, describimos las diferencias.

3.6.1 Nivel de Fermi y electroneutralidad

Para encontrar un perfil de energía del QW y las áreas circundantes, es necesario resolver la ecuación de Poisson para toda la estructura, incluido el QW. Sin embargo, al hacerlo, hay que conocer la posición del nivel de Fermi. En el caso de barreras infinitamente largas en ambos lados del QW, para las estimaciones de impurezas de base, es obvio suponer que la posición del nivel de Fermi en el equilibrio debe determinarse por las impurezas de base en las barreras. En este caso, se puede encontrar mediante la ecuación de electroneutralidad escrita para las áreas donde el perfil de energía de la banda de conducción es plano (situado más allá de $L/2+Z_0$ desde el centro de QW, Z_0 se explica a continuación):

$$N_0^- = N_b^+ + P_0 \quad (3.27)$$

Aquí N_0^- , N_b^+ y P_0 son las concentraciones volumétricas de electrones, centros de impurezas donadoras ionizadas y huecos, respectivamente. Dentro de la estadística de Fermi se encuentra:

$$N_0^- = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c \Phi_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_F - E_c}{kT} \right), \quad P_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_v \Phi_{\frac{1}{2}} \left(\frac{E_v - E_F}{kT} \right) \quad (3.28)$$

$$N_b^+ = \frac{N_b}{1 + 2 \exp \left(\frac{E_F - E_b}{kT} \right)} \quad (3.29)$$

Las fórmulas (3.28) son idénticas a las del libro [75], donde se pueden encontrar detalles. Solo mencionamos aquí que $\Phi_{1/2}$ es la integral de Fermi-Dirac definida en [75], E_c y E_v son los bordes de las bandas de conducción y valencia respectivamente, N_c y N_v son las densidades efectivas de los estados para las bandas de conducción y de valencia, respectivamente [75]. En la ecuación (3.29), N_b es la concentración total de impureza, E_F - energía de Fermi y E_b - la energía del estado fundamental de impureza de base. Para determinar la energía de Fermi a partir de (3.27) también se deben conocer los valores de la banda prohibida y la energía de enlace de impurezas en el $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$. Para el primer valor usamos 1.08 eV (a 77K), tomado de [76] y despreciamos su dependencia de la temperatura, ya que los cálculos mostraron que la posición de la energía de Fermi prácticamente no tenía influenciada del cambio de banda, correspondiente a un cambio de temperatura en el rango entre 4 y 300K. Esto no se refiere a la influencia de la temperatura sobre la posición del nivel de Fermi en la escala de energía. En cuanto a la energía de enlace de impurezas tomamos el valor $\varepsilon_b = 39\text{meV}$, que está cerca de 39.2meV, obtenido en el trabajo [77], y llevando a $E_b = E_c - \varepsilon_b$. Se ve de la ecuación. (3.27) que no consideramos semiconductores compensados ya que estamos interesados en verificar la influencia máxima de electrones adicionales (obtenidos de la ionización de la capa delta en el QW) en el QW sobre los fenómenos causados por la ionización de la capa delta. Obviamente, para el semiconductor compensado, el número de electrones adicionales (debido a las impurezas de base) será menor que para el no compensado.

Entonces, en este caso, usamos la ecuación de electroneutralidad 3.5 no para encontrar el nivel de Fermi, que se conoce de lo anterior, sino para calcular el ancho de la región de

agotamiento Z_0 (“depletion layer”, término de la teoría de la unión p-n, donde aparece un fenómeno análogo), que se utiliza como límite de integración en el cálculo del potencial de Hartree y en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger (ver Fig. 3.3). Suponemos que los electrones de la barrera caen al pozo, excepto los que están excitados por la temperatura. Por lo tanto, la carga se distribuye de manera no uniforme solamente dentro de la región del QW, incluidas las zonas de agotamiento, y considerando también la simetría de la estructura con respecto a $z = 0$, la condición de electroneutralidad para propósitos numéricos se establece de la siguiente manera:

$$\int_{z=-Z_0}^0 N^\pm(z) dz = 0 \quad (3.30)$$

La solución de esta ecuación nos da la longitud de la capa de agotamiento Z_0 .

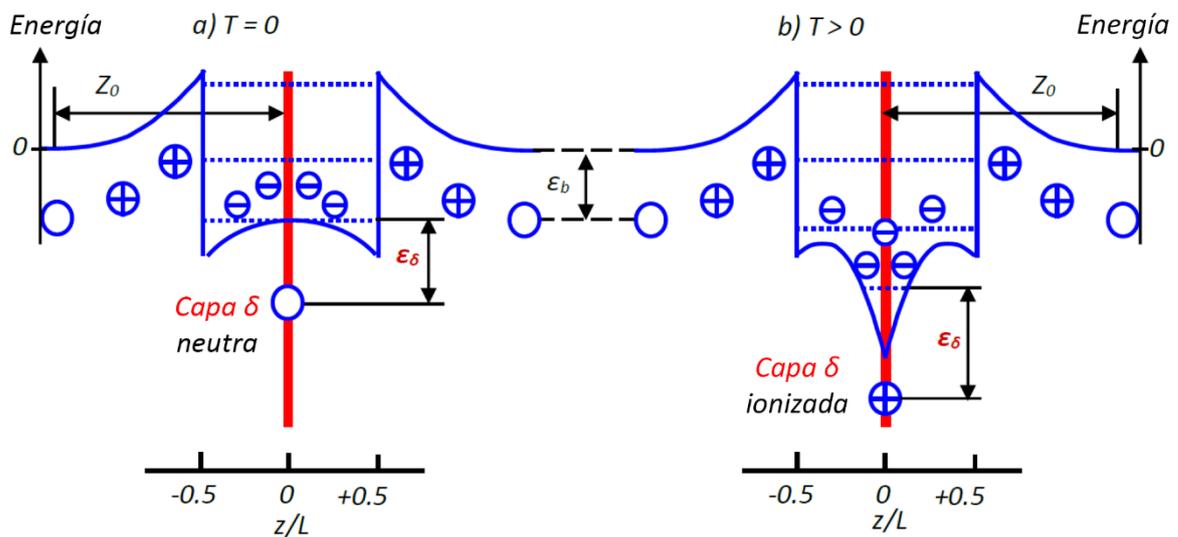


Fig. 3.3. Representación esquemática del QW delta dopado en el centro con impurezas residuales de concentración N_b en las barreras y a baja temperatura - a) y alta temperatura - b). Z_0 es la longitud de la capa de agotamiento (“depletion layer”), es decir, la distancia entre la heterounión y un punto donde la flexión de banda es cero. ϵ_b y ϵ_δ son las energías de enlace de la impureza de base y la impureza en la capa delta, respectivamente.

La ecuación para los donadores ionizados 3.7 ahora incluye no solo los que están en la capa delta $N_\delta^+(z)$, sino también los ubicados en las barreras $N_b^+(z)$:

$$N_D^+(z) = \begin{cases} N_b^+(z) = \frac{N_b}{1+2\exp\left(\frac{E_F-E_b-e\phi(z)}{kT}\right)}, & |z| > \frac{L}{2} \\ N_\delta^+(z) = \frac{N_\delta}{1+2\exp\left(\frac{E_F-E_\delta}{kT}\right)}, & |z| < \frac{L}{2} \\ 0 - \text{para lo demás casos} \end{cases} \quad (3.31)$$

Aquí usamos la siguiente suposición. (Despreciamos BI en el QW, ya que su contribución en el número total de electrones, incluso para su mayor concentración (10^{17} cm^{-3}) y total ionización (que hasta ahora no es así, como se verá en la Sección 4) es aproximadamente un orden de magnitud menor que el de la capa delta. Por consiguiente, esta contribución será proporcionalmente menor para concentraciones más bajas de impurezas de base.

La ecuación 3.8 para los electrones libres también cambia. Ahora incluye no solo 2DEG en las subbandas de pozos, sino también un gas de electrones en el continuo no confinado:

$$N^-(z) = N_{QW}(z) + N_{3D}(z). \quad (3.32)$$

Aquí la concentración de electrones N_{3D} es:

$$N_{3D}(z) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c \Phi_{1/2} \left(\frac{E_F - e\varphi(z) - E_c}{kT} \right), & |z| > L/2 \\ \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_c^* \Phi_{1/2} \left(\frac{E_F - E_m}{kT} \right), & |z| \leq \frac{L}{2}, T = 300K, m > 9 \\ 0, & |z| \leq \frac{L}{2}, T = 4 \text{ o } 77K \end{cases} \quad (3.33)$$

de acuerdo con (3.28), se debe dar una justificación sobre la segunda y tercera filas. Para la temperatura de $T = 300K$, consideramos que los niveles de energía situados por encima del nivel más alto E_m , $m=9$ (nuestro QW tiene 14 subbandas de niveles de energía) pueden estar ligeramente poblados con electrones y, al mismo tiempo, son casi resonantes con el continuo. Y la segunda línea en la ecuación (3.33) refleja esta situación. En otras palabras, significa que consideramos que el continuo está por encima del noveno nivel de energía y $N_c^* = N_c/3$ debido al hecho de que para el rango $z \leq L/2$ todavía hay 2 valles de la banda conducción en lugar de 6. Aquí subrayamos nuevamente que para encontrar la IBE usamos una precisión de 0.1 meV, los 9 niveles de energía son suficientes y consideramos la población de "niveles de energía" más altos solo para la solución correcta de la ecuación de Poisson en todo el rango de interés, desde $-Z_0$ a $+Z_0$. En cuanto a la tercera línea en la ecuación (3.33) solo podemos decir que para temperaturas bajas (4 y 77K), los electrones pueblan los niveles de energía más bajos y, por lo tanto, no hay razón para tenerlos en cuenta por encima del QW.

3.6.2 Modificación de algoritmo autoconsistente

Aquí debemos mencionar que el rango de integración en z dentro del método de disparo fue variable con una dependencia sobre la energía E . En el caso de energía negativa $E_j < 0$, la integración se inició desde $z = -Z_0$ y terminó 0. Para $E_j > 0$ los niveles de energía cuantizados correspondientes se convierten en los resonantes, lo que implica la posibilidad de que los electrones de estos niveles lleguen al infinito. En algunas publicaciones [78, 79] para abordar este problema, se utilizó el método de la caja cuántica [80]. Significa que para las energías $E_j > 0$, en principio, debemos resolver adicionalmente la ecuación de Schrödinger para un espacio libre en las distancias $-Z_0 < z < -t_j$ con la igualación de las funciones de onda y sus derivadas en los bordes correspondientes. Sin embargo, resolvemos la ecuación de Schrödinger solo para el QW y la capa de agotamiento, con el rango de integración para la WF desde $z = -t_j$ que proviene de la ecuación $e\varphi(-t_j) = E_j$ para asegurar que los límites de integración no estén dentro de la banda de conducción del continuo de la barrera. En cierto sentido, también es el mismo método de caja cuántica, pero el ancho de la caja depende de la energía. La objeción formal a nuestro enfoque podría ser el hecho de que los errores en la energía $E_j > 0$ de los niveles de energía cuantizados y sus correspondientes WFs $\xi_j(z)$ aumentan con el número del nivel de energía. Para rechazar esta crítica, podemos decir que tal situación ocurrió para $j = 6$ y 7 a una temperatura de 77K solamente y la longitud más baja $t_7 = 22\text{nm}$. Para Si (y también para $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$), la longitud de la barrera es lo suficientemente grande como para el efecto túnel a través de ella. Además, podemos hacer referencia a la publicación [65] en la que se afirmó que para longitudes de barrera (Si) mayores de 15 nm, el efecto túnel entre QWs vecinos podría despreciarse. Resultados similares para Si también se obtuvieron en el trabajo [81]. Finalmente, los resultados presentados en esta tesis verifican el enfoque utilizado. Nos gustaría enfatizar que la separación de energía entre cuatro valles superiores y dos inferiores es aún mayor que la diferencia entre los niveles de energía

superior e inferior tomados en cuenta: $\Delta_4 - \Delta_2 > E_9 - E_1$. Significa que no había necesidad de permitir valles superiores en nuestros cálculos.

El procedimiento autoconsistente es un proceso iterativo, que finalmente conduce a la obtención de la consistencia (dentro del complejo matemático de parámetros y cantidades del modelo, incluida la longitud de la zona de agotamiento Z_0 , las energías de subbanda QW E_j , las funciones de onda $\xi_j(z)$, y la energía de enlace de impurezas en la capa delta ε_δ). La especificidad del procedimiento utilizado es la siguiente: (i) tomamos el nivel de Fermi como fijo, (ii) incluye el cálculo de la energía de enlace de impurezas y (iii) usa Z_0 como parámetro variable. El valor inicial del ancho de la capa de agotamiento se tomó usando la conocida fórmula de la teoría de junturas

p-n): $Z_0 \approx \left(\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon V}{e^2 N_b} \right)^{\frac{1}{2}}$. Tenga en cuenta que el valor $V = 200\text{meV}$ (la profundidad del QW) proporciona el límite superior para Z_0 . La IBE en la capa delta se tomó inicialmente igual a la obtenida para la misma temperatura, pero sin tener en cuenta las impurezas residuales en las barreras [82]. Por razones de tipo numérico en la primera (y solo en la primera) iteración, los electrones por encima de las barreras en las capas de agotamiento se desprecian, es decir $N^-(z) = N_{QW}(z)$ en la ecuación (3.32). Además, la concentración de electrones en las subbandas del pozo cuántico para la primera (únicamente) iteración se tomó como igual a la carga positiva total en la región y la distribución de electrones dentro del QW se tomó como uniforme:

$$N_{QW}(z) = \begin{cases} 2 \left(\int_{z=-L/2}^0 N_b(z') dz' + n_\delta^+ \right) / L, & |z| < L/2 \\ 0, & |z| \geq L/2 \end{cases} \quad (3.34)$$

Primero se encuentra la energía de Fermi resolviendo (2) como se describe en la Sección 3.1 con respecto a la energía cero, que es el fondo de la banda de conducción en el bulk. Luego, el proceso iterativo se inicia de la siguiente manera:

1. El ancho de la capa Z_0 se encuentra numéricamente como la solución de la condición de electroneutralidad para la región del QW (3.30). Se realiza de forma autoconsistente con la solución de la ecuación de Schrödinger (3.2) de la siguiente manera:

Para encontrar el lado izquierdo de la ecuación (3.30), para un Z_0 dado, la ecuación de Poisson (3.10) se resuelve numéricamente con las condiciones de frontera $\varphi(-Z_0) = 0$ y $\frac{d\varphi(-Z_0)}{dz} = 0$.

Integramos de $z = -Z_0$ a $z=0$. Si es la primera iteración, en el punto $z = -L/2$, el proceso se detiene para evaluar la ecuación (3.33), que se usa para la integración después de $z = -L/2$. En las siguientes iteraciones se usa (3.34) en lugar de la (3.28) con energías de subbanda QW E_j y funciones de onda $\xi_j(z)$ obtenidas en la iteración anterior.

E_j y $\xi_j(z)$ se obtienen del paso anterior $\varphi(z)$, resolviendo la ecuación (3.2) con el método de disparo. Dependiendo del valor de la parte izquierda de la ecuación (3.33), para un Z_0 dado, se selecciona un nuevo Z_0 siguiendo el algoritmo de bisección. Luego se realizan los dos pasos anteriores hasta que el error de la concentración de carga de la ecuación (3.33) sea lo suficientemente pequeña (10^9cm^{-2}).

2. IBE en el nivel delta ε_δ se calcula tal como se describe en la sección 3.4 con la energía correspondiente a 0 del determinante de la ecuación (3.26).

3. Los pasos 1 y 2 se realizan de forma iterativa. El proceso se detiene cuando la diferencia entre las IBE de las dos últimas iteraciones sea lo suficientemente pequeña: $\varepsilon_\delta^k - \varepsilon_\delta^{k-1} \leq 0.1\text{meV}$. Para alcanzar la precisión establecida, generalmente fue necesario realizar 5 ... 7 iteraciones del ciclo externo para una temperatura de 300K y 3 ... 4 - para las temperaturas más

bajas que se utilizaron. El ciclo interno normalmente se realizó alrededor de 30 veces por cada iteración del ciclo externo.

3.7 Efectos ópticos lineales y no lineales basados en transiciones entre subbandas

Las partes lineal $\alpha_{ij}^{(1)}(\omega)$ y no lineal $\alpha_{ij}^{(3)}(\omega, I)$ del coeficiente de absorción para las transiciones entre la i -ésima y j -ésima subbanda se encontraron siguiendo [83] con referencia en [84]:

$$\alpha_{ij}^{(1)}(\omega) = \frac{\omega\mu_0 c}{n} |M_{ji}|^2 \frac{\sigma_{ij}\Gamma}{(E_{ji}-\hbar\omega)^2 + \Gamma^2} \alpha_{ij}^{(3)}(\omega, I) = -\frac{\omega\mu_0 I}{2n^2 \varepsilon \varepsilon_0} |M_{ji}|^2 \frac{\sigma_{ij}\Gamma}{\{(E_{ji}-\hbar\omega)^2 + \Gamma^2\}^2} \times \left[4|M_{ji}|^2 - \frac{|M_{jj}-M_{ii}|^2 \{(E_{ji}-\hbar\omega)^2 - \Gamma^2 + 2E_{ji}(E_{ji}-\hbar\omega)\}}{E_{ji}^2 - \Gamma^2} \right] \quad (3.35)$$

donde ω es la frecuencia angular del fotón incidente, ε - permitividad (11.7 para silicio), ε_0 - permitividad de vacío, μ_0 - permeabilidad de vacío, $n=\sqrt{\varepsilon}$ - índice de refracción del material (3.4926 para el silicio), E_i y E_j son los niveles de energía de las subbandas inicial y final de la transición, $E_{ji}=E_j-E_i$ - es la energía de transición, I - intensidad óptica de la onda electromagnética incidente (se tomó el mismo valor para todas las frecuencias, $I = 0.5 \text{ MW / cm}^2$, el cual es un valor razonable), $\Gamma = \hbar/\tau$ es el ancho del pico de absorción (tomado como $\Gamma = 2 \text{ meV}$ [85] para todas las transiciones por simplicidad), donde τ es el tiempo de relajación no radiativo entre subbandas. σ_{ij} es la diferencia de concentración entre las subbanda i -ésima y j -ésima,

$$\sigma_{ij} = \frac{m^* k_b T}{L \pi \hbar^2} \ln \left\{ \frac{1 + e^{(E_f - E_i)/k_b T}}{1 + e^{(E_f - E_j)/k_b T}} \right\}, \quad (3.36)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón, k_b - constante de Boltzmann, T temperatura, L - ancho del pozo cuántico.

El elemento de matriz de dipolo

$$M_{ab} = \int \xi_a^*(z) |e| z \xi_b(z) dz \quad (a, b = 1..N_s), \quad (3.37)$$

donde N_s es el número de subbandas más bajas que se tuvieron en cuenta, z es la coordenada a lo largo de la dirección de crecimiento de la estructura, e - carga unitaria, $\xi_a(z)$ y $\xi_b(z)$ - funciones de onda de las subbandas correspondientes. El número de subbandas tenidas en cuenta se escogió como $N_s=7$. Es lo suficientemente grande para proporcionar una precisión aceptable en los cálculos de la energía de enlace de impureza incorporada en nuestro método autoconsistente: la diferencia entre las energías de enlace de impureza que permiten 6 y 7 subbandas es menor a 0.1 meV. Además, la mayoría de los electrones libres en nuestras estructuras se distribuyen dentro de las primeras 7 subbandas, incluso para las temperaturas más altas, por lo que son suficientes para los efectos ópticos basados en la absorción de THz.

El coeficiente de absorción completo es

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I) \quad (3.38)$$

donde

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \sum_{i=1}^{N_s-1} \sum_{j=i+1}^{N_s} \alpha_{ij}^{(1)}(\omega) \quad \text{and} \quad \alpha^{(3)}(\omega, I) = \sum_{i=1}^{N_s-1} \sum_{j=i+1}^{N_s} \alpha_{ij}^{(3)}(\omega, I). \quad (3.39)$$

Cambios lineal $\frac{\Delta n_{ij}^{(1)}(\omega)}{n}$ y no lineal $\frac{\Delta n_{ij}^{(3)}(\omega, I)}{n}$ del índice de refracción proporcionado por las transiciones entre las subbandas i-ésima y j-ésima se calcularon como [83]:

$$\frac{\Delta n_{ij}^{(1)}(\omega)}{n} = \frac{1}{2n^2 \varepsilon \varepsilon_0} |M_{ji}|^2 \frac{\sigma_{ij}(E_{ji} - \hbar\omega)}{(E_{ji} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2} \quad (3.40)$$

$$\frac{\Delta n_{ij}^{(3)}(\omega, I)}{n} = -\frac{\mu_0 c I}{4n^3 \varepsilon \varepsilon_0} |M_{ji}|^2 \frac{\sigma_{ij}}{\{(E_{ji} - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2\}^2} \times \left[4(E_{ji} - \hbar\omega) |M_{ji}|^2 - \frac{(M_{jj} - M_{ii})^2}{E_{ji}^2 + \Gamma^2} \times \{(E_{ji} - \hbar\omega)[(E_{ji} - \hbar\omega)E_{ji} - \Gamma^2] - \Gamma^2[2E_{ji} - \hbar\omega]\} \right] \quad (3.41)$$

En consecuencia, el cambio completo del índice de refracción es

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n}, \quad (3.42)$$

donde

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n} = \sum_{i=1}^{N_s-1} \sum_{j=i+1}^{N_s} \frac{\Delta n_{ij}^{(1)}(\omega)}{n} \text{ and } \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n} = \sum_{i=1}^{N_s-1} \sum_{j=i+1}^{N_s} \frac{\Delta n_{ij}^{(3)}(\omega, I)}{n}. \quad (3.43)$$

Las funciones de onda de subbanda y los niveles de energía, así como el nivel de Fermi, se obtuvieron numéricamente utilizando la solución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger, Poisson y de electroneutralidad junto con el cálculo de la energía de enlace de impurezas como se describió anteriormente.

3.8 Efectos de muchos cuerpos

Para acercar nuestros resultados a la realidad, tenemos en cuenta el cambio de despolarización, según la fórmula [86, 87]

$$\tilde{E}_{ji}^2 = E_{ji}^2(1 + \gamma_{ji}) \quad (3.44)$$

Aquí $E_{ji}=E_j-E_i$ es la "antigua" energía de transición entre subbandas, resultante de la solución de la ecuación de Schrödinger, y \tilde{E}_{ji}^2 - la "nueva" energía de transición entre subbandas, que tienen en cuenta el cambio de despolarización . Se calculó como [86, 87]:

$$\gamma_{ji} = \frac{2e^2 \sigma_{ij}}{\varepsilon_0 \varepsilon E_{ji}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\int_{-\infty}^z \xi_i(z') \xi_j(z') dz' \right)^2, \quad (3.45)$$

donde $\varepsilon=11.7$ - constante dieléctrica del Si.

Si los efectos de intercambio de correlación no se pueden despreciar, la forma común de tenerlo en cuenta para los sistemas de gas de electrones bidimensional es añadiendo el término de correlación de intercambio dependiente de z en el Hamiltoniano.

$$V_{xc} = -\left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3} \frac{2}{\pi r_s} \left[1 + \frac{B}{A} r_s \ln\left(1 + \frac{A}{r_s}\right) \right] \frac{e^2}{8\pi \varepsilon \varepsilon_0 a_B} \quad (3.46)$$

$$r_s = \left[\frac{4\pi}{3} a_B^3 N(z) \right]^{-1/3} \quad (3.47)$$

Esta expresión fue obtenida por primera vez en [88] dentro de la teoría del funcional de la densidad de Kohn-Sham [89], utilizando el enfoque de la densidad local. A y B pueden tomarse en varios trabajos futuros.

Sin embargo, en este trabajo, la interacción de intercambio de correlación en general no se ha tenido en cuenta por las razones descritas en [66].

4 Resultados y discusión

4.1 Energías y funciones de onda

Para un QW dado, la magnitud y la posición en la escala de energía de los picos de absorción para las transiciones ópticas entre subbandas dependen de varios factores que discutiremos a continuación.

La separación de energía entre las subbandas, la concentración de impurezas y el nivel de ionización de impurezas se presentan en las Tablas 4.1 - 4.3. Inicialmente comparamos las energías de transición para el QW con el perfil de energía rectangular puro R y el propio QW con el potencial Hartree (en forma de V) R + H- vea la Tabla 4.1. Debe mencionarse que los cambios en las energías de transición debido al cambio de despolarización son casi los mismos para ambos perfiles de energía considerados. Por lo tanto, todos los cambios discutidos se deben a la aparición del potencial Hartree en el caso de QW delta dopados y suponemos que no hay cambios parecidos para el perfil de energía del QW rectangular puro en el rango de temperatura de 77 ... 300 K redondeados en 1 meV. Como se puede ver, solo las tres primeras energías de transición se muestran en esta tabla. Esto debido a que las otras energías no dependen prácticamente de la temperatura. También se observa que para el QW de 10 nm de ancho dopado en el centro no hay cambios en las energías de transición para la temperatura de 77 K, y el potencial de Hartree aumenta solo la separación de energía entre la primera y segunda subbandas a temperatura de 300 K. Aparecen cambios más notables para el QW de ancho 20 nm, particularmente para el caso del dopaje en los bordes a 300 K.

Aquí hay cambios importantes para las energías de transición 1-2 y 2-3. También es interesante comparar los cambios en los perfiles de energía R + H a diferentes temperaturas. La Tabla 4.1 nos indica que los cambios más dramáticos ocurren en el caso del QW más ancho con dopaje en el borde y a temperaturas más altas. Las energías de transición para diferentes concentraciones de impurezas de la capa delta se muestran en la Tabla 4.2. Se ve que un aumento de las energías de transición (siendo el más pronunciado nuevamente para las transiciones 1-2 que para el QW dopado en el borde) aumenta con la concentración de la capa delta. Pero debemos tener en cuenta que incluso para la mayor concentración de impurezas, el valor debe estar en el límite inferior de la transición del metal-semiconductor de Mott. También vale la pena señalar que el porcentaje de impurezas ionizadas disminuye con el aumento de la concentración de impurezas tal como se ve en la Tabla 4.3.

Tabla 4.1 Energías de transición i-j en meV para el QW dopado en el centro y en el borde con diferentes anchos L y a temperaturas T. Perfiles de energía: R - QW rectangular puro; R + H - QW con potencial rectangular y Hartree. Concentración de impurezas $n = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$.

Perfil de energía	T, K	Dopado en el centro						Dopado en el borde					
		L=10 nm			L=20 nm			L=10 nm			L=20 nm		
		1-2	2-3	3-4	1-2	2-3	3-4	1-2	2-3	3-4	1-2	2-3	3-4
R	77,300	11	17	24	3	5	7	11	17	24	3	5	7
R+H	77	11	17	24	4	5	7	11	15	26	7	5	7
R+H	300	15	17	25	12	7	7	18	17	24	20	12	7

Tabla 4.2 Energías de transición i-j en meV para el QW dopado en el centro y en el borde con diferentes concentraciones de impurezas n_d . Temperatura T = 300 K y ancho L = 20 nm. Perfiles de energía: R - QW rectangular puro; R + H - QW con potencial rectangular y Hartree.

Perfil de energía	$n_d, 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	Dopado en ell centro			Dopado en ell borde		
		1-2	2-3	3-4	1-2	2-3	3-4
R	6-24	3	5	7	3	5	7
R+H	6	8	5	7	15	9	6
	12	12	7	7	20	12	7
	24	17	7	8	26	14	9

Tabla 4.3 Grado de ionización $n_d^+/n_d, \%$ para el QW con ancho L = 20 nm con diferentes concentraciones de impurezas n_d , y temperaturas T

$n_d, 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	Dopado en ell centro		Dopado en ell borde	
	T=77K	T=300K	T=77K	T=300K
6	14	82	21	81
12	9	70	14	65
24	7	55	9	50

Elementos de matriciales. Los elementos matriciales (ME, por sus siglas en inglés) de transiciones ópticas entre niveles de energía QW vecinos con perfil de energía R + H son más sensibles a los cambios de temperatura que las separaciones de energía entre el mismo par de niveles. En la Tabla 4.4 se muestran los cuadrados de los ME para las primeras seis transiciones ópticas. Por ejemplo, los cambios notables entre los resultados obtenidos para los perfiles de energía R + H y R para el QW dopado en el borde, de 20 nm de ancho, son para las primeras cinco transiciones ópticas, mientras que las separaciones de energía solo cambian para las dos primeras; ver la Tabla 4.1. Tenga en cuenta que los ME para las transiciones 1-2 disminuyen con la temperatura para todos los casos considerados en la Tabla 4.4, con disminución más dramática, más que el orden de magnitud, para el QW más ancho, dopado en el borde y a temperatura de 300 K. Al mismo tiempo, los ME para las transiciones entre niveles de energía más altos en el caso de los QW dopados en el centro pueden ser mayores para los QW con potencial de Hartree que para los QW rectangulares puros. Obviamente, esto se debe a las diferentes simetrías de las funciones de onda y, en consecuencia, a la superposición de la parte en forma de V del perfil de energía en comparación con la del perfil rectangular; ver la Figura 4.1.

Tabla 4.4 Elementos de matriz al cuadrado (unidades de 10^{-18} m^2) entre los niveles de energía vecinos i-j, para diferentes anchos L del QW y temperatura T. Los QW están dopados en el centro y en los bordes con una concentración de impurezas $N_d = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Perfiles de energía: R - QW rectangular puro; E + H - QW con potencial rectangular y Hartree.

T, K	Perfil de energía	Dopado en el centro						Dopado en el borde					
		1-2	2-3	3-4	4-5	5-6	6-7	1-2	2-3	3-4	4-5	5-6	6-7
<i>L=10 nm</i>													
77,300	R	3.9	4.6	4.8	5.0	5.2	5.5	3.9	4.6	4.8	5.0	5.2	5.5
77	R+H	3.8	4.6	4.8	5.0	5.2	5.5	3.8	4.5	4.8	4.9	5.2	5.5
300	R+H	3.0	4.9	4.9	5.1	5.2	5.5	1.6	3.9	4.5	4.8	5.1	5.6
<i>L=20 nm</i>													
77,300	R	14	17	17	18	18	18	14	17	17	18	18	18
77	R+H	11	18	18	18	18	18	4	13	16	17	17	18
300	R+H	4	14	19	20	19	19	1.3	4	9	14	16	17

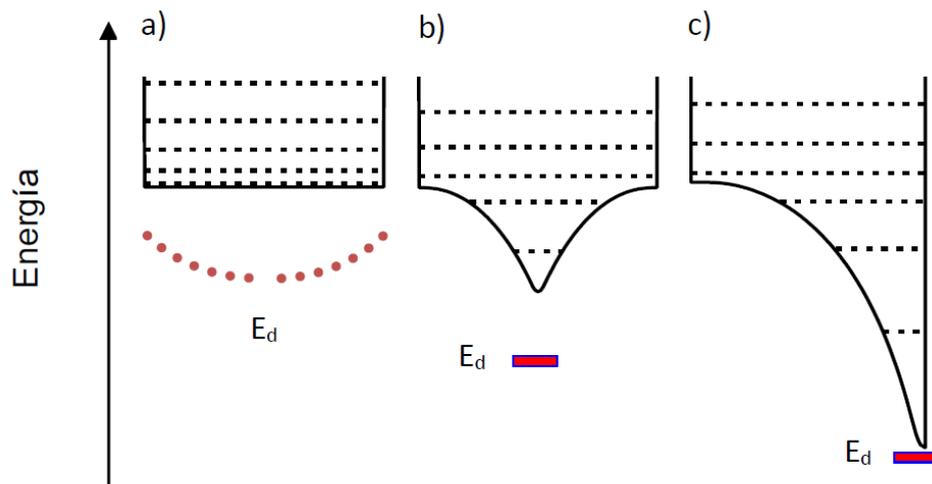


Fig.4.1. Representaciones esquemáticas de los perfiles de potenciales del QW (líneas continuas) con varios de los niveles más bajos cuantizados (líneas discontinuas) a temperatura de 4K - a), y a alta temperatura - b) y c). La línea punteada en a) muestra la dependencia de la energía E_d del estado fundamental del donador como función de la posición en el QW. E_d en b) y c) muestran lo mismo para el QW delta dopado en el centro y en el borde.

4.2 Cambios en el pico de absorción lineal. Estimación de rangos de sintonización

Es de interés ver que tan significativas son las diferencias en los coeficientes de absorción para los QW rectangulares y delta dopados. Por los resultados de la Tabla 4.1, los cambios más fuertes son para un QW ancho con una mayor concentración de impurezas y a una temperatura alta. Por eso juntamos las curvas de coeficientes de absorción para QW de 20 nm de ancho con una concentración de impurezas $n_d = 2.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, y a una temperatura $T = 300 \text{ K}$, para el QW puramente rectangular (R), y QW dopados en el borde (E) y al centro (C) en la Fig. 4.2. Las flechas horizontales acompañadas con letras mayúsculas R, C y E señalan las curvas de absorción para los QWs rectangular, dopado en el centro y en el borde, respectivamente. Para permitir una mejor visualización, mostramos con flechas verticales solo las transiciones 1-2 y 2-3 para todos los QW, y también la 1-3 para el caso del dopaje en el borde.

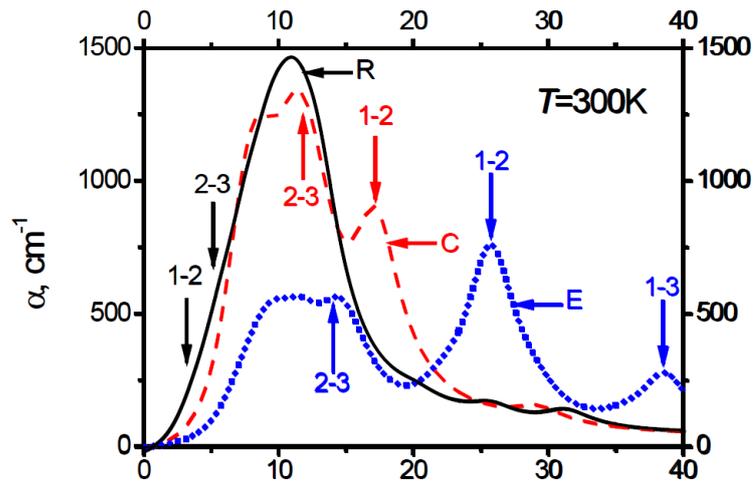


Fig. 4.2. Coeficientes de absorción para: R - QW puramente rectangular; C - QW dopado en el centro; E - QW dopado en el borde. Las flechas verticales muestran las transiciones ópticas entre las subbandas de energía 1-2, 2-3 y 1-3. Ancho del QW $L = 20$ nm. Concentración de impureza $N_d = 2.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Naturalmente, la energía de las transiciones vecinas aumenta con un número creciente de estados tomados para el QW rectangular. Pero no es así para el caso de QW delta dopados para (al menos) las pocas transiciones ópticas más bajas. Para el caso del dopaje central, el pico principal "rojo" tiene el máximo cerca de 10 meV, es casi el mismo que para QW rectangular con la única excepción de que la línea de absorción 2-3 tiene una energía de transición más grande que otras, como para las transiciones ópticas 3- 4, 4-5, 5-6 (no se muestran en la Fig. 4.2), y la mayor energía de transición es para la línea 1-2, lo cual es resultado de la ionización de la capa delta. El dopaje central no cambia la simetría de la estructura y, por lo tanto, las reglas de selección son idénticas para los casos de dopaje en el borde y central. La absorción para el dopaje en el borde difiere en gran medida tanto en la forma como en amplitud, al comparar con el dopaje central del QW rectangular y esto también es el resultado de la ionización de la capa delta. En primer lugar, se trata del corrimiento hacia azul de las líneas de absorción 1-2 y 2-3. Luego, la Tabla 4.4 nos dice que los elementos de matriz de todas las transiciones consideradas para el dopaje en el borde son más pequeñas que las del dopaje central y da como resultado picos "rojos" más pequeños para el QW dopado en los bordes. El dopaje en los bordes cambia la simetría del QW en la dirección z y, en consecuencia, rompe las reglas de selección en el sentido de que las transiciones como la 1-3, 1-5, 2-4, 2-6, etc., ahora son permitidas.

Ahora consideremos la influencia del grado de ionización de impurezas sobre los coeficientes de absorción tanto para los QW dopados en el centro como en el borde. Los resultados de los cálculos correspondientes se presentan en la Figura 4.3. Las flechas horizontales con una letra mayúscula al final, ya sea C o E, señalan curvas de absorción para QW dopados en el centro o dopados en el borde, respectivamente. Los grados de ionización para los casos considerados en la Figura 4.3 se encuentran en la Tabla 4.3. Inicialmente analizamos las características aparentes de las curvas mostradas. No hay sorpresa para las diferentes escalas en los paneles izquierdo y derecho, ya que está claro que el grado creciente de ionización de impurezas y, en consecuencia, el aumento del número de electrones en las subbandas inferiores, es seguido por el aumento de los coeficientes de absorción. Entonces se puede ver un comportamiento diferente de los coeficientes de absorción para los QW dopados en el borde y

en el centro para diferentes rangos espectrales de 77 K y 300 K. Tal comportamiento requiere una consideración más cuidadosa.

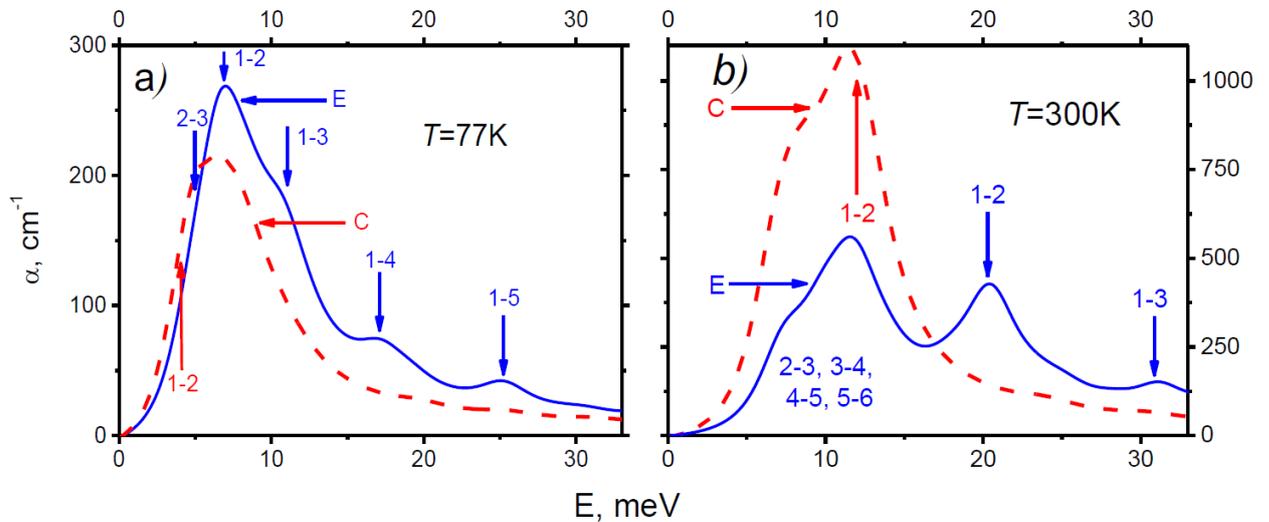


Fig.4.3. Coeficientes de absorción para los QW dopados en el centro (líneas discontinuas) y en el borde (líneas continuas) para temperaturas $T = 77\text{ K}$ - panel izquierdo y $T = 300\text{ K}$ - panel derecho. Ancho del QW $L = 20\text{ nm}$. Concentración total de impureza $N_d = 1.2 \times 10^{12}\text{ cm}^{-2}$. Las letras E y C denotan las transiciones ópticas para los QW dopados en el borde y dopados en el centro, respectivamente. Observe diferentes escalas verticales para los paneles izquierdo y derecho.

Se ve en el panel izquierdo que la absorción a $T = 77\text{ K}$ para el QW dopado en el centro es mayor que para el dopado en el borde para el extremo "rojo" del espectro hasta 5 meV, aunque el grado de ionización para el primer caso es menor, como se ve en la Tabla 4.3. Esto es porque para el QW dopado en el centro, la energía de transición más baja es de 4 meV, mientras que para el QW dopado en el borde es de 5 meV con las amplitudes de absorción para ambas transiciones aproximadamente iguales. Y a partir de los datos de la Tabla 4.1 se puede concluir que la energía de las transiciones vecinas se incrementa sucesivamente a partir de la transición 1-2 para el caso dopaje central, lo que está de acuerdo con el orden común para QWs rectangulares puros. Significa que la adición de forma V al QW rectangular es muy pequeña en este caso y solo aumenta ligeramente la energía de transición 1-2 en comparación con el QW rectangular puro. Pero en el caso del dopaje en el borde, la parte en forma V del QW es lo suficientemente alta y ahora el primer nivel de energía se encuentra dentro de la parte baja y estrecha del pozo. La energía de transición 1-2 aumenta considerablemente y es más grande que la energía de transición 2-3.

Todas las demás transiciones obedecen la regla mencionada con respecto a un aumento de energía para transiciones sucesivas y en ambos casos las transiciones más pronunciadas (2-3, 3-4, 4-5, 5-6) cubren el rango de energía 5-11 meV. Nuevamente es importante mencionar que el dopaje central no cambia las reglas de selección, pero el dopaje en los bordes rompe la simetría de la estructura y, por lo tanto, las transiciones prohibidas del QW rectangular puro como 1-3, 1-5 ahora son permitidas. En cuanto al panel derecho, podemos observar el hecho importante de que las transiciones 1-2 tienen las energías más grandes (ver también la Tabla 4.1), tanto para el dopaje en el borde como en el centro. Por lo tanto, las otras transiciones desde el primer nivel de energía también se desplazan hacia el azul con la temperatura; véanse, por ejemplo, las posiciones de las líneas 1-3 de absorción en curvas del dopaje en el borde para la figura 4.3 a y b. También vemos que la absorción para el dopaje central es considerablemente mayor que la del dopaje en el borde en el rango de baja energía y luego, aproximadamente a 17 meV, la situación

se invierte. La explicación es como en la sección anterior y se debe a que los elementos matriciales para las transiciones en estructuras bien dopadas en la parte de energía baja de la Fig. 4.3b son menores que los análogos para las transiciones en la estructura dopada en el centro - ver Tabla 4.4.

Para demostrar la influencia de la concentración de impurezas en la capa delta sobre la absorción entre subbandas, presentamos los resultados para QW dopados en el borde con diferentes concentraciones de impurezas en la Fig. 4.4. Los dígitos al lado de las flechas horizontales (y junto con estas flechas) indican las concentraciones de impurezas, para las cuales se calcularon las curvas, en unidades de 10^{11} cm^{-2} . Para tener mayor claridad en la figura, solo mostramos líneas de absorción para las transiciones 1-2 y 1-3. Al mismo tiempo, estas transiciones son las más afectadas por la concentración de impurezas. Debe mencionarse que todas las otras líneas de absorción son más o menos notables con estados de energía inicial más altos que las situadas a energías más bajas para cada una de las curvas de la Fig. 4.4. Ya hemos considerado las características de la absorción para los QW dopados en el borde con concentraciones de $12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $24 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$; revise la discusión de la Figura 4.2 y la Figura 4.3b. Por lo tanto, solo decimos que el aumento de la concentración de impurezas es seguido por el aumento de las energías de transición, en primer lugar, para las transiciones con el estado fundamental. Como característica adicional, podemos comentar el hecho de que incluso cuando todas las curvas se calcularon para una temperatura de 300 K, se observan diferentes grados de ionización de impurezas, como en la Tabla 4.3. Sin embargo, el número de donadores ionizados aumenta con la concentración de impurezas a la misma temperatura y es natural, ya que el potencial de Hartree depende del número de electrones e impurezas ionizadas y no del grado de ionización.

El efecto del ancho del QW sobre los coeficientes de absorción para los QW delta dopados se muestra en la Fig. 4.5. Se pueden observar las curvas de absorción para el QW estrecho (letra mayúscula N sobre la flecha horizontal) y ancho (letra mayúscula W sobre la flecha horizontal) con sus anchos $L = 10$ y 20 nm . Ambos QWs están dopados en los bordes con una concentración de fósforo $n_d = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Ya hemos discutido el caso del QW ancho a una temperatura $T = 77 \text{ K}$ - vea la explicación de la Fig. 4.3 para el QW dopado en el borde. Solo mencionamos aquí que las energías para las transiciones ópticas 3-4, 4-5, 5-6 se encuentran entre las flechas verticales 2-3 y 1-3 para la curva del pozo ancho. Por lo tanto, ahora nos concentramos en el QW estrecho. Vemos que todas las líneas de absorción se desplazan al lado azul en comparación con las análogas para un QW más ancho. Pero mucho más interesante es el hecho de que todas las líneas de absorción - 1-2, 2-3, 3-4 - están situadas en el orden correcto, como debe ser, mientras que para el QW más ancho, las líneas 1-2 y 2-3 están en el orden inverso, aunque los grados de ionización no difieren mucho. Son 14% para el QW de 20 nm y 12% para el QW de 10 nm . Nuestros cálculos muestran que se debe a que, en el caso de un pozo ancho, el primer nivel de energía está dentro de la parte estrecha de la forma V del QW, mientras que, en el caso de un pozo estrecho, el primer nivel todavía está en la parte rectangular del QW. Como resultado, la carga negativa de los primeros electrones de la subbanda del pozo ancho se localiza en la parte V del QW, más cerca de la capa delta cargada positivamente, lo que hace que el Hartree sea mucho más profundo que el análogo para el QW estrecho. Todo esto significa que las energías 1-2 son mayores que las energías 2-3 para un pozo ancho y viceversa para el estrecho. Por lo tanto, la estructura de energía del QW estrecho no está muy influenciada por la ionización de la capa delta.

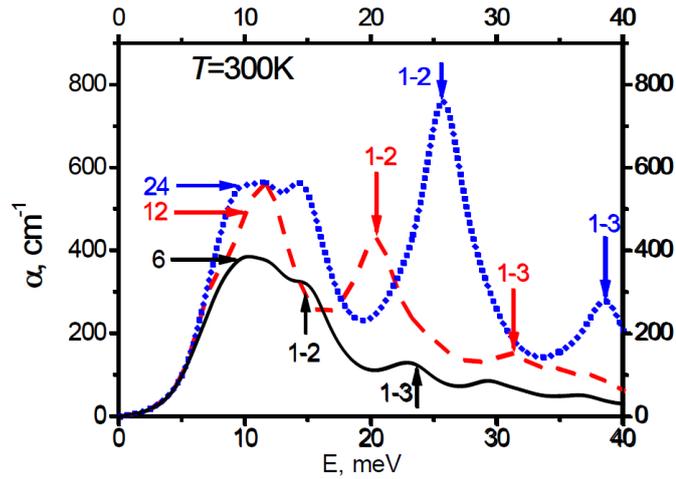


Fig. 4.4 Curvas de absorción para el QW dopado el borde con diferentes concentraciones de impurezas, que se muestran junto a las flechas horizontales en unidades de 10^{11}cm^{-2} . Las flechas verticales muestran transiciones ópticas. Ancho del QW $L = 20 \text{ nm}$.

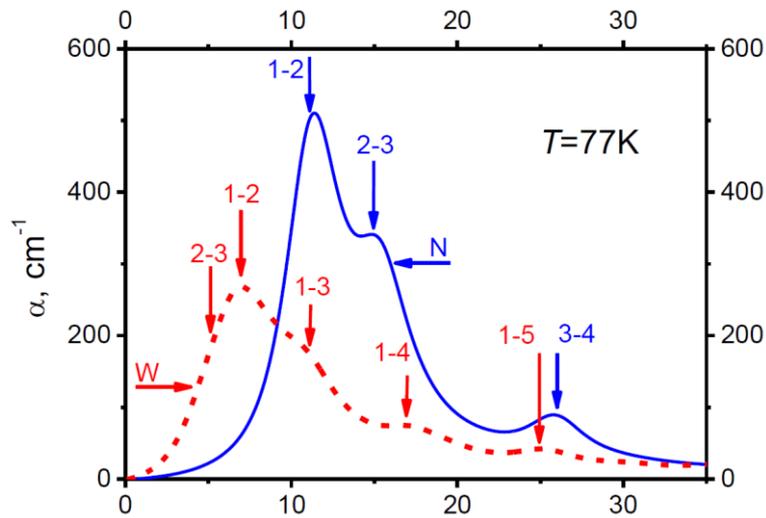


Fig. 4.5. Curvas de absorción. La letra mayúscula N y la letra mayúscula W, sobre las flechas horizontales, significa el QW estrecho y ancho, respectivamente. Anchos de los QW: $L = 10 \text{ nm}$ y $L = 20 \text{ nm}$ para las letras N y W, respectivamente. Las flechas verticales muestran unos picos de absorción específicas. Los grados de ionización son 12% y 14% para el QW estrecho y ancho, con la concentración total de impureza $N_d = 1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

4.3 Influencia de la no linealidad en la absorción y refracción

En la Fig. 4.6 se pueden ver los perfiles de la energía y las primeras 7 funciones de onda dibujadas a escala, dadas en las posiciones de energías de las subbandas correspondientes, para las dos estructuras consideradas (a - dopada en el centro y b - dopada en el borde) calculado autoconsistentemente como un ejemplo para el caso de $T = 300\text{K}$, que corresponde al caso de mayor deformación. Los valores clave calculados para las tres temperaturas (77K, 200K, 300K), es decir, niveles de subbandas, la energía de Fermi y el grado de ionización de impurezas n_{d+} se presentan en la Tabla 4.5.

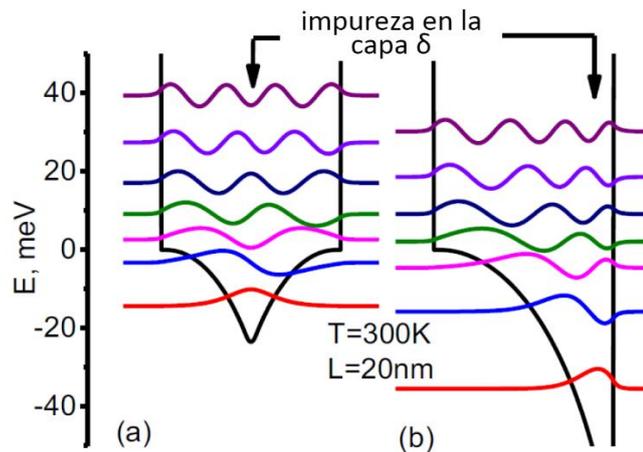


Fig. 4.6. Perfiles de energía y funciones de onda de los estados más bajos para nuestras estructuras a $T = 300\text{K}$.

Tabla 4.5 Energías de subbandas confinadas cuánticamente, nivel de Fermi E_f , energía de enlace de impureza E_D , grado de ionización n_d^+/n_d y densidad 2D de electrones libres n en nuestras estructuras dopadas en centro y en el borde para tres temperaturas diferentes. E_D y E_f se cuentan a partir de la primera energía de subbanda E_1 .

	Energía, meV									n_d^+/n_d %	$n, 10^{12}$ cm^{-2}
	E_f	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5	E_6	E_7	E_D		
<i>Centro</i>											
77K	-19.6	-0.7	3.1	7.6	14.3	22.6	33.0	45.2	-30	9	10.8
200K	-44.3	-9.2	-0.6	4.3	10.9	19.0	29.4	41.4	-32.6	50	60.0
300K	-72.4	-14.4	-3.3	2.6	9.1	17.1	27.4	39.4	-33.4	70	84.0
<i>Borde</i>											
77K	-15.0	-6.5	-0.3	4.1	10.4	18.7	28.9	41.0	-23.4	14	16.8
200K	-39.5	-26.0	-10.3	-1.8	4.1	11.6	21.3	33.2	-28.8	48	57.6
300K	-66.6	-35.5	-15.8	-4.6	2.1	9.1	18.6	30.2	-30.0	65	78.0

Se puede ver que el potencial de Hartree formado por la capa de impurezas ionizadas y los electrones en las subbandas forman un pozo adicional dentro de los QW, que de otro modo son rectangulares. Como resultado, las diferencias más notables entre dos perfiles desde el punto de vista de las propiedades ópticas son (1) un "pozo de Hartree" adicional más profundo en el caso de dopaje en el borde, que da como resultado un mayor valor de transición de la energía $1 > 2$, y (2) el pozo dopado en los bordes es asimétrico, lo que permite las transiciones entre subbandas de la misma paridad que, de lo contrario, las reglas de selección prohíben. Lo mismo ocurre (aunque en menor medida) para las temperaturas más bajas.

En nuestras estructuras, muchas transiciones contribuyen sobre todas las características calculadas y eso es especialmente importante para las temperaturas más altas.

Absorción lineal

Como se puede ver en la Figura 4.7, los valores máximos de absorción de la estructura dopada en el borde son mayores que para el caso dopado en el centro para $T = 77\text{K}$ y menores para las temperaturas más altas. Los valores máximos siguen la dinámica del grado de ionización de impurezas n_d^+/n_d que define el número de electrones libres en las subbandas n (ver Tabla 4.1). El cambio de población a su vez es causado (entre otros factores, por la estructura electrónica de

las subbandas y el cambio del nivel de Fermi) por el cambio de energía de enlace de impureza E_D que esencialmente crece con el aumento de la temperatura para el caso de dopaje en los bordes y suficientemente más bajo para el dopaje en el centro. Siguiendo los cambios en los niveles de energía de la subbanda (ver Tabla 4.1), el aumento de la temperatura conduce a un corrimiento hacia el azul porque el crecimiento de la ionización de la impureza hace que la transición de energía 1-> 2 y (en menor grado) 2-> 3 sea más grande en energía y, por lo tanto, se mueve todo el pico. En el caso de la estructura dopada en el borde, el cambio es especialmente grande y las transiciones entre las subbandas de la misma paridad con energías más altas también comienzan a contribuir a la absorción. Como resultado, la estructura absorbe más eficientemente a energías más altas. La primera subbanda se mueve hacia energías más bajas (ver Fig. 4.6), su población relativa crece, por lo que la absorción debido a las transiciones con el estado fundamental tienen una mayor intensidad. Por otro lado, la transición 1-> 2 en este caso tiene una energía particularmente alta y forma su propio pico pronunciado en $T = 300\text{K}$. Por lo tanto, se pueden ver dos picos de gran magnitud, el primer pico, alrededor de 12 meV está formado por las transiciones entre subbandas vecinas de mayor energía, mientras que el segundo es el resultado de una transición mejorada 1-> 2. Vale la pena notar que el pico de energía más bajo muestra una mayor intensidad en la absorción. La forma de los espectros también está influenciada por la dependencia energética de los elementos matriciales.

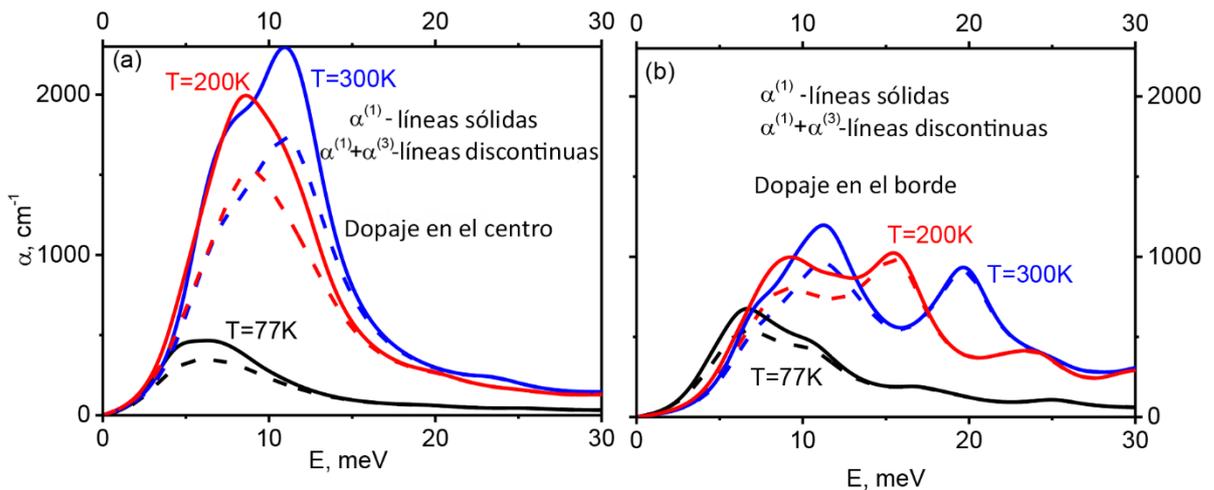


Fig. 4.7. Coeficiente de absorción de las estructuras QW dopadas en el centro (a) y en el borde (b) para las diferentes temperaturas. Líneas continuas - absorción lineal, líneas discontinuas - absorción total con parte no lineal tipo Kerr, intensidad láser $I = 0.5 \text{ MW} / \text{cm}^2$.

Absorción no lineal

La parte no lineal de la absorción en nuestro modelo (efecto Kerr) siempre es negativa y proporcional a la intensidad de la radiación incidente I y puede extrapolarse fácilmente a otros valores de I . Sin embargo, para nuestra intensidad de láser con valor medio de $0.5 \text{ MW} / \text{cm}^2$, su valor relativo es bastante grande (todavía no lo suficientemente grande como para formar un pozo en la cima del pico, como se informó, por ejemplo, en [90]) y para intensidades mayores, el modelo puede volverse inadecuado. En general, la absorción no lineal disminuye la parte lineal (ver Fig. 4.7): genera una disminución relativa más fuerte alrededor de los picos de absorción más grandes. Sin embargo, tenga en cuenta que el segundo pico de absorción (causado casi exclusivamente por la transición 1-> 2) para el caso de dopaje en los bordes a temperaturas más altas (Fig. 4.7 b) tiene una influencia muy pequeña de la no linealidad en comparación con el primer pico (causado por otras transiciones entre las subbandas más cercanas como la 2-> 3, 3-

> 4, etc.). La razón es que la no linealidad relativa para las transiciones entre subbandas más altas es mayor que para las transiciones entre subbandas más bajas (como la 1-> 2) incluso a pesar de la población más baja. También es la razón por la cual la parte relativa no lineal de la absorción para nuestras estructuras anchas es más grande que para los sistemas de dos niveles.

Cambios en el índice de refracción

A diferencia de la absorción, el cambio en el índice de refracción (ver Fig. 4.8) es relativamente pequeño y probablemente puede despreciarse en dispositivos ópticos. Inesperadamente, la parte no lineal del cambio del índice de refracción es comparable en orden de magnitud con la lineal. Sin embargo, como el cambio de refracción es en realidad la parte real de la susceptibilidad, siendo la absorción la imaginaria [84], aún se cumple la suposición de que la parte no lineal de la susceptibilidad es menor que la lineal. Así como las partes lineales y no lineales del cambio del índice de refracción tienen signos opuestos, la no linealidad efectivamente suprime el cambio total de la refracción alrededor de las posiciones máximas, limitándose así a un pequeño porcentaje, parece que toda la estructura compleja de las subbandas proporciona algunos saltos caóticos. Obviamente se pueden suavizar por completo en el caso de un mayor valor del ancho del pico.

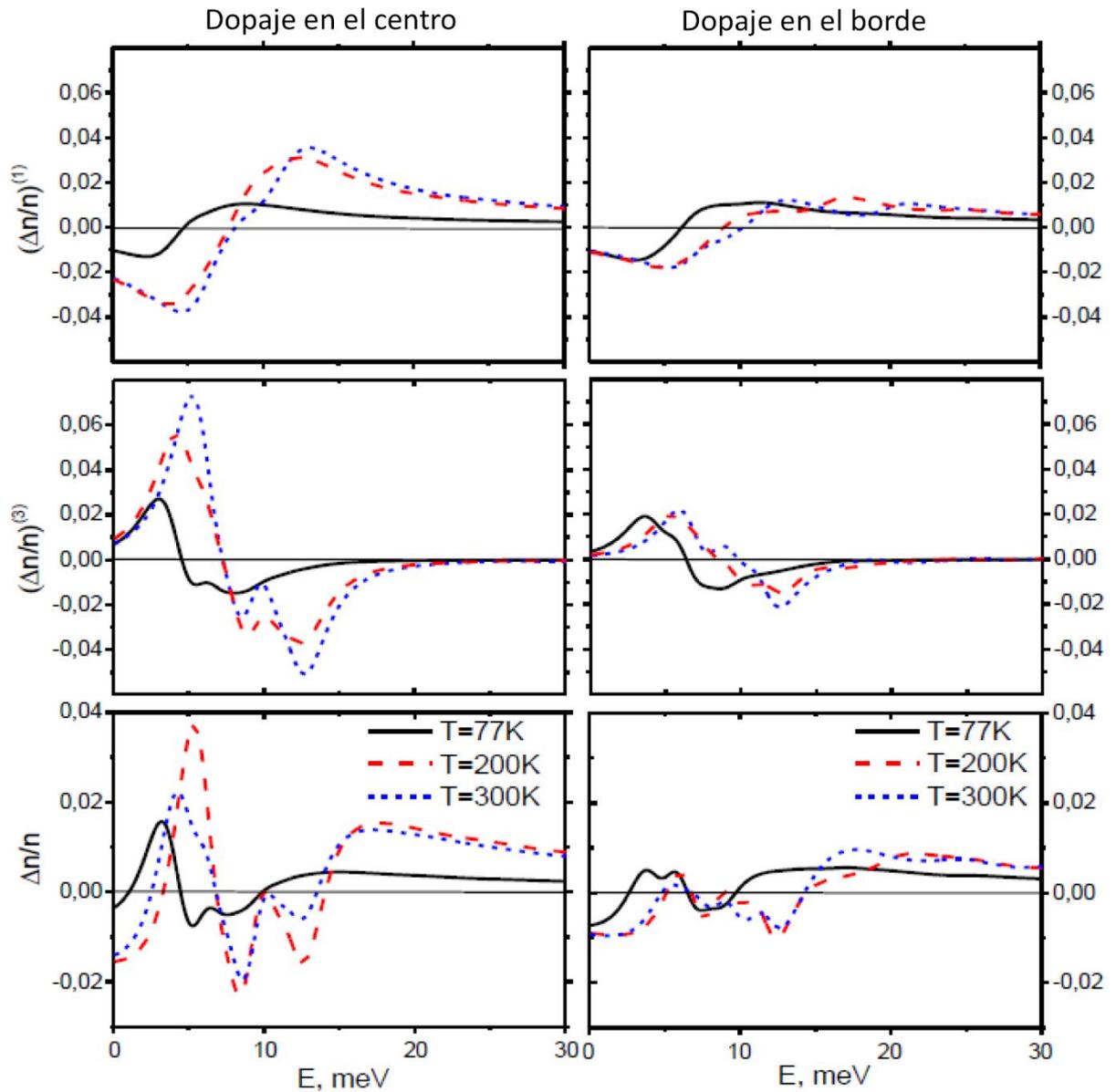


Fig. 4.8. Cambio en el índice de refracción relativo lineal, no lineal y total (de arriba a abajo) de las estructuras QW dopadas en el centro (columna izquierda) y en el borde (columna derecha) para las diferentes temperaturas.

4.4 Nuevo tipo de modulador THz

Uno de los parámetros más importantes de cualquier modulador, incluidos los THz, puede ser la relación entre la intensidad máxima I_{max} y la intensidad mínima I_{min} de la radiación que pasa a través del dispositivo. Según la ley de Beer, esta relación será proporcional a $\exp[(\alpha_{max} - \alpha_{min})l]$. Aquí l es la longitud óptica en el medio activo y α_{max} , α_{min} son los coeficientes de absorción máximo y mínimo a la misma frecuencia, respectivamente. Por lo tanto, revisemos los resultados de los cálculos desde este punto de vista. Se presentan en las Figs. 4.9, 4.10 para 10nm, y las Figs. 4.11, 4.12 para el QW de 20 nm de ancho. La influencia más fuerte del grado de ionización de impurezas en la transparencia de la estructura obviamente debería esperarse a bajas temperaturas, cuando sin el campo eléctrico todos los electrones van hacia los donadores y la

radiación de THz puede atravesar fácilmente la estructura. Pero también es obvio que, a mayor temperatura de funcionamiento de un dispositivo, la banda de la aplicación es más amplia para el dispositivo. Por lo tanto, hicimos cálculos tanto para 4K como para 77K. Para analizar las cifras hay que tener en cuenta lo siguiente: Primero, los QW de tipo n, considerados aquí, absorben solo la radiación polarizada a lo largo de la dirección de crecimiento de las estructuras. En segundo lugar, las impurezas son poco profundas y, por lo tanto, la temperatura de los electrones en el campo eléctrico prácticamente coincide con la temperatura de la red, por lo que la distribución de electrones sobre las subbandas está completamente determinada por la última. Tercero, para el más pequeño del QW, la separación entre niveles de energía adyacentes es considerablemente mayor que la del QW más ancho.

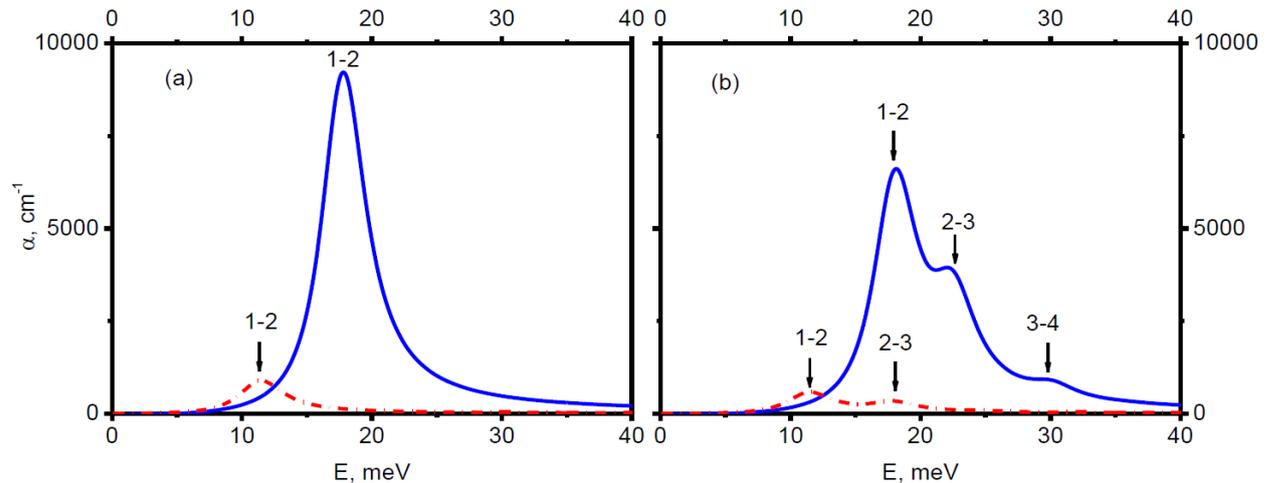


Fig. 4.9. Coeficientes de absorción para la estructura del QW de 10 nm de ancho dopada en el centro. Temperatura de electrones $T = 4\text{K}$ (a) y 77K (b). Grado de ionización: 6% y 61% para las curvas discontinuas y sólidas, respectivamente. También se muestran unos picos correspondientes a las transiciones ópticas entre subbandas.

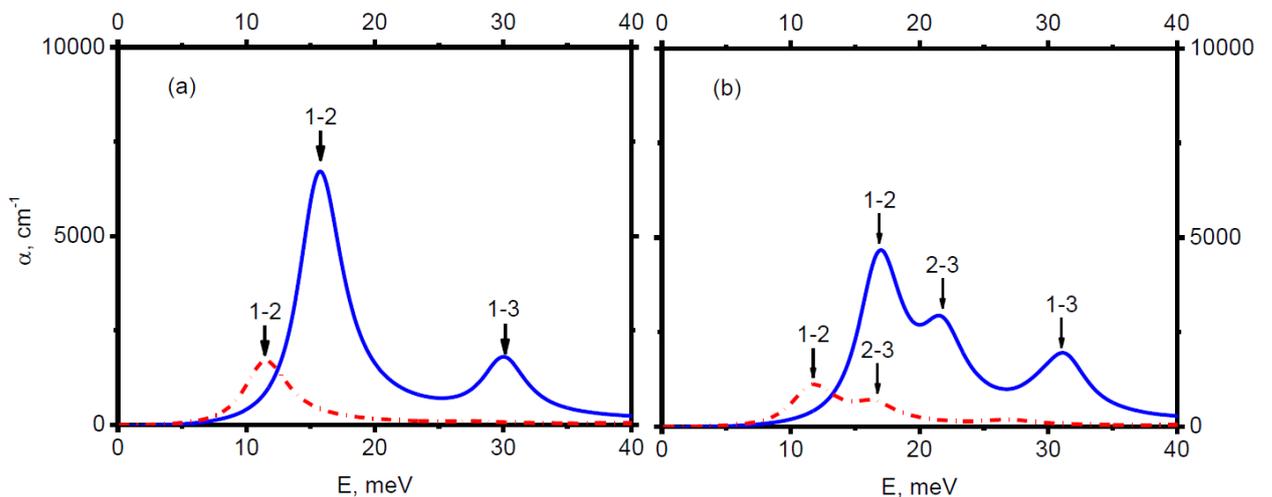


Fig. 4.10. Coeficientes de absorción para la estructura del QW de 10 nm de ancho dopada en el borde. Temperatura de electrones $T = 4\text{K}$ (a) y 77K (b). Grado de ionización: 63% para curvas sólidas y 12% para las curvas de puntos y guiones. También se muestran los picos correspondientes a las transiciones ópticas entre subbandas.

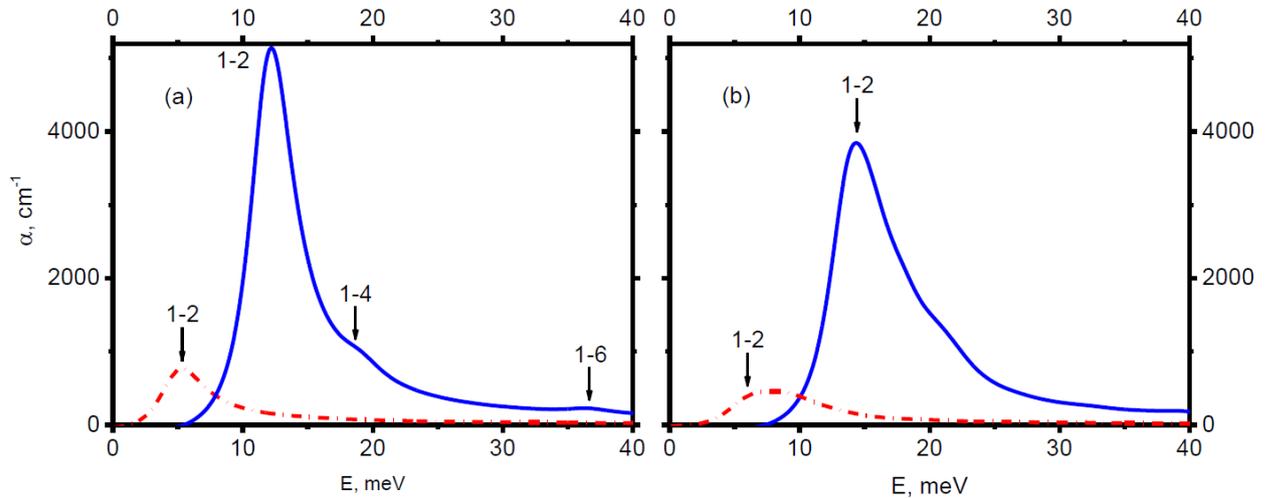


Figura 4.11. Coeficientes de absorción para la estructura del QW de 20 nm de ancho dopada en el centro. Temperatura de electrones $T = 4\text{K}$ (a) y 77K (b). Grado de ionización: 6% y 61% para las curvas de puntos y guiones y las curvas sólidas, respectivamente. También se muestran los picos correspondientes a algunas transiciones ópticas entre subbandas específicas.

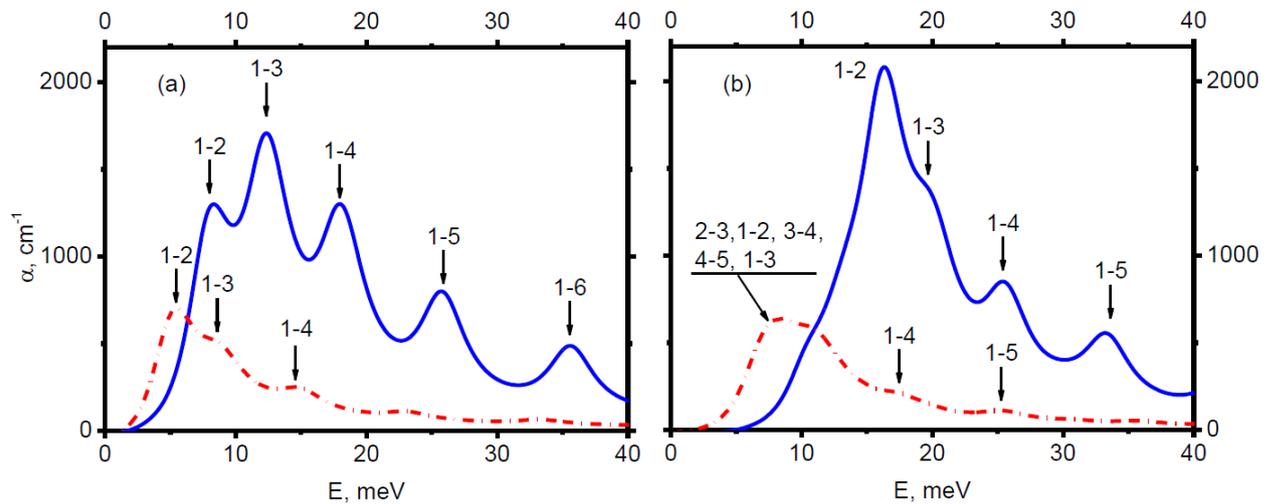


Figura 4.12. Coeficientes de absorción para la estructura del QW dopada en el borde de 20 nm de ancho. Temperatura de electrones $T_0 = 4\text{K}$ (a) y 77K (b). Grado de ionización: 14% y 65% para las curvas de puntos y guiones y curvas sólidas, respectivamente. También se muestran los picos correspondientes a algunas transiciones ópticas entre subbandas específicas.

En la Fig. 4.9 se presentan coeficientes de absorción para el QW de 10nm con dos grados de ionización de impurezas tanto para 4K como para 77K, para el caso de dopaje en el centro. Vemos que, de acuerdo con nuestras expectativas, la relación I_{max}/I_{min} es mayor para 4K, ya que aquí está la diferencia máxima en los coeficientes de absorción entre dos grados de ionización de impurezas. También tenemos que mencionar que el dopaje en el centro no cambia la simetría de la estructura y significa que las reglas de selección para las transiciones ópticas en un QW con la capa delta ionizada son las mismas que en el QW rectangular sin impurezas. En 4K, todos los electrones proporcionados por las impurezas ocupan la subbanda cuantizada más baja (1^o) y solo vemos el pico principal 1-2, mientras que a 77K, parte de los electrones también se encuentran en las subbandas excitadas, y por lo tanto las transiciones ópticas 2-3 e 3-4 también contribuyen a la absorción total. Como resultado, la línea de absorción máxima de 1-2 se vuelve más pequeña que para 4K.

Los resultados para el QW dopado en el borde se presentan en la figura 4.10. Aquí se puede ver que incluso a 4K (Fig. 4.10 a) la línea de absorción adicional 1-3 (al pico principal 1-2) está presente en el rango del espectro de interés. Esto se debe a que el dopaje delta en el borde rompe la simetría QW (ver Fig. 4.1) y las transiciones ópticas de QW simétrico no permitidas se vuelven permitidas en el QW dopado en el borde. Como consecuencia, el pico principal 1-2 ahora es más pequeño que en el caso del dopaje en el centro. El aumento de la temperatura (Fig. 4.10 b) con el mismo grado de ionización de impurezas que en la Fig. 4.10 implica la aparición de electrones en las subbandas cuantizadas de mayor energía. Resulta en un valor decreciente adicional del pico de absorción 1-2, y aparecen las transiciones ópticas 2-3, que vemos en la Fig. 4.10 b.

Los resultados presentados en las Figs. 4.11 y 12 para el QW de 20 nm de ancho son interesantes desde el punto de vista de compararlos con los correspondientes del QW de 10 nm. Se observa que en la figura 4.10 hay dos pequeños picos 1-4 y 1-6 adicionales para el mayor grado de ionización. Aparecen debido a la disminución en la separación de energía entre subbandas en el QW más ancho y esto también implica la disminución en el valor del pico principal 1-2. En cuanto a los picos de absorción que se muestran en la figura 4.10 a, podemos decir que algunas transiciones (1-2, 2-3, 3-4, 4-5) con energías cercanas hacen sus contribuciones a los picos principales para diferentes grados de ionizaciones de impurezas que dan como resultado un aumento del ancho medio de los picos. Para hacer más compleja la figura, mostramos las posiciones solo para las líneas de absorción 1-2, las cuales son las de mayor intensidad.

Ahora concentrémonos en la Fig. 4.11, donde se presentan resultados bastante inesperados, a pesar de que todo lo que se muestra en el panel izquierdo está en línea con nuestro análisis anterior con respecto a las Figs. 4.9-4.11. Es decir, todos los picos se deben a las transiciones ópticas solo desde el estado fundamental a todos los demás (incluida la misma paridad) niveles de energía cuantizados. Lo mismo también para el panel derecho, pero en este caso, para el mayor grado de ionización, vemos inesperadamente grandes cambios en todas las transiciones ($\sim 8\text{meV}$) en comparación con las mismas transiciones en el panel izquierdo, mientras que para un menor grado de ionización ese cambio es prácticamente el mismo (aproximadamente 2meV) al comparar con las Figs. 10-11. La explicación del hecho puede ser la siguiente: A baja temperatura (4K), los electrones libres ocupan solo la primera subbanda y la densidad de electrones se encuentra cerca del centro del pozo. Da como resultado un QW estrecho de forma V, lo que significa que el primer nivel es empujado hacia arriba en la escala de energía, hacia la región más amplia del QW deformada por el potencial de Hartree. De esto se deduce que la separación de energía entre 1° y todos los demás niveles de energía no es muy diferente sin la ionización de impurezas en el QW. A temperatura elevada (77K), los electrones libres pueblan varias subbandas y la densidad de electrones resultante se extiende más sobre el ancho del QW, lo que, a su vez, significa que el QW en forma de V se hace más ancho (pero aún más estrecho que la parte rectangular del QW) y ahora puede contener más niveles de energía con una mayor separación entre ellos. Hay una característica más del amplio espectro de absorción de la figura F.12, que merece mencionarse. Usando tal o similar estructura se hace posible la modulación simultánea de varias frecuencias en el rango de terahercios con aproximadamente la misma eficiencia. Como ejemplo, dos de estas líneas de absorción se muestran en la Fig. 4.12 mediante líneas de puntos.

En todas las Figs. 4.9-4.12 hay dos picos principales para dos grados de ionización de impurezas: bajo y considerablemente alto. Significa que el ajuste de la absorción de la estructura puede ejecutarse mediante un campo eléctrico considerablemente pequeño aplicado en el plano de la estructura en el rango correspondiente a la diferencia entre las posiciones de los picos en

la escala de energía. En la figura 4.13 mostramos ese rango de sintonización en unidades THz para demostrar esta posibilidad. Naturalmente, cada frecuencia en cualquiera de los casos presentados en esta figura tiene su propio valor de la relación I_{max}/I_{min} , pero dependiendo de la aplicación: se necesita el valor más alto de la relación o se requiere una banda amplia sintonizable o una modulación simultánea. El objetivo principal de algunas líneas THz es: es posible prever los requerimientos en el diseño de la estructura de QW. Y hay que tener en cuenta que también se puede lograr un ajuste adicional del campo eléctrico cambiando la temperatura como se describe en la referencia [91], o la temperatura se puede usar como un parámetro adicional para ajustar el posible dispositivo en las condiciones requeridas. En cuanto a la tasa de repetición del modulador, podemos decir que desde el punto de vista físico su valor máximo está determinado por la vida no radiactiva de los electrones en las subbandas excitadas y es inversamente proporcional al ancho del pico que usamos en nuestros cálculos: 2 meV. Y también tenemos que mencionar uno de los obstáculos que vemos en el camino para desarrollar el modulador THz propuesto. Puede haber inestabilidad, que surge a la temperatura del helio debido a la ruptura de impurezas en pequeños campos eléctricos [92]. Pero se puede evitar aplicando un pequeño campo magnético [93] o utilizando un campo eléctrico más alto. Y no vemos limitaciones similares a temperaturas elevadas (nitrógeno).

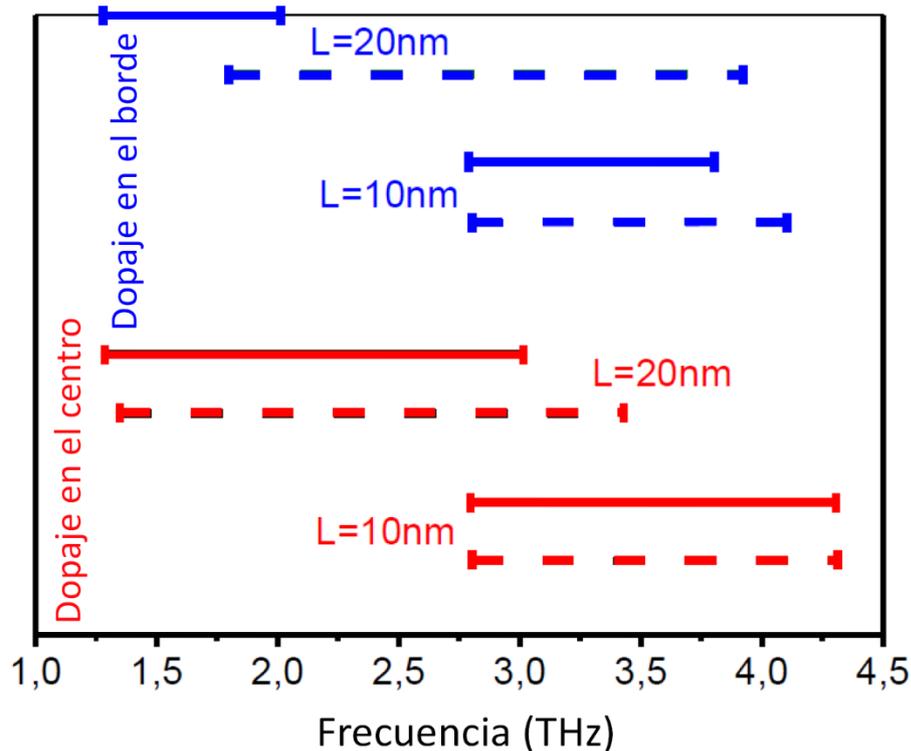


Fig. 4.13. Rango de ajuste para nuestras estructuras (desplazamiento de la posición del pico con un grado de ionización creciente) para los grados considerados de ionización de impurezas: líneas continuas - T = 4K, líneas discontinuas - T = 77K

4.5 Influencia del campo eléctrico transversal

La Fig. 3 en [53] muestra la IBE de la impureza como función del ancho del QW fabricados con el mismo material que el nuestro. Para verificar nuestro método, reproducimos esos resultados y los graficamos en la figura 4.14 para realizar la comparación. La energía de enlace

de impureza es para el caso de impurezas hidrógenicas no ionizadas colocadas exactamente en el centro del pozo. Los resultados muestran una buena correspondencia y coinciden entre sí para los anchos de pozo hasta aproximadamente 23 nm. Tenga en cuenta que en los casos límites de $L = 0$ y $L \rightarrow \infty$ el IBE debe corresponder al IBE en los materiales en bulk de la barrera del pozo correspondientemente. Para el caso límite $L = 0$, usamos una caja cuántica grande con paredes infinitas a la distancia de 10 nm de cada heterounión, mientras que para $L \rightarrow \infty$ para una buena convergencia, la expansión probablemente requiere más términos de los que usamos en nuestros cálculos. De todos modos, la comparación confirma que los resultados de IBE para los pozos más estrechos que 23 nm son confiables, por lo que podemos continuar de manera segura con un pozo de 20 nm de ancho.

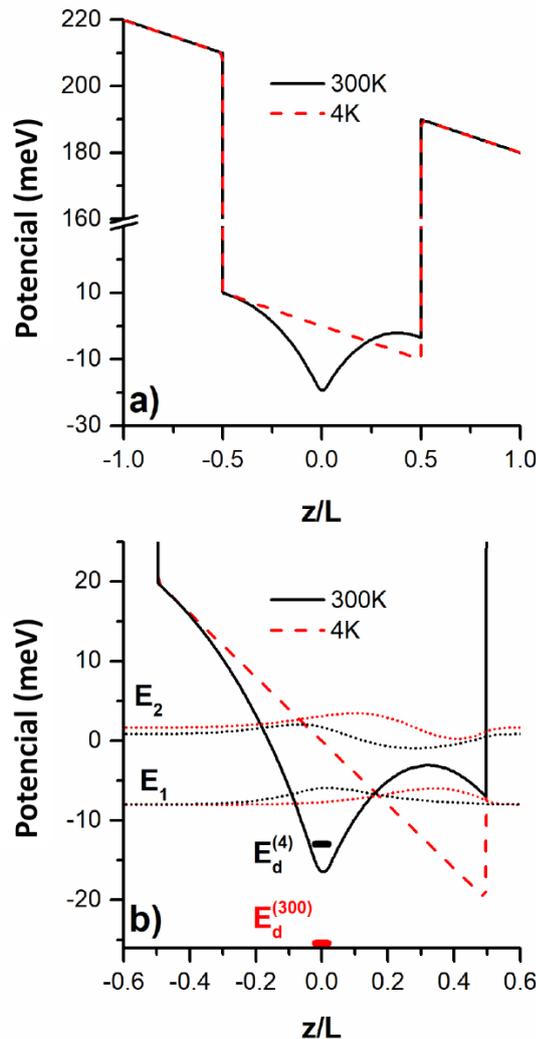


Fig. 4.14 Perfil de energía del pozo cuántico de 20 nm de ancho con capa delta de impureza en el centro con un campo eléctrico transversal $E = 20\text{kV/cm}$. Las líneas rojas corresponden al caso de $T = 4\text{K}$ sin impureza ionizada. Líneas negras - $T = 300\text{K}$, L es el ancho del pozo. (b) es la parte inferior del pozo con un zoom de (a) con posiciones de nivel de impureza añadidas y las primeras dos funciones de onda de las subbandas.

La Figura 4.15 proporciona una idea cualitativa y cuantitativa de lo que está sucediendo en nuestras estructuras. Se grafica el perfil de energía del pozo con campo eléctrico aplicado, así como los niveles de energía de las dos primeras subbandas cuantizadas E_1 y E_2 y la posición de

nivel de impureza E_d para el caso no ionizado ($T = 4K$) y altamente ionizado ($T = 300K$) con ubicación de la impureza en la capa delta en el centro. La separación de energía $\Delta E_{12} = E_2 - E_1$ es la más interesante para las transiciones ópticas y su diferencia para las diferentes temperaturas puede caracterizar el rango de sintonización. La energía de enlace de impureza E_δ es la distancia entre la primera subbanda y el nivel de impureza $E_\delta = E_1 - E_d$.

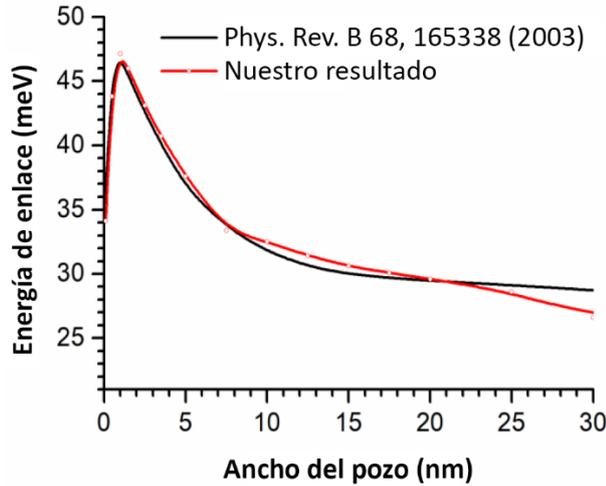


Fig. 4.15 Energía de enlace de impureza localizada en el centro del pozo cuántico $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}/\text{Si}/\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ en función del ancho del pozo. Comparación entre nuestros resultados (en rojo) y los resultados de la literatura.

La Tabla 4.6 representa los resultados para el caso de $L = 20$ nm, con la capa delta en el centro del pozo ($z_\delta = 0$) para las temperaturas 4K (sin ionización) y 300K (alta ionización) para las diferentes intensidades transversales del campo eléctrico. Allí se presentaron las separaciones de energía entre las subbandas vecinas para los primeros nueve estados, ya que sus funciones de onda se usaron en la expansión para calcular el IBE.

Tabla 4.6. Separación de energía entre subbandas y energías de enlace de impurezas con campo eléctrico transversal

T , K	E , kV/cm	ΔE_{12} , meV	ΔE_{23} , meV	ΔE_{34} , meV	ΔE_{45} , meV	ΔE_{56} , meV	ΔE_{67} , meV	ΔE_{78} , meV	ΔE_{89} , meV	E_d , meV
4	0	2,84	4,71	6,6	8,47	10,34	12,19	14,01	15,9	29,6
	10	6,12	5,46	6,51	8,39	10,34	12,25	14,13	15,97	26,35
	20	9,67	7,94	7,37	8,22	10,06	12,05	13,99	15,87	20,94
	50	17,78	14,56	12,87	11,77	11,17	11,56	13,13	15,16	9,93
300	0	11,09	5,83	6,53	7,97	10,36	11,96	14,09	15,73	33,86
	10	10,18	6,18	6,89	8,23	10,32	12,11	14,17	15,88	33,63
	20	8,81	7,27	7,7	8,66	10,05	12,1	14,02	15,86	33,35
	50	4,78	10,79	11,21	10,74	10,92	11,8	13,45	15,52	30,64

Analizando la separación entre las dos primeras subbandas, vemos que con un campo eléctrico creciente aumenta monótonamente y con un alto grado inclinación para el caso no ionizado de 2,84 a 17,78 meV y tiene un comportamiento bastante opuesto para el caso ionizado, donde disminuye de 11,09 a 4,78 meV. La interpretación la hacemos en términos de la concurrencia de los dos mini pozos que aparecen dentro del pozo cuántico original. Un mini pozo está formado por el potencial Hartree en el medio del pozo y crece con la temperatura y el grado

de ionización. El otro es resultado del campo eléctrico y se forma en el borde derecho del pozo (ver Fig.3.14). Este segundo mini pozo crece con el campo eléctrico. Ambos mini pozos, cuando se introducen en el pozo más grande, aumentan ΔE_{12} , por lo que cuando un mini pozo es dominante, la separación de energía es grande. Pero cuando los dos pozos son más o menos del mismo tamaño, se neutralizan entre sí y la distancia de energía ΔE_{12} es pequeña.

El análisis dinámico de las diferencias energéticas de la Tabla 4.6 confirma nuestras conclusiones. Los mini pozos tienen una fuerte influencia en la separación de energías de los primeros niveles cuantizados, por lo que las primeras separaciones varían mucho con el campo eléctrico y la temperatura, mientras que las diferencias de los niveles superiores demuestran mayor estabilidad.

Como consecuencia, si buscamos la condición de diseño para obtener un rango de ajuste más grande $|\Delta E_{12}|_{T=300K} - \Delta E_{12}|_{T=4K}|$, para nuestra estructura, podemos considerar campos eléctricos relativamente pequeños de unos pocos kV/cm (cuando ΔE_{12} aumenta con la temperatura) o campos eléctricos extremadamente altos del orden de 50 kV/cm, cuando ΔE_{12} disminuye.

Una conclusión más general aquí es que con la adición de campo eléctrico transversal, tenemos una posibilidad adicional de sintonizar un dispositivo óptico basado en las transiciones entre subbandas dentro de un pozo cuántico. El mecanismo de los dos mini pozos, uno formado por la capa delta, que puede ajustarse aumentando la temperatura de los electrones, y otro formado y regulado por un campo eléctrico transversal, hace que la sintonización de ese dispositivo sea aún más flexible.

En la Tabla 4.6 se puede ver que en el caso altamente ionizado el IBE no depende significativamente del campo eléctrico, mientras que en el caso no ionizado disminuye casi uniformemente con el campo, aproximadamente a la tercera parte, de 29.6 meV a 9.93 meV en $E = 50\text{kV/cm}$. Esto puede explicarse por el hecho de que, como se puede ver en la Figura 4.14 en presencia de un campo eléctrico transversal, el fondo real del pozo se mueve hacia el borde derecho del pozo y las posiciones de las subbandas descienden con respecto al centro del pozo, donde se encuentra la impureza. Además, si tenemos en cuenta el hecho (por ejemplo, de [53]) de que en el pozo cuántico puramente rectangular la IBE disminuye desde el centro hasta los bordes, podemos formular una regla empírica de que la IBE es más grande si coincide con el "centro de masa" de las funciones propias de los primeros términos de la expansión y más pequeña si se aleja de él. Por lo tanto, con el campo eléctrico, ese "centro de masa" se aleja de la impureza hacia el segundo mini pozo y la IBE disminuye. En el caso de 300K, el potencial de Hartree forma otro mini pozo alrededor de la capa delta, que equilibra la influencia del primer mini pozo incluso en el campo eléctrico fuerte, por lo que los efectos de los campos eléctricos son visibles solo a altas intensidades de campo y tienen un efecto limitado (la IBE disminuye de 33,86 meV a 30,64 meV para $E = 50\text{ kV/cm}$).

4.6 Influencia de la impureza de base

4.6.1 Transición al límite de QW rectangular no perturbado

Una de las principales preguntas a las que tenemos que responder es la fiabilidad de nuestro modelo y, en consecuencia, de los resultados obtenidos. No encontramos en la literatura ningún dato experimental con el que pudiéramos comparar directamente nuestros cálculos. Por lo tanto, son muy importantes los resultados teóricos obtenidos por otros grupos y, particularmente, en el trabajo [53], que estudia la misma estructura que la nuestra. Los autores de esa publicación

no consideraron la flexión de la banda y utilizaron otro método para la solución de la ecuación de Schrödinger (diagonalización completa del Hamiltoniano). Nuestros resultados para los QW dopados en el centro sin permitir el BI coincidieron exactamente con los del trabajo [53] para diferentes anchos de los QW. Además, la IBE en el caso del dopaje en los bordes es considerablemente menor que la del QW dopado en el centro, que también está en línea con los resultados de muchos otros autores [24, 40, 34, 49, 94]. Todo esto significa que podemos llegar a la conclusión de que nuestros datos para el caso sin impurezas de base pueden considerarse lo suficientemente confiables. Por lo tanto, la forma principal de verificar los resultados obtenidos al permitir los BI es rastrear la convergencia de los nuevos resultados con aquellos sin tener en cuenta las impurezas de base. Con este objetivo en mente, hicimos cálculos adicionales para un rango más bajo de concentraciones de impurezas de base a una temperatura de $T = 4\text{K}$, para los QW dopados tanto en el centro como en el borde. Esta temperatura es conveniente para tal verificación ya que las impurezas de una capa delta aún no están ionizadas y, por lo tanto, no generan un potencial adicional que influya en los perfiles de energía QW, que se muestran en la Figura 4.16 para un amplio rango de concentraciones de BI. Se ve claramente que, con la disminución de la concentración de BI, la forma del QW se aproxima a la rectangular, el resultado cualitativo que ha de obtenerse.

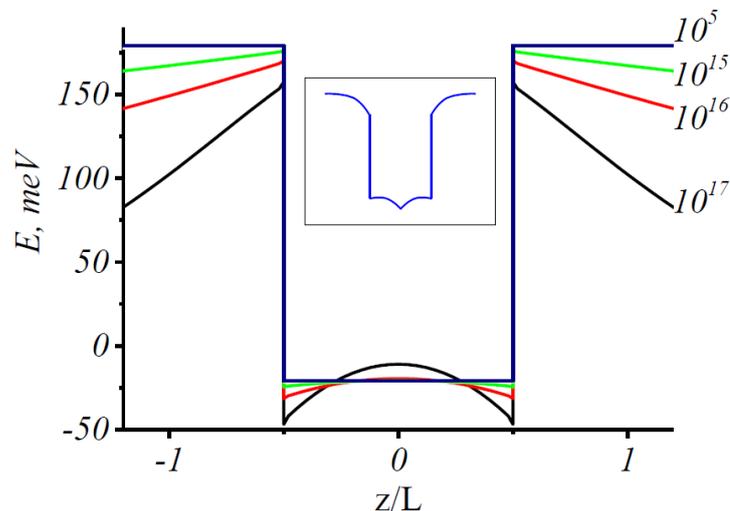


Fig. 4.16: Perfiles de energía del QW a $T = 4\text{K}$. Los números al lado de las curvas indican las concentraciones de impurezas de base por cm^{-3} . En el inset del centro de la figura, se muestra esquemáticamente el perfil de energía del QW para la concentración de 10^{12}cm^{-2} a temperatura de 300K .

Los resultados cuantitativos se muestran en la Tabla 4.7. Aquí los valores de las IBE (la separación entre el estado base de la subbanda y el estado base de la impureza) para las impurezas de una capa delta situada tanto en el centro (ϵ_{δ}^c) como en el borde (ϵ_{δ}^e) del QW, se presentan las separaciones entre pares vecinos de los primeros niveles de energía cuantizados y las concentraciones de electrones en la superficie de los QW (n_{QW}) para diferentes valores de BI. Tenga en cuenta que el IBE para un QW de silicio dopado en el centro de ancho considerable (20 nm) (29,6 meV) está muy cerca del (29.0meV) obtenido para el Si en bulk, en el marco de la teoría de masas efectiva mediante la técnica variacional [69], que también puede ser considerada como una prueba adicional de confiabilidad de nuestros resultados. Se puede ver que todos los valores en la Tabla 4.7 tienen sus límites en los valores correspondientes para un QW rectangular puro. Destacamos aquí nuevamente que una convergencia tan buena solo fue posible después de tener en cuenta los niveles de energía cuantizados con valor positivo. Por lo tanto, nuestro método de diferentes rangos de integración (ver parte 3.3) permitió obtener no solo los valores estables de

las IBE, sino que asegura la convergencia de los resultados en el límite de la ausencia de BI. La segunda observación es que la separación de energía entre los niveles vecinos son las mismas para los QW dopados en el borde y en el centro solo para $T = 4K$. Para temperaturas elevadas, cuando las impurezas de la capa delta se ionizan parcialmente los resultados son diferentes evidentemente. Ahora, después de verificar una buena convergencia de nuestros resultados con aquellos sin BI y también encontrados en la literatura, podemos comenzar a discutir en más detalle los datos reportados.

Tabla 4.7 Energías de enlace de impurezas en el centro (ϵ_{δ}^c) y en el borde (ϵ_{δ}^e) del QW, la concentración superficial de electrones en el QW (n_{QW}) y separación entre los niveles de energía vecinos (ΔE_{ij}), a diferentes concentraciones de impurezas de base N_b . $T = 4K$.

N_b, cm^{-3}	0	10^5	10^{12}	10^{15}	10^{16}	10^{17}
$\epsilon_{\delta}^c, \text{meV}$	29.6	29.5	29.5	28.9	28.1	25.6
$\epsilon_{\delta}^e, \text{meV}$	17.0	17.0	17.7	19.7	22.3	26.5
$\Delta E_{21}, \text{meV}$	2.9	2.9	2.8	2.1	1.4	0.4
$\Delta E_{32}, \text{meV}$	4.7	4.7	4.8	4.7	4.8	5.9
$\Delta E_{43}, \text{meV}$	6.7	6.7	6.7	6.6	6.6	6.0
n_{QW}, cm^{-2}	0	10^6	1.2×10^8	1.0×10^{11}	3.2×10^{11}	8.6×10^{11}

4.6.2 Resultados a temperatura de 4K

Analicemos primero las IBE. A partir de los datos de la Tabla 4.7, se pueden destacar los resultados para la mayor concentración de impurezas de base, que se muestran en la última columna: el IBE para el caso de dopaje en el borde es mayor que para el QW dopado en el centro. Esto contradice fuertemente los resultados análogos obtenidos sin BI y presentados en la primera columna de la Tabla 4.7. Ya hemos mencionado anteriormente que, para el caso de impureza en el borde, la IBE es considerablemente menor que para la impureza en el centro del QW, lo cual es confirmado en numerosas publicaciones. La disminución en la concentración de BI conlleva a un comportamiento diferente: la IBE para el dopaje en el centro aumenta mientras que para el dopaje en el borde disminuye y finalmente llega a su relación ordinaria. Por lo tanto, tenemos un resultado poco común, lo que contradice lo descrito en esos artículos. Para comprender este comportamiento extraordinario, colocamos los perfiles de energía, los primeros niveles de energía cuantizados con sus funciones de onda y los estados de impureza de base para diferentes concentraciones de BI en la Figura 4.17. En la figura, el cero de energía corresponde al fondo de la banda de conducción, muy lejos de la región de agotamiento. Vemos que el comportamiento de las WF con el aumento de la concentración de BI es típico (véase, por ejemplo, [95]), la WF del estado fundamental de dos QW acoplados con una distancia creciente entre ellos. Estos dos QW adicionales tienen forma de bolsillo cerca de cada una de las interfaces, que se hicieron más y más profundas, situadas entre sí con una concentración creciente de BI [96, 97]. Sin embargo, es necesario tener en cuenta que una imagen similar se había obtenido por primera vez en el trabajo [98], pero sin mayor discusión y, por lo tanto, lo hacemos ahora. Debido a que todos los donadores de la capa delta a esta temperatura son neutros, cada curva en esta figura es la misma

para ambas concentraciones de impurezas en la capa delta utilizada: $n_\delta = 0.6 \times$, y $1.2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Aquí, naturalmente, suponemos que la función de onda del primer nivel cuantizado tiene la mayor contribución en la formación de la función de sobre el estado de impureza de base y en el valor de IBE (aunque para obtener el valor exacto fue necesario tener en cuenta al menos 7 de tales niveles).

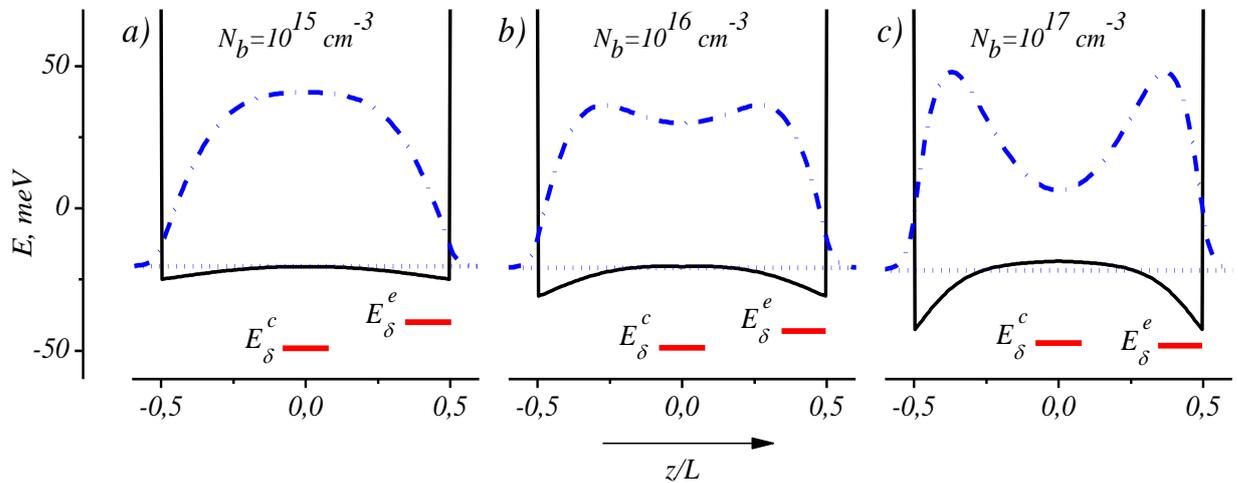


Fig. 4.17 Perfiles de energía (líneas negras continuas), niveles de energía el estado fundamental y sus funciones de onda (líneas punteadas azules y punteadas con puntos, respectivamente) y estados de impureza de base para los QWs dopados en el centro y en los bordes (líneas continuas rojas) para las diferentes concentraciones de impureza de base. Temperatura $T = 4\text{K}$. A esta temperatura, cada curva es la misma para ambas concentraciones utilizadas de donadores en la capa delta: $n_\delta = 0.6 \times$, y $1.2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Todas las funciones de onda están en la misma escala. El cero de energía está en la parte inferior de la banda de conducción con barreras muy alejadas de las capas de agotamiento.

En la Figura 4.17 se ve claramente que los "centros de gravedad" para los electrones en el estado fundamental se desplazan hacia las barreras con concentraciones crecientes de impurezas de base. Significa que la interacción de Coulomb con la impureza en el centro del QW disminuye, lo que se refleja en la disminución de la IBE. Para el dopaje en el borde, la situación es contraria: cambiar la densidad de electrones con una concentración creciente de impurezas de base hacia la interfaz implica disminuir la distancia entre el átomo de impureza y el electrón libre, seguido de un aumento en la IBE.

Ahora consideramos las separaciones entre los niveles de energía vecinos. Los datos de la Tabla 4.7 nos dicen que cuando todavía no hay una estructura tipo bolsillo cerca de las interfaces, los BI no los afectan significativamente en el rango de concentración de BI $10^5 \dots 10^{15} \text{cm}^{-3}$. Vemos un aumento monótono en la separación de energía con un número creciente de niveles para cada concentración en este rango y dicho comportamiento es inherente a cualquier QW rectangular. La excepción solo se ve claramente para la concentración de BI igual a 10^{17}cm^{-3} ; queremos decir una diferencia enormemente pequeña ΔE_{12} y una diferencia considerablemente grande ΔE_{23} . Esto puede explicarse por el hecho de que los niveles 2 y 3 tienen un origen diferente. El nivel 2 es generado por uno de los QW estrechos cerca de las heterointerfaces y el nivel 3 es producido principalmente por toda la parte (rectangular) del QW. Y tan pequeña diferencia $\Delta E_{21} = 0.4 \text{meV}$ a esta concentración de BI es el resultado de eliminar la degeneración de los niveles de energía en dos QW idénticos y acoplados cerca de cada interfaz de un gran QW "rectangular" como se muestra en la Fig. 4.17c. El análisis de los datos sobre la concentración de 10^{16}cm^{-3} revela que el segundo nivel de energía se origina principalmente en

los “bolsillos” cuánticos y esto significa que lo mismo debe decirse sobre esta concentración, es decir, los niveles uno y dos son el resultado de la degeneración de elevación en dos QW idénticos acoplados. Para la concentración de BI 10^{15} cm^{-3} , el primer nivel de energía cuantizado no cruza el fondo del QW y esto significa que está formado principalmente por la parte rectangular del QW.

Los datos sobre las concentraciones de electrones en el QW (última línea en la Tabla 4.7) demuestran el hecho bien conocido de que las impurezas en las barreras (residuales o especialmente agregadas, por ejemplo, como el caso de la capa delta [21]) controlan el número de electrones en el QW y, por lo tanto, la absorción entre subbandas en el QW incluso a temperatura del helio.

4.6.3 Temperaturas elevadas. IBEs y concentración de electrones en el QW

Ahora dirigimos nuestra atención a los resultados con donadores (parcialmente) ionizados en la capa delta, que se presentan en la Tabla 4.8. Se pueden observar los resultados sobre las energías de enlace ε_δ (ahora solo para el QW dopado en el centro), la densidad de electrones en el QW n_{QW} , la densidad de los donadores ionizados de la capa delta n_δ^+ , que es igual a la densidad de electrones liberados de los donadores ionizados de la capa delta, así como las posiciones del nivel de Fermi a diferentes concentraciones de impurezas de base N_b y a temperaturas de 77 y 300K para dos concentraciones diferentes de impurezas en la capa delta n_δ . Tenga en cuenta que el nivel de Fermi a cada temperatura y para cada concentración de donadores de base es el mismo para ambas concentraciones estudiadas de impurezas n_δ en la capa delta. Esto se debe a que está controlado por las impurezas de base situadas lejos de las interfaces.

Las posiciones del nivel de Fermi para el caso marcado con asterisco * se determinaron a partir de otra ecuación de electroneutralidad, sin permitir BI. La Figura 4.18 nos ayudará a hacer análisis sobre los datos de esta tabla. Aquí los perfiles de energía del QW en varias condiciones estudiadas y con la misma escala de energía se muestran en la parte superior (Fig. 4.18 a, b y c) de esta figura. (El caso de una concentración de BI tan baja como 10^{12} cm^{-3} se discutirá por separado a continuación). Más exactamente, como en la Fig. 4.17, incluimos solo los perfiles de energía del fondo de los pozos cuánticos, ya que solo la forma del fondo influye en gran medida la estructura de los primeros niveles cuantizados y, por lo tanto, los estados de impureza de la capa delta, que son el objetivo de nuestra investigación.

Por una mayor claridad y para comparar los resultados obtenidos con diferentes concentraciones de BI y a diferentes temperaturas (77 y 300 K), hicimos cambios para que las diferencias en los fondos de los perfiles de energía se vieran claramente. La escala de energía de la izquierda es solo para estimar los cambios en las formas de los fondos. El cero de la escala se coloca en la posición de los primeros niveles (E_1 - líneas azules horizontales y sólidas) para toda la concentración de BI a una temperatura de 300K, para la mayor concentración de impurezas en la capa delta. (En realidad, por supuesto, estos niveles están situados en diferentes energías). Niveles de energía análogos para una concentración más baja de $n_\delta = 0.6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ a $T = 300 \text{ K}$ - también se muestran en líneas azules horizontales y discontinuas. En la parte inferior de la Figura 4.18 colocamos las funciones de onda (también en la misma escala) de los primeros niveles de energía. Cabe señalar que las curvas a la temperatura de 4K se ven muy cercanas a las correspondientes a $T = 77 \text{ K}$, y para no hacer más compleja la imagen, no se presentan en la figura. Además, se muestran en la figura 4.17. La conclusión general extraída de la figura 4.18 puede consistir en el hecho de que la forma del fondo del QW está formada por dos grupos de electrones. Los “bolsillos” cerca de las interfaces se deben principalmente a los electrones

liberados por las barreras, mientras que el pozo cuántico en forma de V en la parte central es causado por la ionización de la capa delta. Significa que el aumento de la concentración de BI implica la profundización de los bolsillos, pero el aumento del nivel de ionización de impurezas de la capa delta es seguido por la profundización de la parte V del QW.

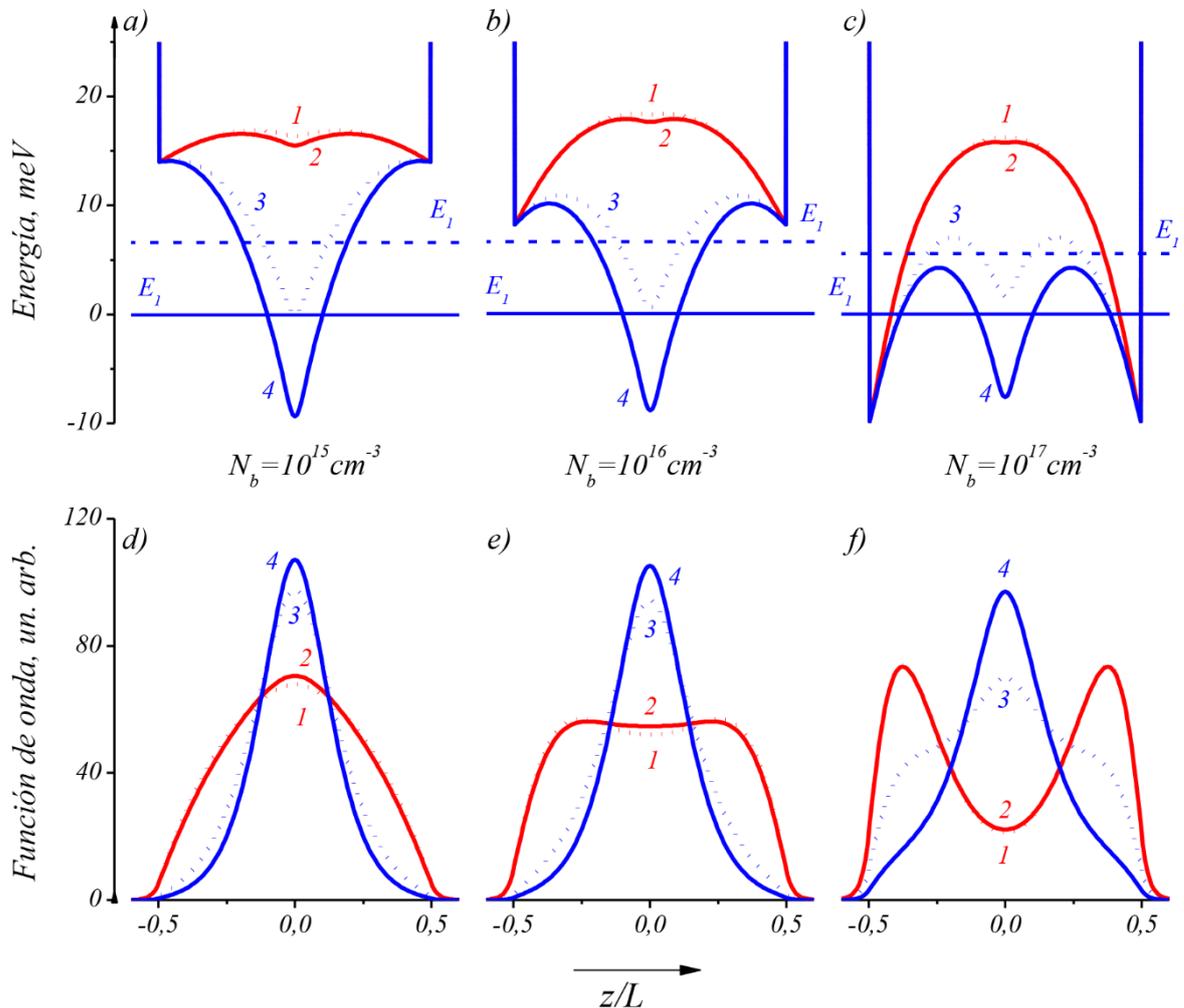


Fig. 4.18 Perfiles de energía - a), b), c) (parte superior de la figura), y funciones de onda del estado fundamental - d), e), f) (parte inferior de la figura). Concentraciones de impureza de base, N_b , cm^{-3} : a) y d) - 10^{15} ; b) y e) - 10^{16} ; c) y f) - 10^{17} . Temperatura T , K: 1 y 2 - 77 (líneas rojas); 3 y 4 - 300 (líneas azules). Las concentraciones de donadores en la capa delta n_δ , cm^{-2} : 1 (rojo) y 3 (azul) líneas discontinuas - 0.6×10^{12} ; 2 (rojo) y 4 (azul) líneas continuas - 1.2×10^{12} . Las líneas rectas horizontales discontinuas superiores (azul) (etiquetadas como E_1 en sus extremos derechos) corresponden al estado fundamental para el $N_\delta = 0.6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ a $T = 300\text{K}$, y las sólidas inferiores (azul) (etiquetados también como E_1 , pero en los extremos izquierdos de las líneas) muestran el estado fundamental para $N_\delta = 1.2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ a $T = 300\text{K}$. En la parte superior, los perfiles de energía para cada N_b se desplazan de tal manera que E_1 se ubica como energía cero para $N_\delta = 1.2 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ y $T = 300\text{K}$. Todas las curvas en a), b) y c) tienen el mismo factor de escala para la energía. Todas las funciones de onda en la parte inferior también guardan la misma escala.

Tabla 4.8. IBEs (ϵ_δ , meV), la densidad total de electrones en el QW (n_{QW} , cm^{-2}), contribución de los electrones, liberados por la ionización de la capa delta (n_δ^+ , cm^{-2}) en la densidad total y posiciones del nivel de Fermi (E_F) para dos concentraciones de impurezas en la capa delta a temperaturas de 77 y 300 K, y a diferentes concentraciones de impurezas residuales (N_b , cm^{-3}). El cero de energía corresponde al fondo de la banda de conducción, lejos de las áreas de agotamiento.

T, K	77								300							
n_δ, cm^{-2}	6×10^{11}				12×10^{11}				6×10^{11}				12×10^{11}			
N_b, cm^{-3}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0^*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0^*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0^*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0^*
$\epsilon_\delta, \text{meV}$	24.1	28.2	29.6	29.7				30.0	30.6	32.4	32.7	32.3				33.4
					24.4	28.5	29.8	30.5					32.8	33.7	33.9	34.0
$n_{QW}, 10^{11} \text{cm}^{-2}$	9.0	3.2	1.5	0.8				1.1	10.5	6.1	4.8	4.9				8.4
					9.2	3.5	1.8	1.1					13.5	9.2	8.0	7.7
$n_\delta^+, 10^{11} \text{cm}^{-2}$	0.2	0.3	0.5	0.8				1.1	4.4	4.8	4.9	4.9				8.4
					0.4	0.6	0.8	1.1					7.7	8.2	8.4	8.5
E_F, meV	-34	-43	-55					-	-	-	-					
					-34	-43	-55	100	146	205	265		-146	-205	-265	-443

(i) IBE a $T = 77\text{K}$. A esta temperatura, el nivel de ionización de la capa delta para ambas concentraciones es inferior al 10% (ver los datos correspondientes de la Tabla 4.8) y el fondo del QW está casi completamente (cerca de $T = 4\text{K}$) formado por electrones en los “bolsillos” cercanos de las interfaces (vea las curvas rojas en la parte superior de la Fig. 4.18) y, por lo tanto, el análisis de IBE de la capa delta a esta temperatura es similar a la de $T = 4\text{K}$. Por ejemplo, se ve claramente en la Tabla 4.8 que a medida que disminuye la concentración de la impureza de base, la IBE de la capa delta tiende a su valor límite en $N_b = 0$. A continuación, vemos que, a la misma concentración de BI, los perfiles de energía son muy similares entre sí para ambas concentraciones de impurezas ($6 \times$ y $12 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$) en la capa delta. Por lo tanto, no sorprende que las funciones de onda de los primeros niveles para los casos correspondientes también sean idénticos: vea las curvas rojas en la parte inferior de la Figura 4.18.

Esta similitud de las WF se refleja en una diferencia muy pequeña (no más de 0.3meV) en la IBE para estos casos con un valor más pequeño para la menor concentración de impurezas en la capa delta - ver los datos de la Tabla 4.8 para la temperatura de 77K para dos concentraciones de donadores en la capa delta. Consideramos esto para la concentración media de BI 10^{16}cm^{-3} . Otros casos pueden explicarse de forma analógica. Se puede ver en la Tabla 4.8 que el número de donadores ionizados de la capa delta (que es igual al número de electrones liberados) es dos veces mayor para la mayor concentración de impurezas en la capa delta. A su vez, esto lleva al hecho de que el perfil de energía del fondo del QW para $n_\delta = 12 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$ está dentro del mismo que para $n_\delta = 6 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$, como se puede ver en la Figura 4.18 b. Esto significa que los QWs – tipo bolsillo cerca de las interfaces están más cerca uno del otro. Esto, a su vez, lleva a dos consecuencias, conocidas por la mecánica cuántica. Primero, la separación del nivel de energía único y principal formado por los bolsillos debido al acoplamiento entre ellos será ligeramente mayor para la mayor concentración de impurezas en la capa delta. De hecho, esto se confirma por los resultados de la Tabla 4.8 (ver la diferencia en ΔE_{21}), donde se indican las separaciones entre pares de los niveles de energía más cercanos. Y la segunda consecuencia es un aumento de la función de onda en la barrera entre dos QW acoplados, que vemos en la Figura 4.18f. Un

aumento en la función de onda de los electrones en el centro del QW conduce a un aumento en la energía de enlace de la impureza. Aquí queremos enfatizar que la capacidad para explicar las diferencias tan pequeñas en la IBE para diferentes concentraciones de impurezas en la capa delta, indica lo siguiente: (i) Corrección del método de cálculo. (ii) Que el análisis de la WF del estado fundamental nos permite juzgar sobre la diferencia en la energía de enlace de impureza en el pozo cuántico.

(ii) IBE a $T = 300\text{K}$. Un aumento del nivel de ionización de la capa delta a una temperatura de 300K tiene como resultado que la parte V del QW desempeñe un papel más importante en la formación del fondo del QW, que es el más notable para el caso de la figura 4.18 a y b. Una cosa interesante es que, a pesar del hecho de que la distinción entre los perfiles de energía para dos concentraciones de la capa delta en la figura 4.18 a y b (ver diferencias entre las curvas 3 y 4) para esta temperatura llama la atención, las WF correspondientes en la figura 4.18 d y e (curvas 3 y 4) nuevamente se ven muy similares. La variación en las IBE es de solo 1.5 meV con un valor más pequeño para la concentración más baja de donadores en la capa delta. En nuestra opinión, hay dos razones para eso: Primero, ese mayor número de electrones (para una mayor concentración de donadores en la capa delta) "eleva" el QW de forma V más profunda. Esto significa que la WF del electrón penetra menos en las barreras y, en consecuencia, su amplitud aumenta en el centro del QW, lo que conduce a un aumento de la IBE. La segunda razón es que el estado fundamental para el QW más profundo está situado en la parte más estrecha del QW, lo que también conduce a un aumento de la IBE.

Lo mismo, en principio, se puede decir de las Figuras 4.18 c y f, aunque, en primer lugar, se puede notar la diferencia en las funciones de onda y no en los perfiles de energía, que parecerían similares entre sí. La diferencia en las funciones de onda refleja las diferentes contribuciones de los "bolsillos" y la parte central de la parte inferior del perfil de energía en la redistribución de electrones (ubicados en la primera sub-banda) a lo largo del ancho del QW. Esto inmediatamente da como resultado que las IBE difieran en más de 2 meV . Por lo tanto, vemos que cuanto más similares son las WF, menor es la diferencia en las IBE. Y viceversa, existe una distinción en las formas y valores de las funciones de onda para $T = 77$ y 300K para las mismas concentraciones n_δ en la figura 4.18 f, y la tabla 4.8 nos indica una gran diferencia en la IBE (más de 6 meV) para estos casos. El hecho de que la IBE de los donadores en la capa delta aumente con la disminución de la concentración de BI refleja el hecho de que la profundización del QW es seguida por un aumento en la IBE.

(iii) Donadores ionizados de la capa delta y electrones en el QW. Al observar los datos de la Tabla 4.8, se puede notar un comportamiento extraño, a primera vista, en la concentración de donadores ionizados en la capa delta con un aumento de la energía de enlace de impureza. De hecho, parece que cuando la energía de enlace disminuye, el grado de ionización del donador (ver los datos en n_δ^+) debería aumentar, pero vemos la condición opuesta. Sin embargo, queda claro si recordamos que la concentración de donadores ionizados depende no solo de la posición de energía del estado fundamental de impureza en relación con la primera subbanda, sino también de la posición del nivel de Fermi, o más exactamente se determina por la diferencia entre la energía del nivel de Fermi y la energía del estado fundamental de la impureza. Por ejemplo, para $n_\delta = 12 \times 10^{11}\text{cm}^{-2}$ y $T = 300\text{K}$ y para $N_b = 10^{15}\text{cm}^{-3}$, $E_F - E_\delta = -40\text{meV}$, y para $N_b = 10^{17}\text{cm}^{-3}$, $E_F - E_\delta = -33\text{ meV}$, lo que da como resultado que la concentración de donadores ionizados n_δ^+ es mayor para la IBE más grande. En cuanto al nivel de Fermi, vemos que su comportamiento es bastante común: con una concentración creciente de impurezas de base, se acerca al fondo de la banda de conducción, y el aumento de la temperatura lo mueve al centro de la brecha. Tal comportamiento explica la dependencia de las impurezas ionizadas en la capa delta de la

concentración de las BI. Pero lo más notable entre los datos de la Tabla 4.8 sobre la concentración de electrones en el QW es el hecho de que las impurezas de base en las barreras permiten aumentar el número de electrones en el QW en varios factores. A su vez, puede aumentar la eficiencia de los dispositivos optoelectrónicos que utilizan transiciones ópticas entre subbandas en el QW (consulte la discusión dada al respecto). También vale la pena señalar que a la temperatura de 77K, la concentración de electrones liberados de la capa delta es siempre menor que la concentración de electrones en el QW. A la temperatura de 300 K, esta relación aumenta con la disminución de la concentración de impurezas de base e incluso se vuelve contraria: la concentración de electrones debido a la ionización de la capa delta es mayor que la concentración de electrones en el QW. Los cálculos muestran que se debe a que una parte de los electrones en el QW están excitados por la temperatura en los niveles $E_m > E_9$ y, en consecuencia, ahora están en barreras.

4.6.4 Separación de energías a temperaturas elevadas

Los datos sobre la separación de energía entre los niveles vecinos para las temperaturas 77 y 300K y a diversas concentraciones de impureza de base se presentan en la Tabla 4.8. Estos datos señalan que, en general, sus valores para diferentes concentraciones de BI permanecen en el mismo orden de magnitud que los correspondientes para el caso sin ellos. Sin embargo, es interesante notar que, por ejemplo, para $N_b = 10^{15} \text{cm}^{-3}$ el rango dinámico del cambio de ΔE_{12} es $(11.2 - 2.9) \text{ meV} = 8.4 \text{ meV}$ mientras que el mismo rango para $N_b = 0$ es $(11.1 - 3.8) \text{ meV} = 7.3 \text{ meV}$, para el cambio de temperatura de 77 a 300K. Otros casos se pueden comparar y analizar de manera similar. Ponemos aquí este ejemplo para recordar a los lectores que el rango dinámico puede modificarse fácilmente mediante un campo eléctrico a la misma temperatura inicial (si ignoramos el efecto Joule). Por lo tanto, las impurezas de base no anulan el cambio en la separación de energía entre pares de niveles de energía, pero en algunos casos proporcionan posibilidades adicionales.

4.6.5 La baja concentración de impurezas de base

Ya hemos mencionado que para fines de verificación también hicimos cálculos para la concentración baja de impurezas de base, tal como 10^{12} cm^{-3} a la temperatura de 77 y 300K. Los resultados a la temperatura de 77K son bastante comunes y no encontramos ninguna necesidad de discutirlos aquí. El caso de 300K merece una consideración aparte porque, como vemos en la figura 4.16, el perfil de energía de la estructura parece poco común: el perfil de energía de las barreras cerca de las heterointerfaces cambia su pendiente. A bajas concentraciones de donadores en las barreras (10^{12} cm^{-3}), el nivel de Fermi no está cerca del fondo de la banda de conducción y la temperatura lo mueve al centro de la brecha prohibida. Esto se ve claramente a partir de los datos sobre la posición del nivel de Fermi en la Tabla 4.8. Significa que para tales condiciones es necesario contar la transferencia de electrones desde la banda de valencia tanto a las capas de agotamiento (que ahora no son las capas de agotamiento) como también al QW. Por lo tanto, los datos presentados en las Tablas 4.8 y 4.9 en cuanto a la concentración de BI 10^{12} cm^{-3} deben tomarse solo como aproximadas, mientras que los datos sobre las concentraciones 10^{15} , 10^{16} y 10^{17} cm^{-3} pueden considerarse bastante confiables. La última afirmación también se demuestra por el hecho de que las diferencias entre los resultados obtenidos con y sin los electrones para la concentración de la BI 10^{15} , 10^{16} y 10^{17} cm^{-3} a la temperatura de 300 K son demasiado pequeñas como para ser analizadas.

Tabla 4.9. Diferencias entre parejas de primeros niveles de energía a temperaturas de 77 y 300K para diferentes concentraciones de BI y para dos concentraciones de donadores en la capa delta.

T, K	77								300								
n_{δ}, cm^{-2}	6×10^{11}				12×10^{11}				6×10^{11}				12×10^{11}				
N_b, cm^{-3}	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0^*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0^*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	0^*	10^{17}	10^{16}	10^{15}	10^{12}	0^*
$\Delta E_{21}, meV$	0.3	1.4	2.6	3.6	0.3	1.5	2.9	3.8	2.1	6.5	7.8	7.9	5.8	10.1	11.2	11.5	11.1
$\Delta E_{32}, meV$	7.1	4.7	4.5	4.5	6.9	4.6	4.4	4.5	3.0	4.1	4.8	4.9	2.5	4.9	5.9	6.2	5.9
$\Delta E_{43}, meV$	5.6	6.6	6.7	6.7	5.8	6.7	6.7	6.6	7.5	6.6	6.6	6.6	6.8	6.3	6.6	6.4	6.5
$\Delta E_{54}, meV$	8.2	8.4	8.5	8.4	8.1	8.4	8.5	8.4	8.0	8.3	8.2	8.1	8.2	8.1	8.0	8.0	8.0

4.6.6 Menor profundidad del QW

Hemos mencionado que existen en la literatura otros datos sobre la profundidad del QW para la misma composición. Los autores de los trabajos [55, 56, 57] dan el valor de 120 meV. Por lo tanto, consideramos que es útil analizar los resultados presentados, para el caso de un QW menos profundo. Primero debemos tener en cuenta que, independientemente de la profundidad del QW, la separación de energía entre los cuatro valles superiores y los dos inferiores es superior a 110 mV [57] en ambos casos, y por lo tanto no es necesario tener en cuenta en los cálculos cuatro valles superiores separados por tensión uniaxial del QW para la menor profundidad del QW. Entonces, como se muestra aquí, el estado fundamental de impureza (nuestro parámetro principal en los cálculos) está formado principalmente por el estado fundamental generado por la parte en forma de V del QW. Naturalmente se supone que lo mismo pasará para el QW menos profundo. Ya hemos mencionado que todos los demás niveles de energía solo refinan la energía del estado fundamental de impureza. Por lo tanto, consideremos y comparemos la estructura del nivel de energía para ambos QWs. Para mayor claridad, hacemos esto usando el ejemplo de QW puramente rectangular. El QW más profundo tiene 14 niveles de energía (subbandas) y el QW menos profundo tiene 11 niveles. La energía del noveno nivel $E_9 \approx 76 meV$ (para cero de energía en la parte inferior del QW) en el QW más profundo y $E_9 \approx 73 meV$ para el QW menos profundo. Entonces, se sabe que la diferencia entre las parejas de los niveles de energía vecinos aumenta con el número de QW y lo más notable es para los niveles de energía superiores que se tienen en cuenta: $E_9 - E_8 \approx 16 meV$ para el caso de gran profundidad y $E_9 - E_8 \approx 14 meV$ para los QWs menos profundos. Entonces, vemos una pequeña diferencia entre las estructuras de los niveles de energía para ambas profundidades de los QW, al menos para los primeros 9 niveles. Todo esto nos permite concluir que los resultados reportados aquí serán en gran medida similares a los obtenidos para la profundidad más baja del QW.

5 Conclusiones

Este trabajo se basa en la idea de un nuevo diseño para los dispositivos ópticos activos y pasivos, basados en pozos cuánticos de semiconductores delta dopados. La introducción de la capa delta de impurezas permite ajustar las frecuencias de trabajo para tales dispositivos mediante el uso de un campo eléctrico externo. El funcionamiento del dispositivo se basa en las transiciones ópticas entre subbandas de electrones y puede funcionar en el rango del espectro del IR a THz. La parte más interesante es la región THz porque existen problemas técnicos en la implementación de dispositivos ópticos que funcionan en este rango, lo que se conoce como brecha THz. Los diseños existentes de dispositivos ópticos basados en las transiciones entre bandas de QW como QCL y QWIP pueden modificarse utilizando nuestra idea, lo que permitiría aumentar su capacidad de ajuste. También se pueden introducir nuevos tipos de dispositivos ópticos, como los moduladores.

Numéricamente hablando, se ha implementado el método de un cálculo autoconsistente. La peculiaridad de nuestra implementación en comparación con las existentes es la incorporación del cálculo de energía de enlace de impurezas, que es crucial para nuestro propósito.

Hemos propuesto como materiales, las heteroestructuras $Si_{0.8}Ge_{0.2}/Si/Si_{0.8}Ge_{0.2}$ con impurezas de fósforo. Nuestra elección tiene fundamento teórico y se confirma con los cálculos obtenidos. Los parámetros usados en el cálculo se tomaron de la literatura, algunos de los resultados son confirmados por los trabajos de otros autores, lo que demuestra la exactitud del método.

El método permitió calcular la separación de energía entre las subbandas inferiores, la posición del nivel de Fermi y las funciones de onda de los electrones en un QW como función de diversos parámetros, incluidos el ancho del QW, la temperatura electrónica, el grado de ionización de impurezas, el contenido de la aleación, la posición de la capa delta de impurezas y concentración de impurezas dentro de la capa delta. Además, se ha estudiado la posible influencia sobre el efecto de sintonización de factores como la presencia de campo eléctrico transversal externo y la presencia de impurezas de base. Los resultados obtenidos permiten calcular los coeficientes de absorción lineal y no lineal de la estructura y el cambio del índice de refracción no lineal. Los espectros de absorción obtenidos para diferentes grados de ionización de impurezas permitieron estimar los rangos de sintonización de la frecuencia para los potenciales dispositivos.

A partir de los cálculos y análisis realizados, se pueden destacar las siguientes conclusiones:

1. Los mejores materiales para los propósitos buscados son las heteroestructuras de silicio y germanio ya que la impureza es lo suficientemente profunda como para obtener la sintonización dentro de un rango aceptable de temperatura y también porque tiene un radio de Bohr suficientemente pequeño como para usar concentraciones más altas de impureza con un mejor efecto sin moverse al lado metálico de la transición de Mott.
2. Los cálculos muestran la viabilidad de la idea propuesta para los materiales y la configuración seleccionados. Fundamentalmente es posible crear un dispositivo óptico basado en semiconductores, el cual se puede ajustar para que funcione en la región de los THz o IR, usando el diseño propuesto.
3. El cambio de absorción en algunas configuraciones calculadas demuestra la posibilidad de sintonizar las frecuencias de funcionamiento, por ejemplo, de 1.3 a 3.5 THz o de 2.6 a 4.3 THz para el mismo dispositivo.

4. La energía de enlace de impureza para las diferentes situaciones puede cambiar significativamente, por ejemplo, disminuir aproximadamente 2-3 veces. Este efecto no impide el uso del diseño propuesto, sin embargo, debe tenerse en cuenta en las estimaciones cuantitativas.
5. Los efectos no lineales (tipo Kerr) con una magnitud razonable de la radiación incidente y concentraciones de portadoras aceptables, pueden disminuir un poco los picos de absorción, sin embargo, no los suprimen por completo.
6. El campo eléctrico transversal aplicado (que corresponde al efecto necesario en dispositivos como el QCL y el QWIP) a grandes magnitudes puede modificar el efecto de sintonización significativamente y debe tenerse en cuenta en las estimaciones numéricas. También proporciona una posibilidad adicional de ajuste, que hace que el diseño sea más flexible.
7. La inclusión de impurezas por razones tecnológicas tiene un efecto sobre la durabilidad y en concentraciones extremadamente altas vuelve inviable el diseño. Sin embargo, los casos límite se pueden evitar fácilmente por medios tecnológicos.

Los resultados del estudio pueden ser útiles para los científicos que se dedican al estudio de propiedades fundamentales de las capas delta de impurezas en las heteroestructuras de semiconductores, así como para los expertos en la ingeniería del gap, que diseñan nuevos tipos de dispositivos semiconductores ópticos y eléctricos.

Bibliografía

- [1] Smith C.G.. Low-dimensional quantum devices. *Rep. Prog. Phys.* **59** 235282, p. 244 (1996).
- [2] Principles of Chemical Vapor Deposition. Eds. D.M. Dobkin, M.K. Zuraw. Springer Science+Business Media B.V., 2003.
- [3] Semiconductor Surfaces and Interfaces. Springer Series in Surface Sciences, volume 26, W. Mönch, Springer, 1993.
- [4] Alferov Z.I.. The history and future of semiconductor heterostructures. *Semiconductors* **32**, 1–14 (1998).
- [5] Zheludev N. "The life and times of the LED: a 100-year history". *Nature Photonics*. **1** (4): 189–192 (2007).
- [6] Ivchenko E.L., Pikus G.E. Interband Optical Transitions. In: Superlattices and Other Heterostructures. Springer Series in Solid-State Sciences, vol 110. Springer, Berlin, Heidelberg, 1997
- [7] Duboz J.Y., Bois P., Rosencher E. Intersubband Transitions in Quantum Wells. In: Burstein E., Weisbuch C. (eds) Confined Electrons and Photons. NATO ASI Series (Series B: Physics), vol 340. Springer, Boston, MA, 1995
- [8] Schneider H., Liu H. C., "Quantum Well Infrared Photodetectors. Physics and Applications", Springer, 2007
- [9] Faist J., Capasso F. et al., "Quantum Cascade Laser", *Science*, **264** (5158), pp. 553-556, 1994
- [10] Zeng Y., Qiang B., Wang Q. J., "Photonic Engineering Technology for the Development of Terahertz Quantum Cascade Lasers," *Adv. Opt. Mat.*, **8**, p. 1900573, (2020).
- [11] Han R. et al., "Filling the Gap: Silicon Terahertz Integrated Circuits Offer Our Best Bet", *IEEE Microwave Magazine*, vol. 20 (4), pp. 80 – 93 (2019).
- [12] Corsi C.. *Advances in Optical Technologies*, 838752 (2012).
- [13] Wallace V.P., Fitzgerald A.J., Shankar S., Pye R.J., Arnone D.D., *Br. J. Dermatol* **151**, 424 (2004).
- [14] Fitzgerald A. J., Wallace V. P., Jimenez-Linan M., Bobrow L., Pye R. J., Purushotham A. D., Arnone D. D.. *Radiology* **239**, 533 (2006).
- [15] Mitrofanov O., Lee M., Hsu J. W. P., Brener I., Harel R., Federici J. F., Wynn J. D., Pfeiffer L. N. and West K. W.. *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **7**, 600 (2001).
- [16] Liu H.-B., Zhong H., Karpowicz N., Chen Y., and Zhang X.-C., *Proc. IEEE*, **95**, p. 1514-1527 (2007).
- [17] Prof. Zhang X.-C. report at THz Symposium in Taiwan, 10/22/01.
- [18] Zhan H., Zhao K., Bao R. et al. Monitoring PM2.5 in the Atmosphere by Using Terahertz Time-Domain Spectroscopy. *J Infrared Milli Terahz Waves* **37**, 929–938 (2016).
- [19] Ellrich F., Bauer M., Schreiner N. et al. Terahertz Quality Inspection for Automotive and Aviation Industries. *J Infrared Milli Terahz Waves* **41**, 470–489 (2020).
- [20] Dingle R., Störmer H. L., Gossard A. C., *Applied Physics Letters* **33**, 665 – 667 (1978).
- [21] Shubert E. F., *J. Vac. Sci. Techn.* **83**, 2980 (1990).
- [22] Levine B. F., *Applied Physics Letters* **74**, R1 (1993).
- [23] Bastard G., "Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model", *Phys. Rev. B*, **24**, p. 4714 (1981).
- [24] Mailhiot C., Chang Y. C., and McGill T. C., *Phys. Rev. B* **26**, 4449 (1982).
- [25] Masselink W. T., Chang Y. C., and Morkoc H., *Phys. Rev. B* **28**, 7373 (1983).
- [26] Chaudhuri S. *Phys. Rev. B* **28**, 4480 (1983).
- [27] Chaudhuri S. and Bajaj K. K., *Phys. Rev. B* **29**, 1803 (1984).
- [28] Priester C., Bastard G., Allan G., and Lannoo M., *Phys. Rev. B* **30**, 6029 (1984).
- [29] Fraizzoli S., Bassani F., and Buczko R., *Phys. Rev. B* **41**, 5096 (1990).
- [30] Brum J. A., Bastard G., and Guillemot C., *Phys. Rev. B* **30**, 905 (1984).

- [31] Oliveira L. E. and Falicov L. M., *Phys. Rev. B* **34**, 8676 (1986).
- [32] Masselink W. T., Chang Y. C., and Morkoc H., *Phys. Rev. B* **32**, 5190 (1985).
- [33] Brum A., Priester C., and Allan G., *Phys. Rev. B* **32**, 2378 (1985).
- [34] Weber G., *Phys. Rev. B* **41**, 10043 (1990).
- [35] Greene R. L. and Bajaj K. K., *Phys. Rev. B* **31**, 913 (1985).
- [36] Kasapoglu E., Sari H., and Sokmen I., *Solid State Commun.* **125**, 429 (2003).
- [37] Raigoza N., Morales A. L., Montes A., Porrás-Montenegro N., and Duque C. A., *Phys. Rev. B* **69**, 045323 (2004).
- [38] Loehr and Singh J., *Phys. Rev. B* **41**, 3695 (1990).
- [39] Zhao Q. X. and Willander M., *Phys. Rev. B* **57**, 13033 (1998).
- [40] Lopez S. Y., Porrás-Montenegro N., and Duque C. A., *Semicond. Sci. Technol.* **18**, 718 (2003).
- [41] Zhao G. J., Liang X. X., Ban S. L., *Phys. Lett. A* **319**, 191 (2003).
- [42] Panahi H. and Maleki M., *J. Appl. Sci.* **8**, 636 (2008).
- [43] Fanyao Q., Fonseca A. L. A., and Nunes O. A. C., *Phys. Status Solidi B* **7**, 349 (1996).
- [44] Qu F. and Morais P. C., *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 513 (1998).
- [45] Sari H., Kasapoglu E., Sokmen I., and Balkan N., *Semicond. Sci. Technol.* **18**, 470 (2003).
- [46] Radhakrishnan N., Peter A. J., *Physica E* **41**, 1841 (2009).
- [47] Elabsy A. M., *Physica Scripta* **46**, 473 (1992).
- [48] Peter A. J. and Navaneethakrishnan K., *Superlattices Microstruct.* **43**, 63 (2008).
- [49] Kasapoglu E., *Phys. Lett. A* **373**, 140 (2008).
- [50] Zhou H., Deng Z.-Y., “Electronic and hydrogenic impurity states in a corner under an applied electric field”, *J. Phys.: Condens. Matter*, **9**, pp. 1241–1248, (1997).
- [51] Kasapoglu E., Sari H., Sokmen I., “Binding energy of hydrogenic impurities in a quantum well under the tilted magnetic field”, *Solid State Communications*, **125** (7), pp. 17-22, (2003).
- [52] Aharonyan K.H., Kokanyan E.P., Aillerie M., “Screened shallow impurity properties of quantum well heterosystems with high- κ dielectric barrier environment”, *Physica E*, **113**, pp. 47–53, (2019)
- [53] Blom A., Odnoblyudov M. A., Yassievich I. N., and Chao K.-A., “Donor states in modulation-doped Si/SiGe heterostructures,” *Phys.Rev.B*, **68**, p. 165338, (2003).
- [54] Rieger M. M. and Vogl P. *Phys. Rev. B*, **48**, 14276, (1993)
- [55] Schaffler F., *Semicond. Sci. Technol.*, **12**, 1515, (1997)
- [56] Paul D. J. *Semicond. Sci. Technol.*, **19**, R75, (2004)
- [57] Sant S., Lodha S., Ganguly U., Mahapatra S., Heinz F. O., Smith L., Moroz V. and Ganguly S. *J. Appl. Phys.*, **113**, 033708, (2013)
- [58] Dutarte D., Warren P., Sagnes I., Badoz P.A., Perio A., Dupuis J.C and Prudon G., *J. Vac. Sci. Technol. B*, **11**(3), 1134-1139 (1993).
- [59] Kyzym-zade A.G., *Semiconductors* **29**, 10, (1995).
- [60] Iyer S.S., Kubiak R.A.A., Parker E.H.C., in: Kasper E., Bean J.C. (Eds.), *Silicon Molecular Beam Epitaxy*, vol. 1, CRC, Boca Raton, FL, 2018.
- [61] Goh K. E. J., Augarten Y., Oberbeck L., and Simmons M. Y., *Appl. Phys. Lett.*, **93**, 142105, (2008).
- [62] [Oberbeck2004] Oberbeck L., Curson N. J., Hallam T., Simmons M. Y., Bilger G., and Clark R. G., *Appl. Phys. Lett.*, **85**, 1359 (2004).
- [63] Shklovskii B.I. and Efros A.L., *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Springer, Heidelberg, 1984.
- [64] Sirenko Yu. M., Mitin V., *Journal of Luminescence* **58**, 257-260 (1994).
- [65] Scolfaro L. M. R., Beliaev D., Enderlein R. and Leite J. R., *Phys. Rev. B*, **50**, 8699, (1994)
- [66] Tulupenko V., Duque C., Demedyuk R., et al. “On some new effects in delta-doped QWs”, *Physica E*, **66**, pp. 162-169, (2015).

- [67] Bir G.L. and Pikus G.E., *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974).
- [68] Tulupenko V., Duque C. A., Morales A. L., Tiutiunnyk A., Demediuk R., Dmytrychenko T., Fomina O., Akimov V., Restrepo R. L. and Mora-Ramos M. E., *Phys. Status Solidi B*, **254**, 1600464, (2017)
- [69] Kohn W. and Luttinger J. M. *Phys. Rev.*, **98**, 915, (1955)
- [70] Ramdas A. K. and Rodriguez S. *Rep. Prog. Phys.*, **44**, 1297, (1981)
- [71] BenDaniel D. J. and Duke C. B. *Phys. Rev.*, **152**, 683, (1966)
- [72] Harrison P. *Quantum Wells, Wires and Dots*. Wiley-Interscience, N.Y, 2005
- [73] Vinter B., “Influence of charged impurities on Si inversion-layer electrons,” *Phys. Rev. B*, **26**, p. 6808, (1982).
- [74] Jackson J. D. *Classical electrodynamics* (JohnWiley&Son INC. New York-London, 1962).
- [75] Neamen D. A. *Semiconductor physics and devices* (McGraw-Hill; 4ed., 2012)
- [76] Braunstein R., Moore A. R. and Herman F. *Phys. Rev.*, **109**, 695, (1958)
- [77] Krussmann R., Vollmer H. and Labusch R. *Phys. Stat. Sol. B*, **118**, 275, (1983)
- [78] Zubkov V. I., Melnik M. A., Solomonov A. V., Tsvelev E. O., Bugge F., Weyers M. and Tränkle G. *Phys. Rev. B*, **70**, 075312, (2004)
- [79] Zubkov V. I. *Semiconductors*, **41**, 331, (2007)
- [80] Schiff L. I. *Quantum Mechanics* (McGraw-Hill, INC, New York-Toronto-London, 1949).
- [81] Rodriguez-Vargas I. and Gaggero-Sager L. M. *JAP*, **99**, 033702, (2007)
- [82] Tulupenko V., Abramov A., Belichenko Ya., Akimov V., et al., “The influence of the ionized impurity delta-layer potential in the quantum well on impurity binding energy,” *Journal of Applied Physics*, **109**, p. 064303, (2011).
- [83] Kuhn K. J., Lyengar G. U., Yee S., *Journ. Appl. Phys.* **70**, 5010 (1991).
- [84] Ahn D., Chuang S. L., *IEEE Journal of Quantum Electronics* **23**, 2196 (1987).
- [85] Virgilio M., Ortolani M., Teich M., Winnerl S., Helm M., Sabbagh D., Capellini G., De Seta M., *Phys. Rev. B* **89**, 045311 (2014).
- [86] Zachau M., *Semicond. Sci. Technol.* **3**, 879 (1988).
- [87] *Intersubband Transitions in Quantum Wells: Physics and Device Applications*, eds H.C.Liu, F. Capasso, Academic Press, 1999.
- [88] Hedin L. and Lundqvist B. I., *J. Phys. C: Solid State Phys.* **4** 2064 (1971).
- [89] Kohn W. and Sham L. J., *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- [90] Ozturk E., Ozdemir Y., *Optics Communications* **294**, 361–367 (2013).
- [91] Rahm M., Li J.-S., Padilla W.J., *J. Infrared Milli. Terahz. Waves* **34**, 1–27 (2013).
- [92] Hupper G., Pyragas K., Scholl E., *Phys. Rev. B* **47**, 15515 (1993).
- [93] Aldridge R.V., Davis K., Holloway M., *J. Phys. D* **8**, 1, 64-68 (1975).
- [94] Stopa M. and DasSarma S. *Phys. Rev B*, **40**, 8466, (1989)
- [95] Ozturk E., Sari H., Ergun Y. and Sokmen I. *Phys. B* **334** 1 (2003)
- [96] Tan I. H., Snider G. L., Chang L. D. and Hu E. L. *J. Appl. Phys.* **68** 4071 (1990)
- [97] Bastard G. *Wave mechanics applied to semiconductor nanostructures* (Wiley-Interscience, 1ed, 1991)
- [98] Ungan F., Kasapoglu E., Sarı H., Sökmen I. *Superlatt. Microst.* **46** 864 (2009)