

AGRADECIMIENTOS

Deseo expresar mis más sinceros agradecimientos a:

Mi esposa e hijos por cederme el tiempo de compartir con ellos, para que realizara estos estudios y al resto de mi familia por su fe en mí.

Al Doctor Hernando Ariza Calderon, por su impulso y colaboración para que hiciera parte de su sueño.

A mi Directora de Tesis, doctora Aminta Mendoza Barón, por enseñarme, en la práctica, lo que es el sentido de pertenencia y el enfrentar los retos con altura y disciplina.

Al Doctor Octavio Guzmán Baena, por guiarme por el camino de los pozos cuánticos.

Al Doctor Francisco Racedo, de la universidad del Cauca, por haberme facilitado las muestras objeto de estudio.

A la Universidad del Valle, Laboratorio de películas delgadas, por Facilitarme y colaborar en el manejo de su microscopio de fuerza atómica.

A todos mis profesores por darme sus excelentes conocimientos y hacerme sentir su compañero en el camino del aprendizaje.

A los jurados del trabajo por sus valiosas correcciones, sugerencias y aportes.

A mis excelentes compañeros de estudio, los que siempre me brindaron su amistad y apoyo.

A todos los compañeros del instituto, secretarias, laboratoristas, estudiantes y jóvenes investigadores por permitirme ser su amigo y brindarme su invaluable colaboración.

A la comunidad inemita por considerarme como su embajador en el Instituto interdisciplinario de las Ciencias.

A mis exalumnos y alumnos por su “Usted es capaz profe”

Para todos, Mil y mil gracias.

CONTENIDO

RESUMEN.....	6
INTRODUCCIÓN.....	7
CAPITULO 1	11
ESTADO DEL ARTE.....	11
1.1. Generalidades.....	11
1.2. Las propiedades del GaInAs	12
1.3. Construcción del Pozo Cuántico.....	16
1.4. La Morfología	18
1.4.1 La interfase.....	19
1.4.2 La rugosidad.....	20
1.5 Modelo teórico	23
1.5.1. Principios físicos del pozo cuántico	24
1.5.2 El gas de electrones libres.....	27
CAPITULO II.....	45
PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL	45
2.1. Montaje experimental.....	45
2.1.1 Sistema de Fotoluminiscencia.....	45
2.1.2 Microscopio de Fuerza atómica	47
2.2 Proceso Experimental.....	50
2.2.1 Espectros de Fotoluminiscencia	50
2.2.2 Evaluación superficial de las muestras por medio de AFM	55
CAPITULO III	59
ANALISIS DE RESULTADOS.....	59
3.1 Imágenes de AFM - Rugosidad	59

3.2 Efecto de la temperatura sobre los espectros de PL.....	60
3.2.1 Hipótesis 1. La morfología de la interfase es responsable del corrimiento de los picos de PL con la temperatura.....	65
3.2.2. Hipótesis 2. Corrimiento del pico de fotoluminiscencia por efectos de la dilatación térmica.....	71
CONCLUSIONES.....	73
REFERENCIAS.....	74
Anexo 1_ Espectros de fotoluminiscencia.....	77
Anexo 2_ Solución gráfica de la ecuación de schrödinger independiente del tiempo para un potencial de pozo cuadrado.	92
Anexo 3_ Dilatación térmica.....	100
Anexo 4. Participacion en eventos y publicacion en revista nacional.....	104

INDICE DE FIGURAS

Figura 1. Geometría de los orbitales híbridos sp^3	14
Figura 2. Estructura cristalina para los compuestos III – V. GaAs. a es el parámetro de red.....	16
Figura 3. Representación del pozo cuántico en sus bandas de valencia y conducción en la proximidad de $k = 0$	17
Figura 4a. Imagen de AFM. B Perfil a lo largo de la imagen de AFM	18
Figura 5. Esquema de crecimiento dos dimensional, evidenciando la presencia de islas.....	19
Figura 6. Efecto de la interfase en las capas sobre el ancho del pozo	20
Figura 7. Espectro de energía para un gas de electrones libres.	28
Figura 8. Energía en función de k para una red lineal monoatómica de constante de red a	29
Figura 9 a. Variación de la energía potencial de un electrón de conducción en el campo de cascarones positivos de una celda lineal monoatómica. b Distribución de probabilidad de densidad en la red.....	31
Figura 10. Representación gráfica de la construcción de la red por medio del acercamiento de los átomos	33
Figura. 11. Desdoblamiento de los niveles de energía de la constante de red.	34
Figura. 12. Diagrama plano de una red de GaAs.....	36
Figura 13. Estructura de bandas del GaAs[]	38
Figura 14. Diagrama de bandas de energía en un compuesto III - V cerca del centro de la primera zona de Brillouin.....	39
Figura 15. Modelo de dos bandas para un semiconductor de brecha directa.....	41
Figura 16 Sistema de fotoluminiscencia	45
Figura 17 Componentes generales en un AFM.....	48
Figura 18. Fuerza de interacción entre átomos de la punta y la muestra	48
Figura 19 Espectro de PL para la muestra 269.....	54

Figura 20. Espectro de la muestra 269 InGaAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico, ajustado con una función Lorentziana.....	54
Figura 21. Imagen de AFM tomada sobre la muestra 270.....	56
Figura 22 a. Perfiles de 100 nm a lo largo de la superficie de la película #270 b. Perfiles de 300 nm a lo largo de la superficie de la película #270.....	58
Figura 23. Dependencia de la rugosidad, con el lado de la imagen obtenida por AFM	59
Figura 24. a. Imagen de AFM sobre la muestra #271_b. Distribución de alturas a lo largo de la superficie. Muestra #271.....	60
Figura 25a. Espectros de fotoluminiscencia para la muestra 271 para T =10K, 50K y 70K_b. para T=90K, 120K y 160K c. Espectros de fotoluminiscencia para la muestra 271_Para T=180K y 220K.....	64
Figura 26. Espectros de PL para la Muestra 271 de InGaAs/ AlInAs con estructura de pozo cuántico a diferentes temperaturas.....	66
Figura 27. Variación de la posición del pico de mayor intensidad de PL para la Muestra 271 de InGaAs/ AlInAs como función de la temperatura	67
Figura 28. Excitón ubicado dentro de la superficie (azul), su radio (Verde), y la celda más profunda y cercana que define su movimiento (amarillo).....	70
Figura 29. Espectro final de fotoluminiscencia generado por el programa en el cual se incluyen los diferentes anchos del pozo.	71

INDICE DE TABLAS

Tabla 1. Electronegatividad de algunos elementos de los grupos III y V y de los compuestos III-V.....	12
Tabla 2: Parámetros del material	15
Tabla 3: Muestras estudiadas y sus temperaturas de crecimiento.	51
Tabla 4: dimensiones teóricas de la heteroestructura para evaluar esta posibilidad se tuvo en cuenta la variación de la posición del pico de PL a diferentes Temperaturas, como se observa en la figura 27.	65

Tabla 5: Energía pico (1) Vs T para la muestra 271	67
Tabla 6: Energía de la brecha para el GaInAs	68
Tabla 7. Valores de dilatación térmica lineal para GaInAs.....	72

RESUMEN

En este trabajo se estudian algunos multipozos cuánticos de GaInAs/AlInAs utilizando las técnicas de fotoluminiscencia (PL) y microscopía de fuerza atómica. Dichas muestras fueron preparadas, previo a este trabajo, por la técnica de Deposición de Vapor Químico Metal Orgánico o MOCVD (*Metal Organic Chemical Vapor Deposition*). Todos los espectros de PL presentaron tres picos, con lo cual se identificó la presencia de tres pozos en cada una de las muestras estudiadas. Para el pico de mayor energía en cada una de las muestras se realizaron medidas de PL variando la temperatura en el rango $10\text{ K} \leq T \leq 220\text{ K}$.

Los espectros de PL muestran cualitativamente un corrimiento hacia valores de menor energía, para altas temperaturas. El corrimiento de los picos fue estudiado cuantitativamente a través de dos hipótesis. La primera, considerando dilatación térmica de la celda unitaria y la segunda, considerando difusión de los excitones a través de un potencial variable, generado éste último por la rugosidad en las interfases de los pozos. Finalmente se muestra que la segunda hipótesis responde mejor a los resultados experimentales; para ello se utiliza un modelo teórico de potencial de pozo cuadrado en el cual, para el cálculo teórico de la intensidad, se han considerado tipos de dominios de fluctuaciones con diferentes pesos, simulando de esta manera la desviación de la interfase 2D a 3D.

Un estudio de la rugosidad superficial de las muestras fue realizado mediante la evaluación de imágenes de AFM. Se mostró a partir de las medidas de rugosidad, que la rugosidad superficial corresponde al orden de magnitud de variaciones en el potencial predichos a partir de las medidas de PL a temperatura variable.

INTRODUCCIÓN

En este trabajo se estudia la influencia de las rugosidades en las interfases de pozos cuánticos en las propiedades ópticas del sistema formado por un conjunto de excitones confinados en un pozo cuántico de material semiconductor con interfases no abruptas. La técnica espectroscópica que se emplea en este trabajo es la de la PL.

Los excitones aparecen mediante irradiación, con un láser, de cada una de las muestras numeradas como 269, 270 y 271 de GaInAs/AlInAs, con estructura de pozo cuántico y en donde las barreras están constituidas por AlInAs y el pozo por el ternario GaInAs. El campo eléctrico del láser origina “pares ligados” (electrón–hueco) en el pozo a través de transiciones electrónica entre las bandas del pozo semiconductor, a saber, la banda de valencia formada por estados ocupados y la banda de conducción formada por estados no ocupados. Este estado ligado es una cuasi-partícula construida a partir de la superposición de funciones de onda electrónicas que involucran estados excitados. Es por esta razón que a éste estado ligado cuasi-estable se le denomina excitón (excitaciones fundamentales). Durante el colapso de los excitones debido a la recombinación del par, se emiten fotones con una energía o una longitud de onda correspondiente a la transición electrónica. Dichos fotones se registran con un detector adecuado. Es decir, se detectan mediante un dispositivo sensible a los fotones que poseen la longitud de onda típica de dichas transiciones.

El número de fotones graficado en función de la energía o de la longitud de onda representa una distribución espectral. Esta distribución se conoce con el nombre de espectro fotoluminiscente, o también, como espectroscopía excitónica fotoluminiscente.

En materiales de brecha directa, como es nuestro caso, se tiene una tasa de transición radiativa alta. En la distribución espectral participan transiciones ópticas con frecuencias en el visible o cercanas al infrarrojo. Los portadores de carga, es decir, tanto los electrones como los huecos se encuentran confinados en sus respectivos pozos

Los pozos semiconductores al igual que el material en bloque presentan una estructura electrónica de bandas. Un cálculo de bandas para pozos cuánticos semiconductores se hace de manera análoga a como se hace para un semiconductor en bloque (*bulk*). Naturalmente para el caso de los pozos se toma en cuenta el efecto del confinamiento, pero el grado de complejidad del cálculo es el mismo.

Como se mencionó en el resumen, los pozos que se estudian, en este trabajo, fueron crecidos por la técnica de Deposición de Vapor Químico Metal Orgánico o MOCVD

El comportamiento cuántico del problema se origina debido a que la longitud característica del excitón, o la longitud de onda de De Broglie de los portadores de carga es comparable con la dimensión de confinamiento, es decir, con el ancho del pozo. En el pozo cuántico ideal, el confinamiento se da en una dimensión, en la dirección de crecimiento z . En el plano (x, y) no hay confinamiento de los portadores de carga. En este plano los portadores de carga se comportan como partículas libres.

La presencia de interfases no abruptas, significa la presencia de una morfología rugosa para las interfases. Es decir la interfase no sólo varía en la dirección de crecimiento z , sino también en el plano (x, y) . De esta manera se tiene una desviación del comportamiento puramente 1D (unidimensional) del pozo ideal, hacia un comportamiento 2D, y en consecuencia una rugosidad generada por un conjunto de islas en el plano (x, y) de altura z . De acuerdo con lo anterior la energía del excitón depende de su posición en el pozo. El excitón “ve” entonces la rugosidad de manera diferenciada ya que siente la influencia de las islas de acuerdo con el tamaño de éstas. Al variar el ancho del pozo debido a la presencia de las islas, la energía del excitón varía. A una isla de mayor área corresponde una mayor presencia de excitones en la misma, ya que la distribución de excitones en toda el área del pozo es aleatoria. Lo anterior implica una mayor emisión de fotones con energía correspondiente al ancho del pozo generado por la isla de mayor área. Por esta razón los excitones se usan como “sensores morfológicos.”

La caracterización estructural que aparece en el título del trabajo hace referencia al estudio de la morfología que se presenta en las interfases del pozo mediante el uso de espectroscopía fotoluminiscente. Lo de “estructural” hace referencia a las implicaciones que para el crecimiento de multicapas tiene el tipo de crecimiento. Así, por ejemplo, películas delgadas que se forman en la construcción de pozos cuánticos muestran por lo general un crecimiento por islas. Estas estructuras ya existentes son las que al crecer sobre otra capa originan la morfología de islas o fluctuaciones en el potencial de confinamiento. Este es uno de los argumentos que justifica el modelo empleado. Un barrido en temperatura del espectro de PL desde la temperatura del nitrógeno líquido hasta la temperatura del medio ambiente para diferentes temperaturas de crecimiento del pozo, provee resultados experimentales muy útiles para el estudio de los efectos termodinámicos y cinéticos debido a la localización de los excitones en el potencial de confinamiento antes mencionado. La física cuántica del confinamiento y su realización experimental ha dado origen a un nuevo campo en la física moderna; la denominada nanofísica. Su aplicación ha generado una nueva tecnología relacionada con la construcción de nanodispositivos como elementos estructurales de nanomáquinas, de nanoestructuras o de sensores de gran utilidad en informática, telecomunicaciones, medicina, genética y biología molecular, entre otros. Los pozos y puntos cuánticos[1,2] han sido estructuras de gran utilidad no solo desde el punto de vista de sus aplicaciones sino también en la riqueza física de sus propiedades. Estas han sido estudiadas bajo diversas condiciones de temperatura, presencia de campo eléctrico[3,4], campo magnético[5,6], composición etc.

Debido a la gran importancia de la nanofísica en la enseñanza de la física moderna, el análisis de los resultados específicos que se presentan en este trabajo le concede a la componente didáctica un mayor espacio. Por esta razón el énfasis se coloca en los principios generales aunque en algunos casos los resultados se discuten de manera detallada. Los resultados que aquí se presentan han sido obtenidos en el Laboratorio de Optoelectrónica del Instituto interdisciplinario de las Ciencias de la Universidad del Quindío y en el Laboratorio de Películas Delgadas de la Universidad del Valle.

En el Capítulo I trataremos el problema de la física del confinamiento en pozos cuánticos semiconductores. En el aparte 1.1 se presentan algunas generalidades a manera de introducción a los pozos cuánticos. En el numeral 1.2 se presentan algunos parámetros físicos del pozo que se utilizan en el trabajo. En el numeral 1.3 se presenta una descripción cualitativa de la construcción de un pozo cuántico. En numeral 1.4 se presenta brevemente los efectos morfológicos en el análisis de películas delgadas. Y en el numeral 1.5 se discute un modelo teórico sencillo en el estudio de pozos cuánticos y una discusión de los excitones en un pozo con interfaces rugosas. En el Capítulo II se describe el procedimiento experimental y se tienen algunas consideraciones sobre los sistemas empleados (PL y AFM). En el capítulo III se presenta una discusión de los resultados experimentales y finalmente se presentan las conclusiones del trabajo.

CAPITULO 1

ESTADO DEL ARTE

1.1. Generalidades

Desde el punto de vista teórico, con el nacimiento de la mecánica cuántica fueron estudiados sistemas de baja dimensionalidad, como los pozos cuánticos, los puntos cuánticos, el efecto de tunelamiento, el confinamiento, las barreras cuánticas etc. Cuando la mecánica cuántica fue aplicada a los átomos, moléculas y cristales surgieron los niveles, bandas de energía y la presencia de brechas prohibidas que explicaban el comportamiento electrónico de metales, semiconductores y aislantes.

Los avances tecnológicos permitieron la fabricación de los primeros pozos cuánticos hacia el año 1982. Lo anterior se logró gracias al control, durante el proceso de crecimiento, de la deposición de las capas que permitía un espesor controlado y una rugosidad baja. Esto garantizaba tener multicapas suficientemente homogéneas. Su creación dio un nuevo paso al estudio de sistemas en la física de baja dimensionalidad, permitiendo así evaluar sistemas con una “nueva naturaleza”.

Su naturaleza nanoscópica, además de ser de un gran atractivo académico, es aún de mayor relevancia tecnológica por las grandes aplicaciones de estas estructuras en la fabricación de nuevos dispositivos electrónicos y optoelectrónicos [3,7]. Entre ellos se cuentan; los diodos emisores de luz en todo el espectro visible y en el infrarrojo[8], los láseres de alta velocidad, de longitud de onda larga [8,31,32,33], convertidores de energía fototermovoltáicos[8], fotodetectores en el infrarrojo[31],etc. En general los materiales utilizados en la fabricación de los pozos deben ser semiconductores fabricados a partir de los elementos de la tabla periódica de los grupos II-VI, tales como CdTe, CdS, ZnSe, ZnS,

y también con los de los grupos III-V como GaAs, InAs, InSb, GaSb, GaN, etc. A continuación se tratarán en más detalle las propiedades de los materiales empleados en este estudio.

1.2. Las propiedades del GaInAs

Entre los materiales semiconductores de mayor impacto tecnológico están los compuestos III -V como el GaAs, InP, GaN, InAs, InSb, GaSb, GaN, InN, etc; debido a sus numerosas aplicaciones en dispositivos electrónicos y opto-electrónicos. A partir de las propiedades de los semiconductores III–V se han desarrollado aleaciones semiconductoras ternarias y cuaternarias, en las que intervienen tres o cuatro elementos de los grupos III y V como GaAlAs, GaInAs, GaInN, GaInSb, GaInAsP, etc. En estos nuevos materiales semiconductores es de especial interés manipular algunas de sus características ópticas por medio del control de su composición, así como de los parámetros de fabricación. Entre las características a controlar se cuentan la brecha de energía, el parámetro de red, el tipo de transiciones, la creación de trampas, etc.

El compuesto GaAs es el material semiconductor con una de las mayores eficiencias desde el punto de vista óptico. Los enlaces del compuesto GaAs son tipo covalente y se originan en una hibridación sp^3 (ver figura 1). Las electronegatividades de los átomos que constituyen los compuestos III-V son, entre otros, las responsables de su estabilidad electroquímica.

En la tabla 1 se observa que la diferencia de electronegatividades entre los átomos de los elementos de los grupos III y V es muy pequeña, lo que hace que el grado de ionicidad sea muy bajo. También se ve que los átomos de los elementos del grupo III son menos electronegativos que los del grupo V y por ésta razón los átomos del grupo III actúan como cationes, mientras que los del V lo hacen como aniones.

Tabla 1. Electronegatividad de algunos elementos de los grupos III, V, II y VI y de algunos de los compuestos III-V y II – VI

Elementos Grupo III A	Electronegatividad	Elementos Grupo II B	Electronegatividad
B	2.0	Zn	1.6
Al	1.5	Cd	1.7
Ga	1.6	Hg	1.9
In	1.7		
Elementos Grupo V A	Electronegatividad	Elementos Grupo VI A	Electronegatividad
N	3.0	O	3.5
P	2.1	S	2.5
As	2.0	Se	2.4
Sb	1.9	Te	2.1
Compuestos III - V	Diferencia de Electronegatividad	Compuestos II - VI	Diferencia de electronegatividad
GaAs	0.4	CdTe	0.4
InP	0.4	CdS	0.8
GaAs	0.3	ZnSe	0.8
InAs	0.3	ZnS	0.9

Los compuestos III-V tienen ordenamiento cristalino cúbico del tipo zinc-blenda, el cual consiste en una celda cúbica centrada en la cara con un motivo compuesto por dos átomos diferentes en las posiciones (0,0,0) y ($a/4$, $a/4$, $a/4$). En la figura 2 se muestra la celda cristalina del GaAs.

Como se dijo, en general, el enlace que presentan los átomos en los compuestos III -V es de tipo covalente, rígido y direccional, correspondiente al orbital híbrido sp^3 , cuya orientación en el espacio tiene una forma tetraédrica (figura 1).

En el material que constituye el pozo en estudio, el GaInAs, se presenta una sustitución de átomos de Ga por átomos de In. Los radios covalentes de estos átomos difieren, siendo 0.126nm para el Ga y 0.144nm para el In. La sustitución de In genera una leve distorsión en la red y en la estructura de bandas del material.

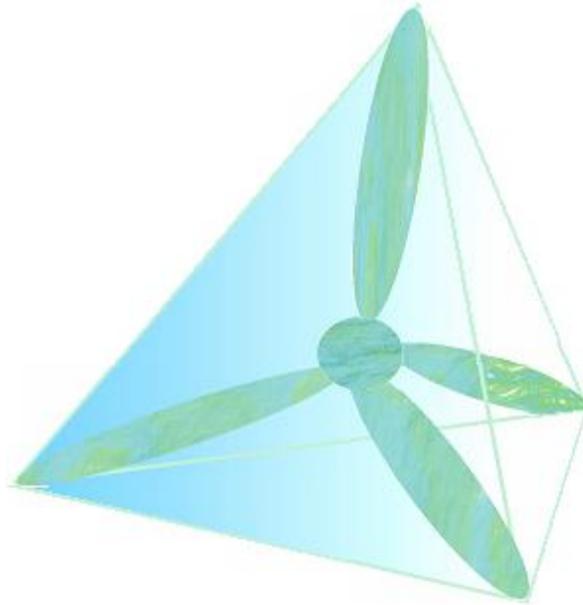


Figura 1. Geometría de los orbitales híbridos sp^3 .

Además de introducir cambios en el parámetro de red, existen otras consecuencias topológicas originadas con la inclusión de Indio, como es una alteración en las bandas de conducción y de valencia. Consecuencia de lo anterior, las masas efectivas de electrones y huecos variarán dependiendo del material dentro del cual se desplacen[8].

En la Tabla 2 se presentan algunos de los parámetros que juegan un papel importante en los pozos cuánticos estudiados [7,8].

Tabla 2: Parámetros del material

PARÁMETRO	SUSTRATO	POZO	BARRERA
Material	InP	Ga _{0.47} In _{0.53} As	Al _{0.48} In _{0.52} As
$m_e^*(m_0)$	0.081	0.032	0.083
$m_{lh}^*(m_0)$	0.089	0.052	0.086
$m_{hh}^*(m_0)$	0.6	0.45	0.68
Parámetro de red (nm)	0.58687	0.58687	0.586
E_g a 300K (eV)	1.415	0.75	1.45

Donde $m_e^*(m_0)$ es la masa efectiva del electrón, $m_{lh}^*(m_0)$ es la masa efectiva del hueco liviano, $m_{hh}^*(m_0)$ es la masa efectiva del hueco pesado y E_g es la brecha de energía.

Es importante resaltar que compuestos con parámetro de red muy cercano pueden tener diferencias muy marcadas en la brecha de energía. En el caso de los compuestos con los que se prepararon los pozos en estudio: Al_{0.48}In_{0.52}As, InP, Ga_{0.47}In_{0.53}As, los parámetros de red difieren en un valor menor al 0.1% y sus *brechas* de energía varían en el orden de 750 meV. Esta propiedad hace que estos materiales sean excelentes para la fabricación de pozos, por los reducidos efectos de estrés en las interfaces y la presencia de una discontinuidad en las bandas de valencia y conducción (*band-offset*) bien definida.

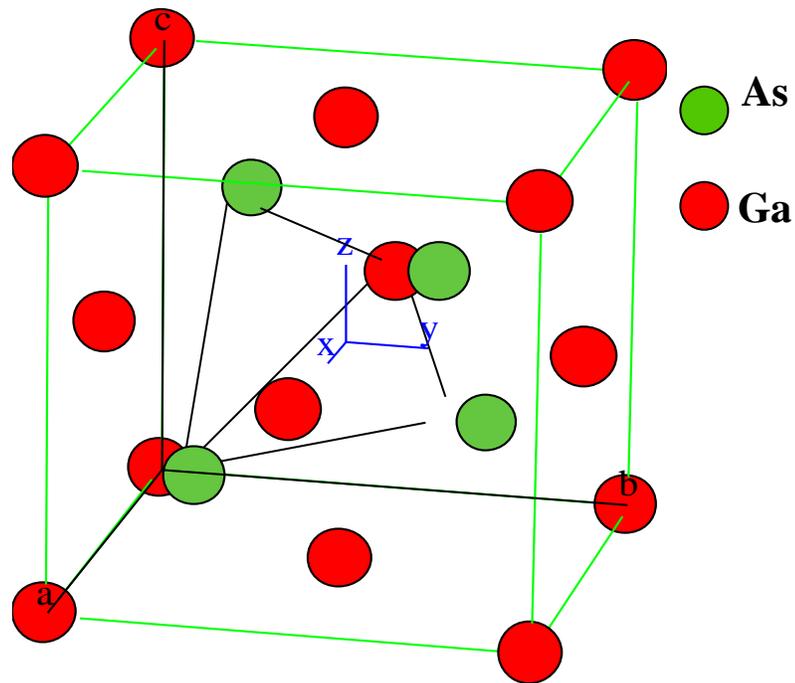


Figura 2. Estructura cristalina para los compuestos III – V. GaAs. a es el parámetro de red.

1.3. Construcción del Pozo Cuántico.

El pozo cuántico consta, de al menos, tres películas delgadas de materiales semiconductores. Su fabricación requiere por lo tanto una técnica que permita fabricar dichas películas con condiciones de homogeneidad y estequiometría bien controladas.

En la elección del sustrato y los materiales semiconductores que constituyen el pozo (ver figura 3) se deben tener en cuenta algunas condiciones, tal como se discute a continuación.

Para fabricar un semiconductor con estructura de pozo cuántico, el sustrato debe tener características como parámetro de red y coeficiente de dilatación térmica muy cercanos al de la película que se va a depositar.

Las tres capas semiconductoras que constituyen el pozo deben poseer una capa intermedia con una brecha de energía menor a las barreras, y con un *Band-offset* tal que las

bandas de valencia y conducción se puedan representar como se indica en la figura 3. Los parámetros de red entre cada una de las capas debe ser también similar para reducir los efectos de estrés en la interfase.

Las muestras que fueron estudiadas en este trabajo consistieron en multipozos de AlInAs/Ga_xIn_{1-x}As/AlInAs. La representación a escala de las bandas de valencia y de conducción para cada una de las tres películas, nos permite observar una discontinuidad entre las bandas de valencia y de conducción (Ver figura 3).

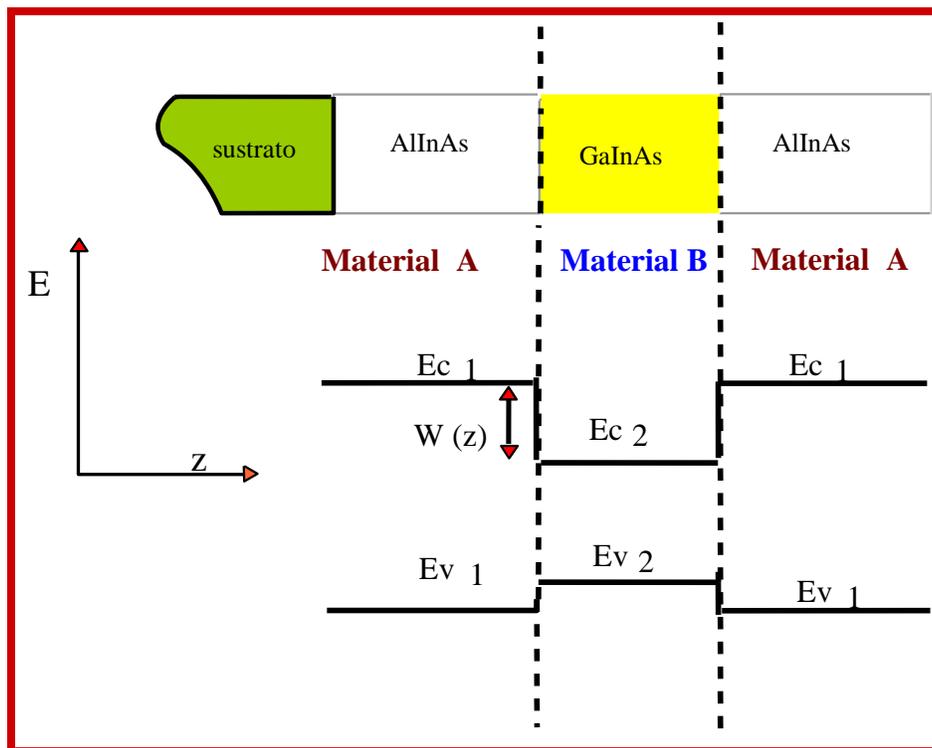


Figura 3. Representación del pozo cuántico en sus bandas de valencia E_v y conducción E_c en la proximidad de $k = 0$

1.4. La Morfología

Mediante microscopía de fuerza atómica, se realizó una evaluación de la morfología superficial de las muestras estudiadas. Las muestras tenían una superficie homogénea con crestas y valles bien marcados. Los anchos promedio de las islas fueron de 300 ± 25 nm y una altura promedio de 0.6 ± 0.2 nm. En la figura 4a se muestra una imagen típica de la superficie de las muestras.

Como el proceso de fabricación en cada una de las capas fue el mismo y para materiales similares supondremos, en adelante, que las características de la superficie corresponden a las características de cada interfase. En la figura 4b se muestra el perfil de la superficie, correspondiente a la línea blanca de la figura 4a. Este perfil muestra que en la superficie se presentan rugosidades del orden de 0.2nm.

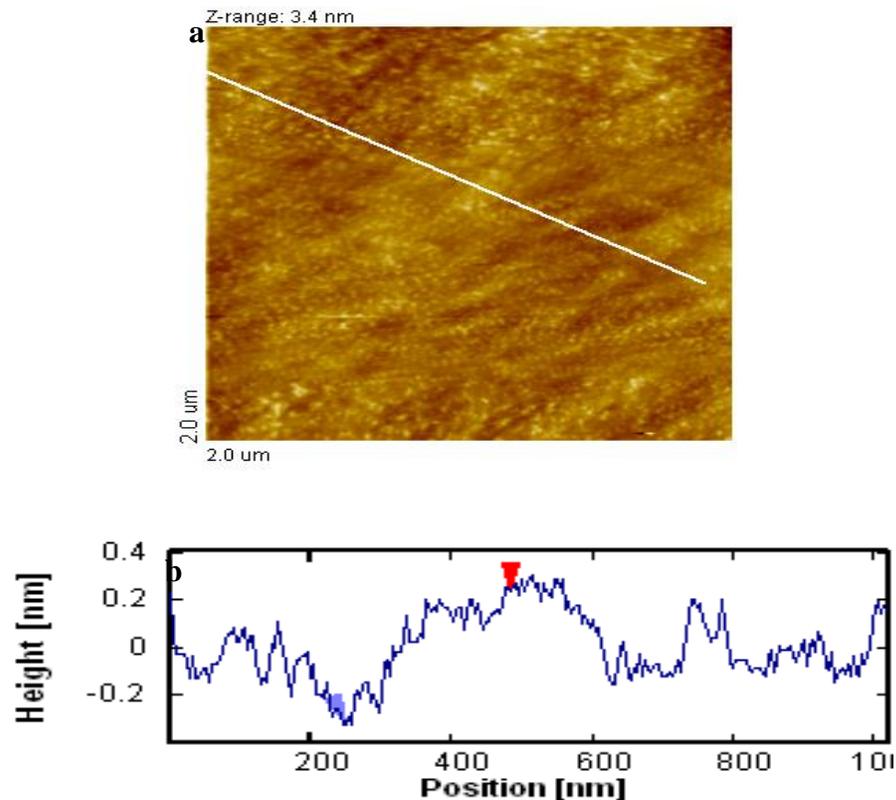


Figura 4a. Imagen de AFM. 4b. Perfil de altura a lo largo de la imagen de AFM

El origen de estas islas es explicado por el crecimiento tipo Stransky-Krastanov [25], en el cual el crecimiento es inicialmente capa-por-capa seguido por crecimiento tres dimensional, como se muestra en la figura 5. Por convención llamaremos z al eje de crecimiento.

1.4.1 La interfase

La rugosidad en las interfases de multicapas y superredes es de gran interés en el estudio de nuevos materiales y dispositivos nano y mesoscópicos, pues ejerce un efecto importante en las propiedades finales de estas estructuras.

Tanto en el exterior como en el país son múltiples los trabajos realizados en esta dirección[7,8,9,10]. Adicionalmente los efectos del sustrato y la presencia de dislocaciones han sido estudiados por diferentes autores[15,31].

La morfología superficial en cada una de las capas, será responsable de la variación del ancho del pozo, tal como se representa en la figura. 6. El color amarillo indica el material del pozo y el color blanco el material de las barreras. Como se observa, la presencia de islas en cada una de las capas resulta en anchos de pozo variable a lo largo del eje x . Estos anchos de pozo se representan por flechas rojas.

Como lo predice la teoría a cada ancho de pozo corresponderá un conjunto de valores propios de energía, de tal manera que a menor ancho de pozo, la energía del nivel inferior de confinamiento será mayor. Esta sencilla representación gráfica (figura 6) nos permite visualizar cómo la energía de recombinación dependerá de la posición del excitón dentro del pozo a lo largo de los ejes x e y .

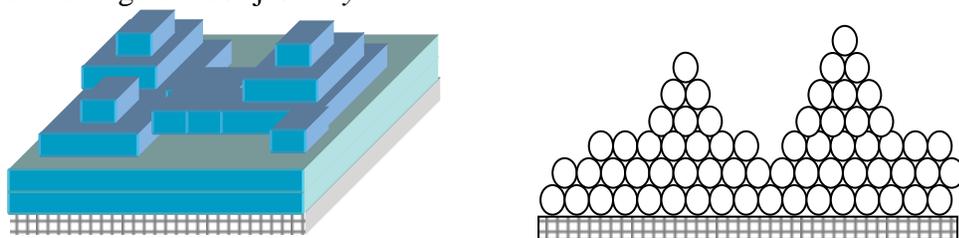


Figura 5. Esquema de crecimiento bidimensional, evidenciando la presencia de islas

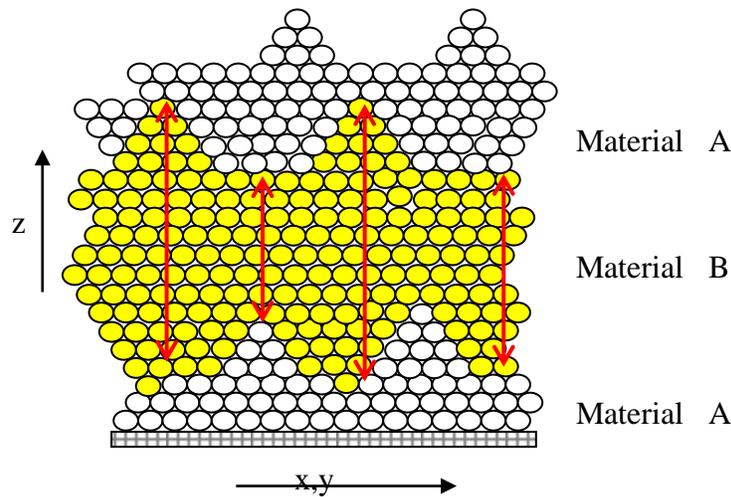


Figura 6. Efecto de la interfase entre las capas sobre el ancho del pozo

Uno de los parámetros más importantes evaluados a partir de las imágenes de AFM es la rugosidad. Como se afirmó anteriormente, la morfología superficial de cada una de las capas en un semiconductor, con estructura de pozo cuántico, es la responsable de la variación del ancho del pozo y a la vez, de estos anchos depende el conjunto de valores propios de energía, emitidos por el semiconductor por lo tanto, la evaluación de las rugosidades de estos semiconductores por diferentes métodos es de gran importancia.

1.4.2 La rugosidad

En esta sesión se presenta un método para evaluar las rugosidades, basado en un tratamiento estadístico de los datos que se obtienen, sometiendo las muestras a la observación por medio de un microscopio de escaneo por tunelamiento y haciendo medidas rigurosas de algunas de las variables observadas.

En el tratamiento estadístico se pueden obtener 22 parámetros, algunos de ellos válidos para cualquier imagen rectangular de $M \times N$ y otros relacionadas con transformaciones de Fourier cuya imagen es cuadrangular, es decir, con $M=N$.

Antes de calcular los parámetros de rugosidad, la práctica recomienda hacer una corrección de la pendiente por medio de un ajuste polinomial plano de segundo o tercer orden y como los valores de las rugosidades dependen fuertemente de las condiciones de medida, especialmente del rango de escaneo y de la densidad de la muestra, se considera importante incluir las condiciones de medida cuando se reportan los datos de rugosidades.

Algunos de los parámetros dependen de las definiciones de un máximo local y de un mínimo local. Un mínimo local está definido como un píxel en donde todos los ocho pixeles vecinos son más altos y un máximo local como un píxel en donde los anchos de los ocho pixeles vecinos son más bajos.

Como no hay pixeles por fuera de los bordes de la imagen de STM, no hay mínimos locales o máximos locales sobre los bordes. Los parámetros basados en los mínimos locales y/o máximos locales pueden ser más sensibles para esparcirse que otros parámetros.

Los parámetros están divididos en cuatro grupos:

A. Parámetros de amplitud.

Son seis parámetros que describen las propiedades de amplitud y que dan información acerca de las propiedades estadísticas promedio, la forma del histograma de distribuciones de las alturas y acerca de propiedades extremas. Todos los parámetros están basados sobre dos dimensiones estándar que son extendidas a tres dimensiones.

B. Parámetros híbridos.

Son tres parámetros híbridos. Estos parámetros indican los gradientes de inclinación y sus cálculos están basados en las inclinaciones locales de z.

C. Parámetros funcionales para la caracterización de la orientación y las propiedades de retención de fluidos.

Los parámetros funcionales para caracterizar la orientación y las propiedades de la retención de fluidos son seis y todos están definidos desde la curva de la razón del

área de la superficie orientada .

D. Parámetros espaciales.

Los parámetros espaciales son cinco. La densidad de cimas, la dirección de textura, la longitud de onda dominante y dos parámetros de índice.

Los parámetros de amplitud se refieren de manera directa a las variaciones en la altura $Z(x,y)$ de la interfase, por lo cual nos centraremos en estos parámetros para la evaluación de la rugosidad de las muestras:

1. **El promedio de rugosidades** definido como:

$$S_a = \frac{1}{MN} \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} |Z(x_k, y_l)|$$

2. **La raíz cuadrada de la media** definida como:

$$S_q = \sqrt{\frac{1}{MN} \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} (Z(x_k, y_l))^2}$$

3. **La altura Pico a pico** S_y , definida como, la diferencia de altura entre el píxel más alto y el píxel más bajo en la imagen:

$$S_y = Z_{maz} - Z_{min}$$

4. **La altura del punto 10** S_z definida como, el promedio de altura de los cinco máximos locales de mayor altura más el promedio de los cinco mínimos locales de menor altura.

$$S_z = \frac{\sum_{i=1}^5 Z_{pi} + \sum_{i=1}^5 Z_{vi}}{5}$$

Donde Z_{pi} y Z_{vi} son las alturas del i-ésimo local máximo de mayor altura y el i-ésimo local mínimo de menor altura respectivamente. Únicamente los máximos positivos y los

mínimos negativos son válidos. Cuando hay menos de cinco máximos válidos o menos de cinco mínimos válidos, el parámetro no está definido.

5. **El sesgo de superficie.** S_{sk} que describe la asimetría del histograma de distribución de alturas, y está definido como:

$$S_{sk} = \frac{1}{MNS_q^3} \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} Z^3(x_k, y_l)$$

Si $S_{sk} = 0$, la distribución de alturas es simétrica, por ejemplo, como una Gaussiana. Si $S_{sk} < 0$ puede ser una superficie inclinada con huecos y si $S_{sk} > 0$ puede ser una superficie plana con picos. Los valores numéricamente mayores que uno pueden indicar huecos o picos extremos sobre la superficie.

6. **La curtosis de superficies.** S_{ku} , que describe picos sesgados de la superficie topográfica, y se define como:

$$S_{ku} = \frac{1}{MNS_q^4} \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} Z^4(x_k, y_l).$$

Para distribuciones Gaussianas de alturas S_{ku} se aproxima a 3.0 cuando el número de pixeles se incrementa. Valores más pequeños indican distribuciones de altura más amplias y viceversa para valores mayores que 3.0.

1.5 Modelo teórico

El efecto del confinamiento de portadores de carga (electrones, huecos) en pozos cuánticos con interfases abruptas (lisas) ha sido estudiado a partir de métodos que van desde la integración numérica de la ecuación de Schrödinger hasta cálculos con el funcional de

densidad, pasando por cálculos perturbativos. En este aspecto diferentes grupos de investigación, en el país, han hecho contribuciones importantes[7,8,9,19]. El tratamiento teórico del confinamiento en presencia de interfases rugosas hasta donde nos es conocido, en nuestro medio y a nivel internacional, sólo ha sido considerado recientemente[18,19,20,36].

El estudio de la morfología de la interfase está ligado al comportamiento que el pico de PL presenta en el espectro de PL excitónico.

A continuación se presentan los principios físicos que rigen un pozo cuántico semiconductor y su caracterización a partir de un potencial efectivo. Los parámetros físicos que caracterizan al pozo cuántico semiconductor GaInAs/AlInAs son discutidos en este aparte. En el numeral **1.5.1** se presentan los principios físicos del pozo cuántico, en el numeral **1.5.2** se discute el modelo del electrón libre. En el numeral **1.5.3**, a manera de resumen, se discuten los principales parámetros de caracterización de un pozo cuántico a la luz de modelos teóricos.

1.5.1. Principios físicos del pozo cuántico

Como se observa en la figura 3, el pozo cuántico está constituido por una secuencia de semiconductores, en la cual un material intermedio tiene una brecha de energía menor a la de sus vecinos. Se dice que el pozo es ideal, cuando la interfase entre las capas es abrupta, es decir perfectamente lisa. En este caso la superficie que describe la interfase es un plano. Como se mencionó, por convención, la dirección de crecimiento de las capas que forman el pozo se define como el eje z y los planos de interfase como los planos $z = \pm L/2$ con L el ancho del pozo. Para $z \geq |L/2|$ se encuentra el material en bloque formando cada barrera. La interfase se denomina heterounión debido a que los materiales que componen las interfases son materiales semiconductores diferentes. Un electrón que se acerca a la heterojuntura, experimenta la acción de un potencial debido a la discontinuidad de las bandas de conducción de ambos materiales semiconductores, de manera análoga sucede con los huecos en la banda de valencia.

Para el pozo cuántico, uno de los principales parámetros físicos es la brecha de energía E_g entre las bandas de conducción y de valencia. Para el material de AlInAs la brecha de energía es $E_{g_1} \approx 1.45$ eV y para el material del pozo GaInAs se tiene el valor $E_{g_2} \approx 0.75$ eV a $T=300$ K. Como se observa de la figura 3, existe una discontinuidad en las bandas de conducción $\Delta E_c = E_{c1} - E_{c2}$ para los electrones y $\Delta E_v = E_{v1} - E_{v2}$ para los huecos. Estas discontinuidades determinan la profundidad del pozo en la capa central de GaInAs. Para el pozo considerado se tomó $\Delta E_g = E_{g1} - E_{g2} \approx 0.70$ eV.

Como se mencionó en la introducción, estamos interesados en el estudio de la respuesta radiactiva del pozo cuántico semiconductor GaInAs/AlInAs sometido al campo eléctrico de la radiación láser. El perfil espectral se expresa como[19,21]:

$$I(h\nu) \propto (h\nu - E_{ex})^{1/2} e^{(h\nu - E_{ex})/k_B T} \quad (1)$$

En esta relación $I(h\nu)$ es la intensidad o más genéricamente, una función proporcional al número de fotones, con energía $h\nu$, que se registran mediante un detector adecuado. Estos se deben a la recombinación de los electrones y huecos creados por la irradiación del pozo con el láser. El primer término describe la densidad de estados para excitones confinados en el pozo. Para la energía del excitón confinado en el pozo se tiene la expresión[22]

$$E_{ex} = E_g + E_h + E_e - E_{lig} \quad (2)$$

En donde E_g es la brecha de energía, E_h es la energía del hueco, E_e es la energía del electrón y E_{lig} es la energía de ligadura del excitón. Recordemos que E_h y E_e dependerán de la posición del excitón dentro del pozo.

La rugosidad en el pozo es otro de los parámetros que define sus propiedades físicas. La rugosidad de un pozo cuántico, como se mencionó en el numeral **1.4**, se origina en el proceso de crecimiento. Debido a que la distribución de las islas que originan la rugosidad es aleatoria, se tendrá una dependencia de la energía del excitón, con respecto a su posición dentro del pozo.

Si la energía del excitón dada por la relación (2) es conocida, mediante (1) es posible calcular la distribución espectral en función de la energía de los fotones o también de su longitud de onda.

En la relación (2) la brecha de energía E_g depende del material del pozo. Las energías E_e de los electrones en la banda de conducción así como la energía de los huecos en la banda de valencia, deben ser calculadas para el material en estudio. Esta tarea que se denomina cálculo de bandas exige el uso y desarrollo de complicados métodos numéricos, así como el uso de supercomputadores. La estructura de bandas que resulta de los cálculos describe la dependencia en momento de la energía, $E = E(k)$, de un electrón en la red iónica, cuando no existen otros portadores de carga en movimiento.

Antes de continuar se hace necesario, de acuerdo con el objetivo fijado en la introducción, precisar físicamente lo que se entiende por un sólido semiconductor, y en segundo lugar interpretar la dependencia $E = E(k)$ para sólidos semiconductores. Como se verá, la física empleada en el estudio de sólidos semiconductores es fácilmente transferible al caso de pozos cuánticos. En particular en el cálculo de bandas se presentan modificaciones debido al efecto del confinamiento en el pozo cuántico.

El comportamiento semiconductor hace referencia a la resistividad eléctrica del material. Esta propiedad fundamental en los sólidos se mide en $\Omega \cdot \text{cm}$ y muestra un rango de variación sorprendente. Así, por ejemplo, para muy buenos aislantes su valor es del orden de $10^{22} \Omega \cdot \text{cm}$ y para un metal puro, a bajas temperaturas, es del orden $10^{-8} \Omega \cdot \text{cm}$. Entre estos dos valores extremos se encuentran materiales para los cuales la variación va desde $10^9 \Omega \cdot \text{cm}$ a $10^{-3} \Omega \cdot \text{cm}$. Los materiales cuya resistividad se encuentra en este rango se llaman semiconductores. En un metal, los portadores de carga son los electrones que se mueven de manera libre a través de la red, es decir, sin interactuar con la red atómica (iónica). Para un aislante, los electrones de valencia están de alguna manera localizados en los sitios atómicos a los cuales pertenecen. Para materiales semiconductores cuya resistividad muestra valores entre los dos valores límites de aislantes y metales, se tienen un

comportamiento “cuasi metálico”. Esto significa que los portadores de carga interactúan de una manera característica con la red conservando el carácter de portadores de carga libres. La interacción anterior se expresa mediante un parámetro que tiene dimensión de masa. A este parámetro se le conoce con el nombre de “masa efectiva”. Esta masa efectiva es diferente a la masa real. La llamada masa efectiva puede ser mayor o menor que la masa del electrón. También puede ser negativa. Este parámetro está dado por la curvatura de la banda para los valores extremos de k en el espacio de las k ó espacio de momento. La masa efectiva es un parámetro medible y es conocida para los materiales empleados en este estudio.

1.5.2 El gas de electrones libres

La discusión anterior es demasiado cualitativa y por lo tanto no permite una explicación cuantitativa de los resultados experimentales relacionados con la conductividad. Un entendimiento cuantitativo del problema se logra a partir de la discusión de la relación $E = E(k)$ a partir del modelo de un gas de electrones libres.

Un gas de electrones libres en un sólido muestra un espectro de energía cuasi continuo. En el espacio de las k , la energía $E(k)$ está dada por la parábola $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2$. Para una red

cúbica de lado L se tiene: $E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ (3)

En esta relación k_x, k_y, k_z toma los valores $\frac{2\pi}{L} [0, \pm 1, \pm 2, \dots]$.

Lo anterior corresponde a una onda que transporta momento de acuerdo con la relación de De Broglie $p = \hbar k$. La función de onda electrónica o también el estado electrónico (caracterizado por el vector k) tiene la forma de una onda plana:

$$\psi \sim e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (4)$$

Esta aproximación es válida para metales en donde se tienen bandas semillenas.

A continuación introducimos el concepto fundamental de brecha en la banda de energía. La brecha o discontinuidad en el espectro de energía se introduce a partir de la reflexión de Bragg. La condición de reflexión de Bragg está dada por la expresión:

$$2d\sin\theta = n\lambda \quad (5)$$

y se expresa, para una red monoatómica unidimensional, con parámetro de red a (separación interatómica en la red) como:

$$2a = n\lambda \quad (5')$$

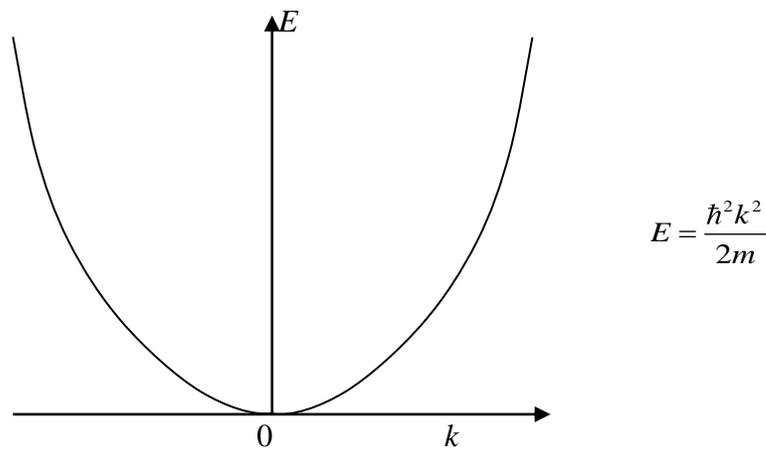


Figura 7. Espectro de energía para un gas de electrones libres.

Utilizando la relación entre k y λ ($k = \frac{\hbar}{\lambda}$) y la expresión para k dada en (5') se tiene que la primera reflexión ($n = 1$) ocurre en:

$$k = \pm \frac{\pi}{a} = \pm \frac{\pi}{a} \quad (6)$$

La región del espacio k comprendida entre los puntos $-\pi/a$ y π/a se conoce como la primera zona de Brillouin. En esta zona se tienen bandas continuas y se tendrá una discontinuidad en cada uno de los puntos (fronteras) antes señalados.

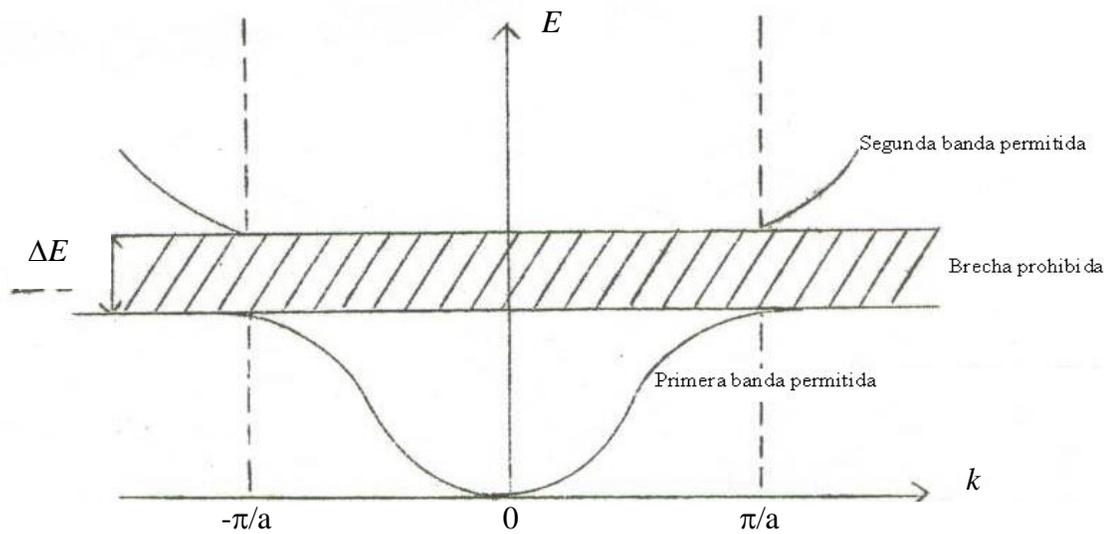


Figura 8. Energía en función de k para una red lineal monoatómica de constante de red a

De la discusión anterior es claro que la discontinuidad introducida por la reflexión de Bragg en el espectro de energía $E(k)$ crea un rango de energía permitido y también un rango de energía prohibido. La Figura 8 muestra de manera esquemática este comportamiento, para una red monoatómica lineal con constante de red a .

De este comportamiento se sugieren bandas completamente llenas por debajo de la brecha (por debajo de una cierta temperatura) y las cuales no aportan a la conducción del material. De manera análoga se tienen bandas completamente vacías por encima de la brecha prohibida, y aunque existen estados disponibles, no existe conducción, debido a la ausencia de electrones libres. Esto es típico para los aislantes. Su conductividad sólo se explica mediante la estructura de bandas en el sólido. La posibilidad de tener aislantes y

conductores perfectos depende del ancho de la brecha. Si la brecha es pequeña, los portadores de carga se pueden excitar de una banda completamente llena a una banda vacía. La excitación puede lograrse por métodos ópticos o métodos térmicos (para nuestro estudio la excitación será óptica). En este caso se puede crear un hueco en la banda inferior, el cual se comporta como un portador de carga. De esta manera se tiene conducción por medio de dos portadores de carga, los huecos (positivos) y los electrones (negativos).

La descripción anterior de un aislante a partir de la suposición de electrones que “permanecen más o menos localizados en sus respectivos sitios atómicos” no es suficiente.

Como consecuencia de la reflexión de Bragg, una onda que se propaga de izquierda a derecha (en el espacio k del punto $-\frac{\pi}{a}$ hacia el punto $+\frac{\pi}{a}$) cambia la dirección de propagación y se convierte en una onda que se desplaza, ahora, de derecha a izquierda. Esta onda experimenta nuevamente una reflexión en la otra frontera. Una repetición del proceso origina ondas estacionarias. Por esta razón para la función de onda o el estado electrónico se tienen dos soluciones independientes, las cuales se escriben de manera aproximada como:

$$\psi_1 \sim \sin \frac{\pi x}{a} \sim e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}} \quad (7a)$$

$$\psi_2 \sim \cos \frac{\pi x}{a} \sim e^{i\frac{\pi x}{a}} + e^{-i\frac{\pi x}{a}} \quad (7b)$$

Estas dos soluciones corresponden a dos valores diferentes de energía. Esto implica que para un mismo punto en el espacio recíproco existen dos valores diferentes de energía. En ese punto se dice que se tiene una degeneración.

La manera como se distribuyen las densidades de carga de los átomos que forman el sólido respecto del potencial del cascarón iónico (positivo), es un resultado específico de los cálculos de bandas. Este resultado establece que las densidades de carga se distribuyen de dos maneras respecto al potencial del cascarón iónico. De un lado la interacción

coulombiana localiza el máximo de la densidad de carga en el punto intermedio entre dos átomos de la red, y de otro lado la interacción coulombiana coloca el máximo de la densidad de carga en la vecindad inmediata de uno u otro átomo. Aunque hemos venido trabajando en una aproximación de electrón libre y solo hemos considerado la energía cinética de los electrones, vamos a continuación a mostrar cómo es que en esta aproximación de electrón libre se presenta el resultado específico del cálculo de bandas antes mencionado. Para tal fin consideramos la distribución de la densidad de carga calculada a partir de las funciones dadas en (7b) y por la onda plana.

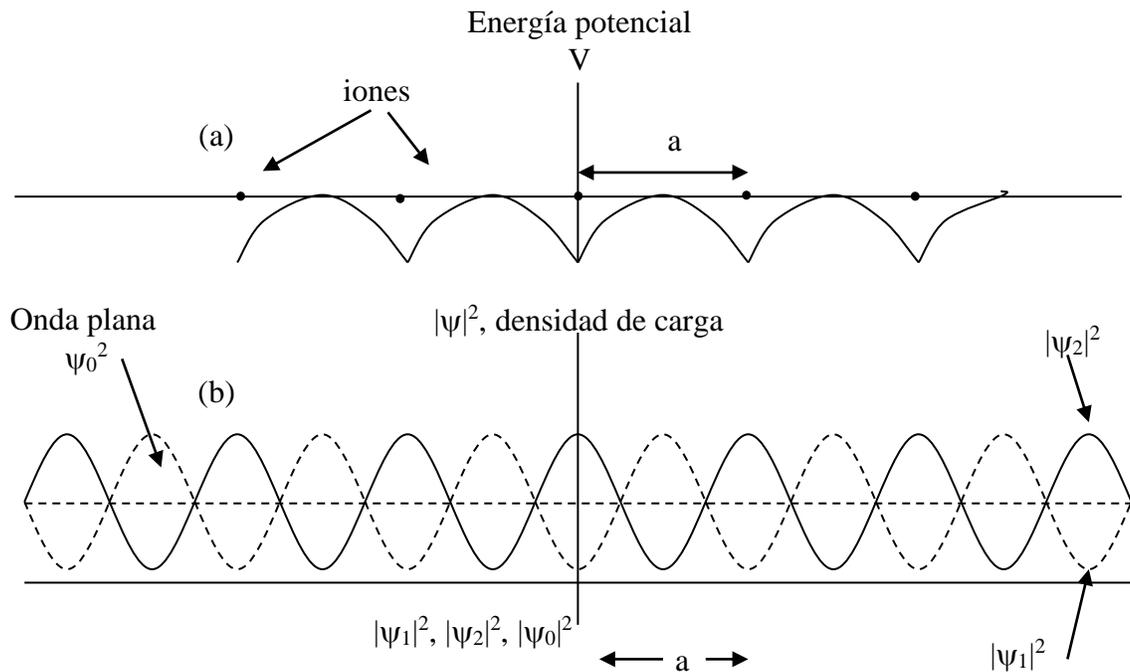


Figura 9(a). Variación de la energía potencial de un electrón de conducción en el campo de cascarones positivos de una celda lineal monoatómica. (b) Distribución de probabilidad de densidad en la red.

En la Figura (9a) se muestra la variación de la energía potencial de un electrón de conducción en el campo positivo de los cascarones iónicos para una red lineal

monoatómica. En la figura (9b) se muestra la distribución de la densidad de carga en la red de la Figura (9a).

En la figura (9b) se observa que la densidad de carga $|\psi_1|^2$ tiene sus máximos entre dos átomos, mientras que en el caso de $|\psi_2|^2$ los máximos se encuentran en los sitios en donde están localizados los átomos. En el caso de $\psi_0 = e^{ikx}$, la densidad de carga se distribuye uniformemente en el espacio. La explicación del por qué este modelo de electrón libre, que solo considera la energía cinética de los electrones y no la energía potencial, presenta la propiedad específica del cálculo de bandas, radica en el fenómeno de la reflexión de Bragg. Para valores de k fuera de las fronteras de la región, la función de onda es una onda plana. Sin embargo a medida que la frontera se aproxima a cada uno de los lados, la reflexión de Bragg se hace importante, y se tendrá una mezcla creciente de ondas de tipo $\exp(i(\mathbf{k} - 2\pi/a)\mathbf{X})$. De esta manera en las fronteras de la región se tienen ondas estacionarias (estáticas). Lo anterior significa que se tienen dos maneras de distribuir, alrededor del potencial del cascarón positivo, las densidades de carga de los átomos que constituyen al sólido. Se tiene una interacción coulombiana que localiza el máximo de la densidad de carga entre dos átomos, y otra que coloca la densidad de carga cercana a un átomo o al otro.

Es importante señalar que existen otras aproximaciones, entre otras, la denominada de “enlace fuerte”. Esta aproximación es conocida como “*Tight Binding Approximation*” [23]. Esta aproximación es opuesta a la de “electrón libre” en el sentido en que para obtener la estructura de bandas ahora se consideran de manera explícita los átomos que forman la red. A continuación se presentan los elementos de esta aproximación desde un punto de vista didáctico.

Primero se considera la red construida a partir de átomos libres, los cuales en un comienzo se encuentran bien separados. Para mejor entendimiento del problema, consideramos que la red está formada por átomos de hidrógeno. En principio cualquier átomo puede ser comparado con el átomo de hidrógeno, formado por un protón y un electrón. En este caso el

casarón iónico positivo del cual se habla en la aproximación de electrón libre, es el protón y además se tiene un electrón extra. Si se comienza con dos átomos bien separados, cada átomo tendrá, en su propio sitio, el máximo de la distribución de la densidad de carga derivada de su función de onda Ψ . Ahora construimos la red. Para ello acercamos cada vez más los átomos hasta que construimos la red y nos preguntamos ¿qué sucedió? En este proceso se puede presentar la situación en donde las funciones de onda se suman

$\psi = \psi_A + \psi_B$, y la otra contribución será la de tomar la contribución positiva de la una, y la contribución negativa de la otra, lo cual corresponde a la situación $\psi = \psi_A - \psi_B$. La figura 10 ilustra este proceso.

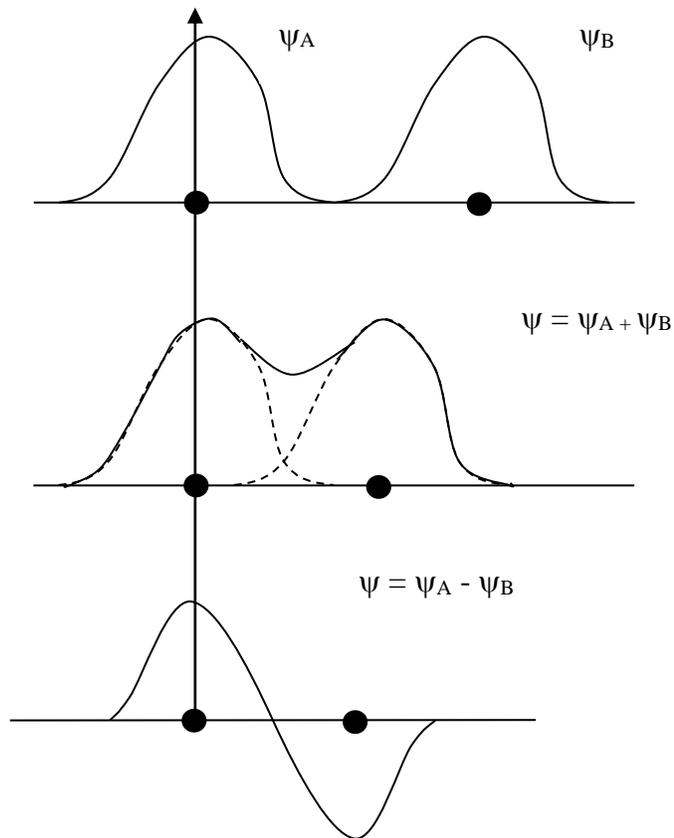


Figura 10. Representación gráfica de la construcción de la red por medio del acercamiento de los átomos

Las energías correspondientes a los dos casos son diferentes, la primera con menor energía, ya que en este caso el electrón permanece algún tiempo en la mitad de los dos átomos. El electrón se encuentra en este sitio debido a la atracción que los dos protones ejercen sobre él, y por lo tanto, su energía de ligadura disminuye. En el segundo caso la probabilidad de encontrar el electrón en la región intermedia de los dos átomos desaparece y por consiguiente, la cuestión de energía de ligadura extra no tiene caso. De esta manera se tienen dos valores diferentes para la energía en el mismo punto del espacio recíproco. Considerando N átomos se tendrán N niveles de energía diferentes. Y si además consideramos que hay 2 estados posibles para el espín de cada átomo, entonces se tendrán $2N$ posibles estados en el sólido. En resumen, cuando se representa la energía como una función de la distancia, a distancias grandes se tienen estados atómicos. Todos los átomos independientes tendrán el mismo espectro de energía. Cuando acercamos los átomos se presenta un desdoblamiento en una serie de bandas de energía Figura 11.

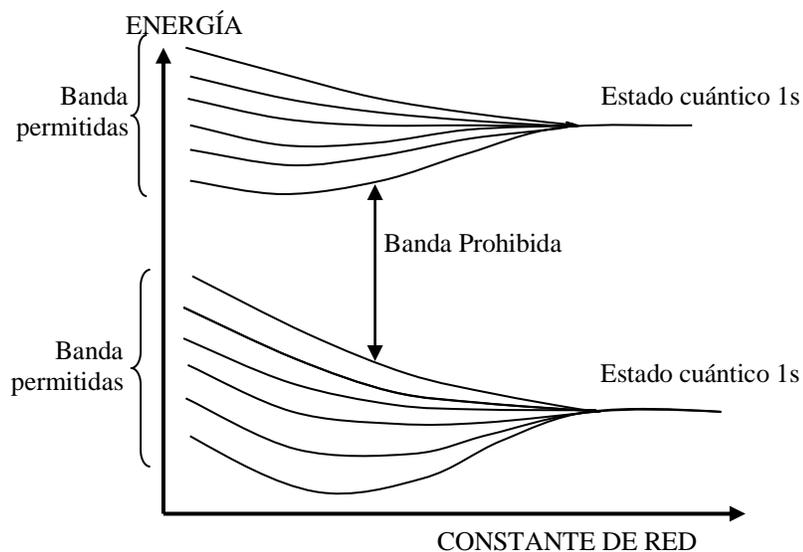


Figura. 11. Desdoblamiento de los niveles de energía de la constante de red.

La figura anterior muestra la existencia de un rango de energías en donde el sistema no tiene valores propios. Esta es la brecha prohibida. Es decir, se tiene un rango con estados continuos de energía. Esas son las bandas de energía que caracterizan un sólido. Esta aproximación de ligadura fuerte, describe de manera adecuada semiconductores y aislantes. Es importante anotar, que el valor particular al cual ocurre la discontinuidad en el espacio k no depende de la aproximación que se use para calcular ésta energía, depende esencialmente de la simetría del cristal. Esta es la razón por la cual se tienen que considerar las propiedades de simetría de la red y encontrar las separaciones de la energía en puntos de alta simetría. La separación de la energía es una propiedad general del grupo espacial de la estructura cristalina.

No sería muy didáctico terminar este aparte sin considerar los tipos de bandas que se esperan de acuerdo con la posición de los átomos en la tabla periódica de los elementos.

Para tener bandas semillenas se requiere una celda unitaria con un número impar de electrones. Esto significa que los elementos monovalentes Li, Na, K del grupo I, al igual que los metales nobles, Cu, Au, Ag serán buenos conductores, y exhibirán un comportamiento metálico. Los átomos del grupo III tendrán también algunas propiedades metálicas, pero cuando cristalizan en una estructura con dos átomos por celda unitaria, tenemos un número par de electrones en la celda unitaria, y en este caso serán más bien aislantes.

Continuando con el grupo IV se tienen 4 electrones de valencia. Ellos cristalizan con dos átomos por celda unitaria, y como veremos serán semiconductores o aislantes que tienen bandas llenas o vacías. La brecha decrece del carbón al plomo. Así, por ejemplo, el carbón con estructura de diamante con brecha de 6 eV, es un buen aislante, el silicio con una separación de 1,1 eV es un buen semiconductor y el germanio con una brecha de 0.7 eV es un buen semiconductor. El estaño cristaliza en dos tipos: uno metálico y otro

semimetálico, y el plomo es un metal. De esta manera dentro del mismo grupo tenemos todos los tipos de comportamiento, desde metal hasta aislante.

Los compuestos que se forman con los átomos de los grupos III-V muestran una situación bien diferente cuando se comparan a los del grupo IV, pero también se tienen semiconductores. La diferencia esencial radica en el hecho de que los estados 3s y 3p en el silicio y 4s y 4p en el germanio están hibridizados, formando enlaces tetraédricos con el cual se forma una red de tipo zinc-blenda como la mostrada en la figura 2.

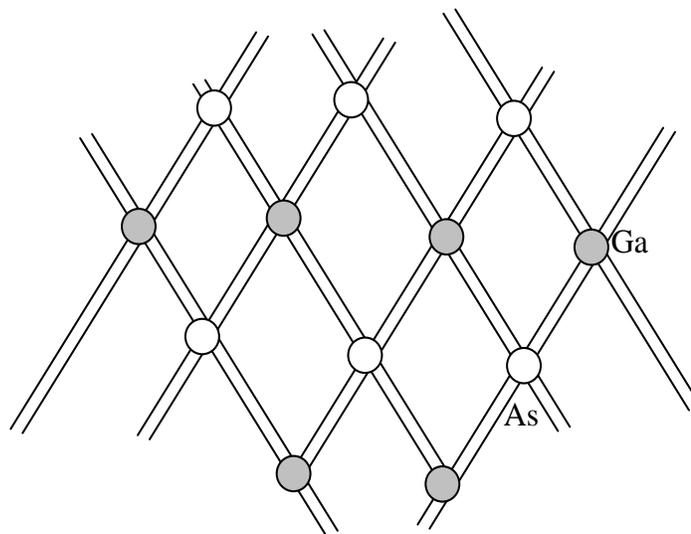


Figura. 12. Diagrama plano de una red de GaAs

En este caso la máxima distribución sucede alrededor de los átomos, pero la función de onda pertenece a la red como un todo y no a los átomos aislados como sucede típicamente. Los cuatro electrones de enlace, los cuales se distribuyen entre vecinos, tienen distribución de la función de onda sobre toda la red, de tal manera que la distribución máxima sucede alrededor de los átomos de carbono. Esto origina una red completamente homopolar, es decir, una situación en la cual todos los electrones participan con el respectivo electrón de valencia del átomo más vecino. Cuando formamos una red de un compuesto que contiene

átomos de los grupos III-V, por ejemplo, GaAs (Figura 12). se tiene una situación análoga, con Ga y As alternando.

Se tiene, en un lado, 3 electrones de valencia y 5 en el otro. Se ha comprometido el número correspondiente de electrones de valencia (número par), pero se tiene una carga extra la cual polariza la red. Esto origina una clase de red polar, lo cual no es una red iónica típica. Este tipo de red polarizada se nota más en los compuestos II-VI, por ejemplo, ZnS o CdSe. Para los grupos I-VII se tiene cristales iónicos puros. En este caso, no se tiene hibridación, y se tienen enlaces bien separados. Estos especifican los estados atómicos.

Finalmente recalamos la importancia del parámetro de red. Por ejemplo, si consideramos el parámetro de red de los primeros tres átomos del grupo IV se tiene para el carbón un parámetro de red 0.356 nm, para el Silicio 0.542nm y para el Germanio 0.562nm. Aquí se observa que mientras este parámetro crece, la brecha decrece. Los cálculos actuales consideran la corrección spín-órbita, la cual, por ejemplo, en compuestos como el InSb (Antimonuro de Indio) es del orden de 0.9 eV, mientras que la energía de brecha es del orden de 0.2 eV. De igual manera para compuestos de átomos pesados, los cálculos consideran correcciones relativísticas. El modelo anterior brinda, a pesar de su sencillez, una imagen muy aceptable de la estructura de bandas. Los modelos más sofisticados parten de soluciones de la ecuación de Schrödinger de los portadores de carga en un potencial periódico para los iones en la red. La figura 13 muestra un esquema de una estructura de bandas obtenida a partir de dichas soluciones en el caso del GaAs.

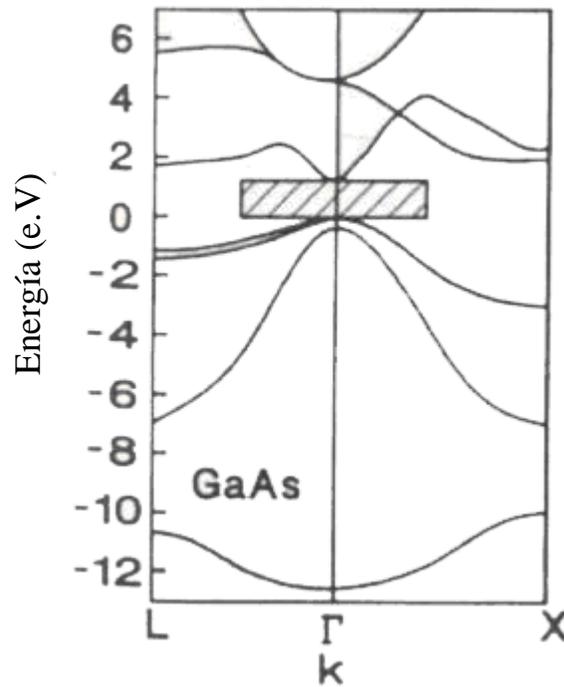


Figura 13. Estructura de bandas del GaAs[23]

En esta Figura se identifican dos tipos de bandas: Bandas de conducción que consisten de estados vacíos y bandas de valencia que consisten de estados ocupados. El GaAs es un ejemplo de un semiconductor de brecha directa. Es decir el mínimo de la banda de conducción, y el máximo de la banda de valencia se dan para el mismo valor de k . Como se representa en la Figura 14.

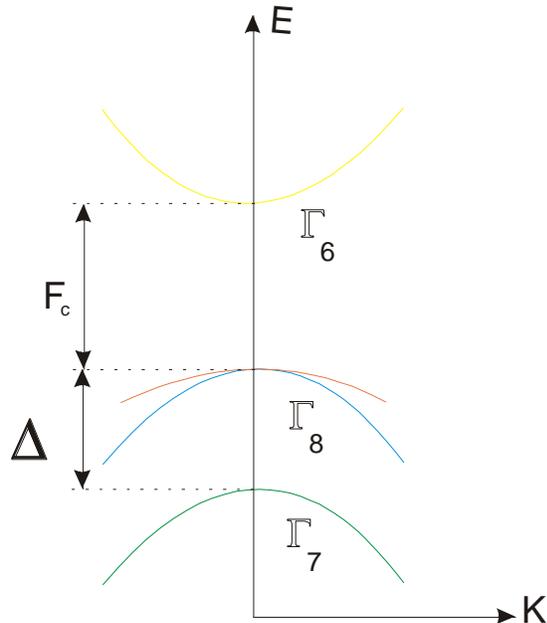


Figura 14. Diagrama de bandas de energía en un compuesto III - V cerca del centro de la primera zona de Brillouin

El borde superior de la banda de valencia corresponde al centro de la primera zona de Brillouin, llamado punto Γ . (Ver, Figura 14.)

Si las bandas extremas ocurren a valores diferentes de k , entonces se dice que el semiconductor es de brecha indirecta. La mayoría de los compuestos III-V, y II-VI son materiales de brecha directa. Los compuestos del III-V por ejemplo AlAs, son de brecha indirecta así como el Si y el Ge del grupo IV. La parte sombreada en la figura 13 hace referencia a la región de interés para las transiciones ópticas, cuyas frecuencias pueden estar en el visible o en el infrarrojo cercano. En la figura 13, también se muestran los puntos de alta simetría en la primera zona de Brillouin; Γ , X y L; en donde el punto Γ está en el centro de la zona de Brillouin. Generalmente se tienen numerosas bandas con formas asimétricas y varios máximos y mínimos de energía. Afortunadamente, en el caso de transiciones ópticas, sólo es necesario considerar una porción pequeña de la estructura de bandas, tal como se muestra en la figura 13 (la parte sombreada). Esta simplificación se puede hacer por dos razones, la primera se debe a que se tienen transiciones directas, esto

es, el momento del estado electrónico inicial es el mismo del estado final. Debido a la conservación del momento, la diferencia de momento del electrón en la transición, debe ser igual a la del fotón involucrado en la transición. El momento del fotón es:

$$\hbar k = \frac{\hbar \nu n}{c} \quad (8)$$

en donde $\hbar \nu$ es la energía del fotón, k es la magnitud del vector de onda del fotón, c es la velocidad de la luz y n es el índice de refracción.

Para el caso del GaAs utilizando los siguientes valores numéricos ($\hbar \nu \approx 1.4$ eV, $n \approx 3,6$ y con los valores conocidos de las tablas para \hbar y c) se tiene para k , de (8):

$k \approx 2.54 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, lo cual es despreciable en la escala de la estructura de banda electrónica, en donde, en la zona de Brillouin, se tiene aproximadamente 10^{10} m^{-1} . Por esta razón se puede considerar sólo una región de la estructura de banda alrededor del mínimo de la brecha de la banda, en donde sólo ocurren transiciones ópticas. Si la región de interés es lo suficientemente pequeña (estrecha) entonces es razonable aproximar la energía de las bandas en esta región por una función cuya dependencia en k sea simétrica y de forma parabólica. Si no existe una interacción con un campo electromagnético, o calentamiento, así como dopado con átomos extraños, las bandas de valencia del semiconductor están completamente llenas y la banda de conducción está vacía, y en tal caso no hay corriente (no existen electrones libres moviéndose en sus bandas respectivas).

A continuación vamos a discutir la estructura de bandas para el caso de electrones no excitados, para lo cual se considera una porción pequeña de la estructura, y se usa la aproximación de masa efectiva. En este caso se tiene para la banda de conducción y para la banda de valencia, las expresiones parabólicas:

$$E_{ck} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} + E_{g0} \quad (9)$$

$$E_{vk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_v} \quad (10)$$

Donde m_c y m_v son las masas efectivas de los electrones en la banda de conducción y de valencia, respectivamente. E_{g0} es la brecha de la energía en ausencia de electrones excitados. Esta estructura se muestra esquemáticamente en la siguiente figura. Las energías cinéticas del electrón E_{ek} y del hueco E_{hk} se miden a partir de sus bordes de banda respectivos, con la energía del electrón creciendo en la dirección ascendente, y para el hueco en la dirección descendente. μ_e y μ_h son los potenciales químicos de quasi-equilibrio.

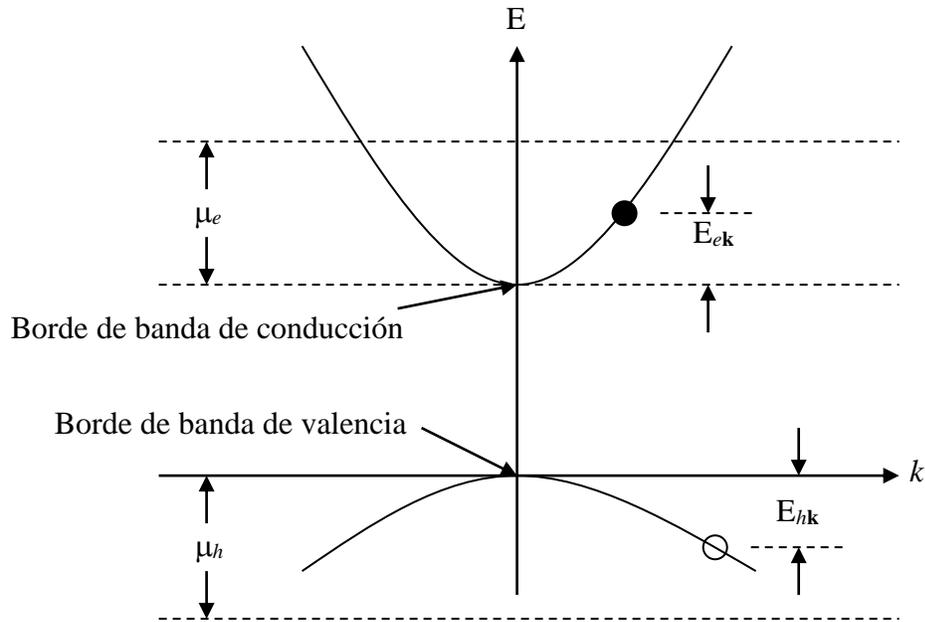


Figura 15. Modelo de dos bandas para un semiconductor de brecha directa.

Como se mencionó anteriormente, las masas efectivas se definen como el inverso de la curvatura de las bandas[24]:

$$\frac{1}{m_i} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E_{ik}}{dk^2} \frac{d^2 E_{ik}}{dk^2} \Big|_{k=0}, \quad i = c, v \quad (11)$$

Como consecuencia de la curvatura negativa de la banda de valencia, se tiene m_v negativa, y m_c positiva.

El caso que nos interesa es el de un electrón de la banda de valencia que es excitado mediante absorción de luz, hacia la banda de conducción, caso en el cual se origina un hueco en la banda de valencia (ausencia de un electrón). Si inicialmente todos los estados en la banda de conducción están vacíos, entonces, una vez excitado el electrón se presenta una corriente originada en el electrón que fluye en la banda de conducción, y este electrón excitado se constituye en el portador de carga. De manera análoga un electrón en la banda de valencia se puede mover hacia el hueco, ocasionando un movimiento del hueco y de esta manera el hueco se comporta como un portador de carga positiva y de magnitud e .

Para una transición óptica, la energía de transición asociada al portador de carga con momentum k está dada por:

$$\hbar\omega_k = E_{ek} + E_{hk} + E_{g0} \quad (12)$$

donde la energía del electrón y del hueco están dadas por:

$$E_{ek} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad \text{y} \quad E_{hk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} \quad (13)$$

con m_e y m_h masas efectivas del electrón y el hueco, respectivamente. La masa del electrón m_e es igual a m_c . En esta imagen de electrón – hueco para el semiconductor, la energía del hueco se debe pensar como la energía de la banda de valencia completamente llena, menos la energía de la banda de valencia con un estado electrónico vacante. En este caso un incremento en el momento del hueco conduce a un incremento en la energía del hueco. Por lo tanto, mientras que la masa efectiva del electrón en la banda de valencia es negativa, la masa efectiva del hueco es positiva. La relación entre m_h y m_v requiere considerar la interacción coulombiana entre los portadores, la cual es naturalmente diferente para una banda de valencia completamente llena, y para una banda de valencia con una vacancia.

Las energías de resonancia para transiciones ópticas pueden ser cambiadas por la energía coulombiana la cual, para bajas densidades de carga, conduce a la creación de excitones. En este caso, la atracción coulombiana puede ligar un electrón excitado y un hueco, formando de esta manera un par ligado, el cual tiene una vida media finita y es análogo a un átomo de hidrógeno, y se denomina excitón. La vida del excitón termina cuando se presenta la recombinación electrón – hueco, la cual transfiere la energía del excitón a través de fotones. Este fenómeno se conoce como recombinación radiativa. También esta energía puede ser transferida a la red, o a las impurezas presentes en el semiconductor, caso en el cual se habla de recombinación no-radiativa.

Para efectos de visualizar la analogía con el átomo de hidrógeno, el cual está formado por un protón y un electrón, se considera la masa del protón reemplazada por la masa reducida del electrón y el hueco. Del modelo de Böhr para el átomo de hidrógeno se tiene el radio de Böhr para el estado del excitón más bajo (de mínima energía):

$$a_0 = \frac{\hbar \epsilon_b}{e^2 m_r} \quad (14)$$

La energía de Rydberg para el estado base del excitón será:

$$E_R = \frac{\hbar}{2m_r a_0} = \frac{e^4 m_r}{2\epsilon_b \hbar^2} \quad (15)$$

en donde ϵ_b es la constante dieléctrica del fondo y m_r es la masas reducida electrón –hueco dada por:

$$m_r = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h} \quad (16)$$

o también:
$$m_r = \frac{2\epsilon_b^2 \hbar^2 E_g}{e^4}$$

Al comparar los radios del GaAs con $a_0 = 12,4\text{nm}$ y del átomo de H con $a_0 = 0,05\text{nm}$ y $E_R = 4.2\text{ meV}$, el cual es muy inferior al valor que se obtiene para el átomo de hidrogeno,

que es del orden 13.6 eV, y más pequeño que la energía térmica a la temperatura del medio ambiente, la cual es del orden de $k_B T = 25$ meV.

La importancia del excitón en la física de semiconductores depende de la comparación de a_0 con la distancia promedio entre pares de electrón-hueco, y de la comparación con la longitud de apantallamiento, así como de la comparación de E_R con $k_B T$. La longitud de apantallamiento es una medida de qué tan efectivo es el apantallamiento de la interacción coulombiana entre dos portadores debido a la presencia de los otros portadores de carga. A medida que la densidad de carga aumenta (debido a la absorción óptica, por ejemplo), el potencial de Coulomb se ve más apantallado, y para densidades altas los excitones están completamente ionizados. De manera similar cuando la densidad aumenta la separación promedio entre partículas decrece, lo cual conduce a una superposición de los electrones y huecos en los excitones. Como los electrones y los huecos son fermiones, cada estado cuántico no puede estar ocupado por más de una partícula (principio de exclusión de Pauli). Debido a este principio, electrones diferentes, (y huecos) compiten por puntos disponibles en el espacio de fases. La ocupación de los estados en el espacio de fase reduce la atracción electrón – hueco, de manera similar al apantallamiento. Este fenómeno debe ser tratado dentro de una teoría de N- cuerpos.

Otra consideración importante, es la de que todas las bandas completamente llenas que están por debajo de los estados excitados, no contribuyen directamente a las transiciones ópticas en el rango de las frecuencias pertinentes. En nuestro caso nos limitamos a transiciones ópticas con frecuencias en el rango del infrarrojo.

CAPITULO II

PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

2.1. Montaje experimental

2.1.1 Sistema de Fotoluminiscencia

Para obtener los espectros que permiten estudiar la información óptica de películas de materiales semiconductores, en este caso, con estructura de pozo cuántico, se empleó el equipo de Fotoluminiscencia (PL) que se encuentra en el Instituto Interdisciplinario de las Ciencias de la Universidad del Quindío y con el cual se pueden realizar mediciones en diferentes zonas del espectro electromagnético. La siguiente figura muestra el diagrama para el sistema de PL.

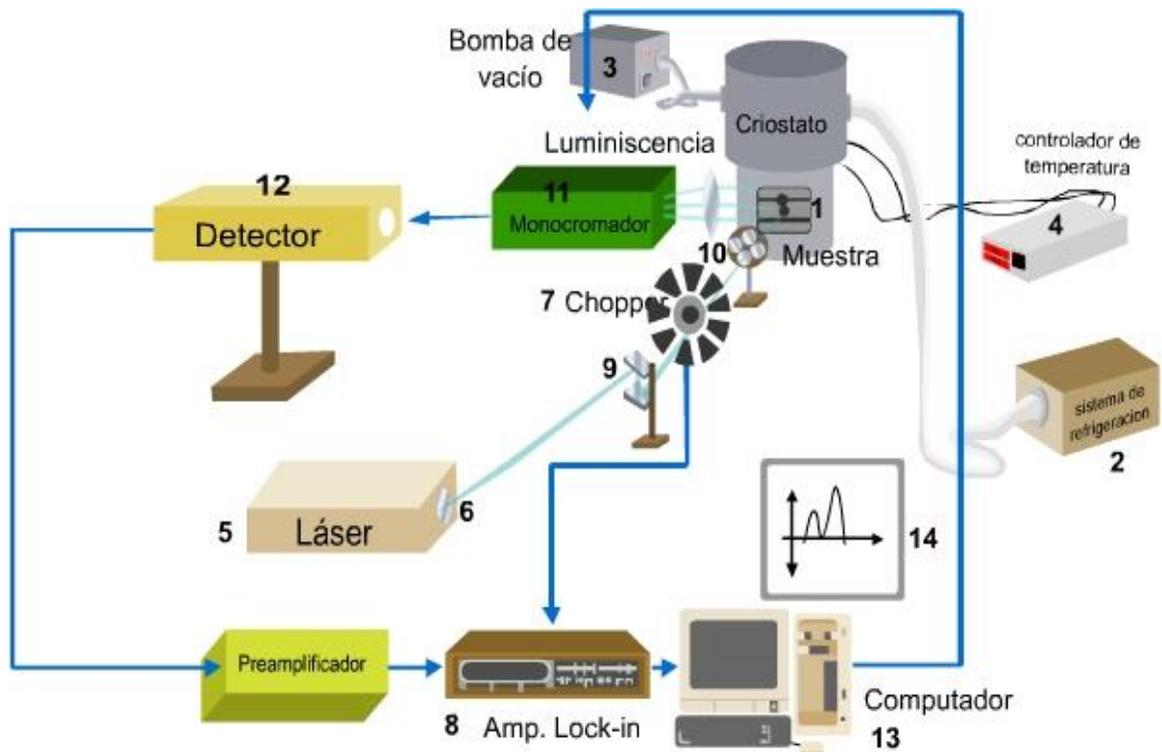


Figura 16 Sistema de fotoluminiscencia

Para el desarrollo de este trabajo, fue necesario adecuar el sistema de PL para trabajar en el infrarrojo. La adaptación consistió, fundamentalmente, en el cambio de algunos elementos del equipo de PL, tales como la rejilla de difracción, los filtros pasa-altos a la entrada y salida del monocromador y el detector, cuyos rangos de trabajo se encontraban situados en la región visible del espectro electromagnético, por otros que funcionaran en el rango del infrarrojo ($1000 \text{ nm} < \lambda < 10000 \text{ nm}$).

El portamuestras 1 está ubicado sobre el dedo frío de un crióstato Apd Cryogenics, con circuito cerrado de Helio líquido 2 que permite bajar temperaturas hasta 10K. El aislamiento del sistema de refrigeración con el medio ambiente se obtuvo haciendo vacío con una bomba mecánica 3 que alcanza presiones hasta 10^{-3} Torr. Este valor es detectado por medio de un medidor de presión Pirani.

El sistema cuenta con un controlador de temperatura Lake Shore 4 que posee dos sensores de diodo de silicio y un calefactor.

Las diferentes muestras de GaInAs/AlInAs, con estructura de pozo cuántico, fueron excitadas con un haz de luz láser de 488 nm 5 obtenido de un láser de Argón LEXEL 95, el haz se hace pasar a través de un filtro 6 de interferencia situado a la salida del láser con el objeto de hacerlo más monocromático y reducir su frecuencia. Luego este haz monocromático es interrumpido mecánicamente mediante un interruptor mecánico (*Chopper*) 7, de tal manera que su frecuencia se acopla a la de un amplificador 8 Lock-in Eg&G Princeton 5210, con el fin de eliminar todas las señales que no correspondan a las que emite la muestra en estudio.

Un juego de espejos planos 9 permite direccionar el haz de modo que incida sobre la muestra, pasando primero por una lente cilíndrica que tiene como función la de disminuir la concentración del láser que llega a la muestra para evitar su calentamiento.

Una vez conseguida la incidencia del haz sobre la muestra se procede a ubicar la señal de PL, moviendo el crióstato de tal manera que la reflexión originada por el haz incidente

sobre la muestra no entre al monocromador, mientras que la señal de PL lo haga perpendicularmente al mismo.

Se utilizaron lentes 10 para la focalización de la respuesta fotoluminiscente sobre la entrada de un monocromador 11 Spex 500M. En esta entrada se ha colocado, con anterioridad, un filtro pasa-altos destinado a eliminar todas las señales que estén por debajo, en longitud de onda (λ), de la señal emitida por la muestra y provenientes del medio y del mismo láser.

La señal de PL que entra al monocromador es conducida a una rejilla de difracción de 600 líneas/mm y un máximo de difracción (blaze) en $1\mu\text{m}$, esta rejilla permite descomponer el haz policromático de PL emitido por la muestra en haces monocromáticos, los que dependiendo de la posición de la rejilla son “observados” (detectados) por el detector. El barrido le permite al detector “ver” las señales que están presentes en un determinado rango de longitudes de onda.

El detector 12 utilizado es de Arseniuro de Indio (InAs), el cual no requiere de refrigeración y cuyo rango de trabajo está entre $1.0\mu\text{m}$ y $3.5\mu\text{m}$.

La señal del detector se lleva a un amplificador Lock-in, el cual está sintonizado a la frecuencia de corte del cortador mecánico, 83 Hz.

La información es procesada en un PC 13 obteniéndose un espectro de intensidad de la señal luminiscente en función de la energía del fotón o de su longitud de onda 14.

2.1.2 Microscopio de Fuerza atómica

Las superficies de las muestras fueron sometidas a un barrido con un microscopio de fuerza atómica cuyo esquema general ha sido representado en la figura 17.

El principio básico de la microscopía por fuerza atómica[12] es la interacción atractiva y repulsiva entre los átomos de la superficie en estudio y los átomos de la punta de una sonda

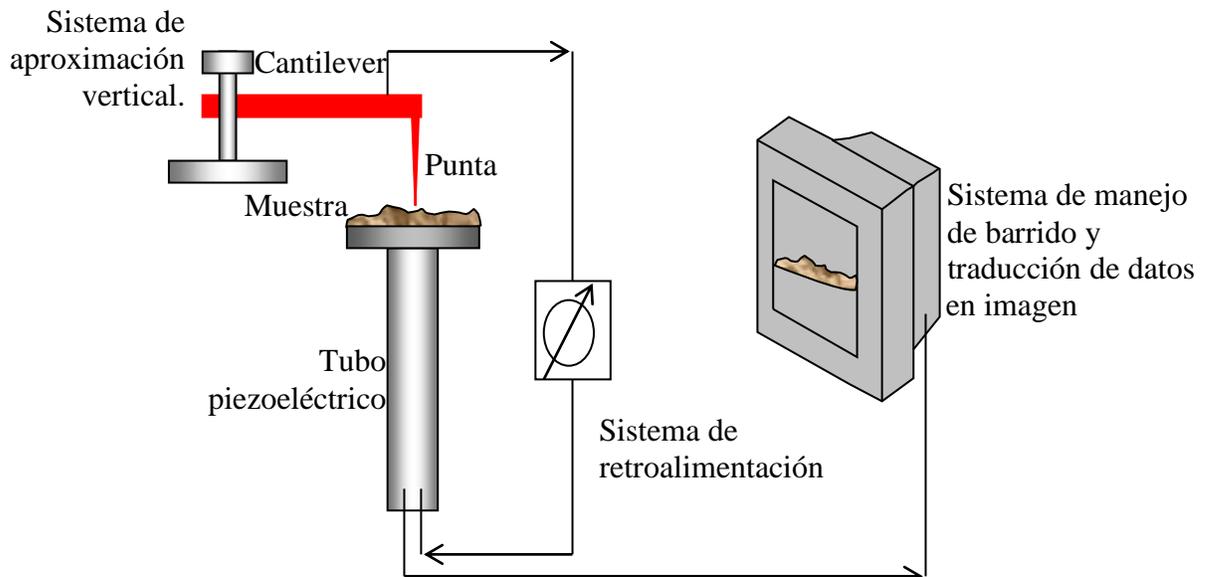


Figura 17 Componentes generales en un AFM

soportada en uno de los extremos de un *cantilever* de Silicio. Esta interacción depende de la distancia entre la punta y los átomos de la superficie estudiada. Su representación gráfica se indica en la figura 18. El *cantilever* presenta tres tipos de movimiento: flexión longitudinal, torsión longitudinal y torsión transversal y cualquier cambio en el *cantilever* está originado por la combinación de estos tres movimientos.

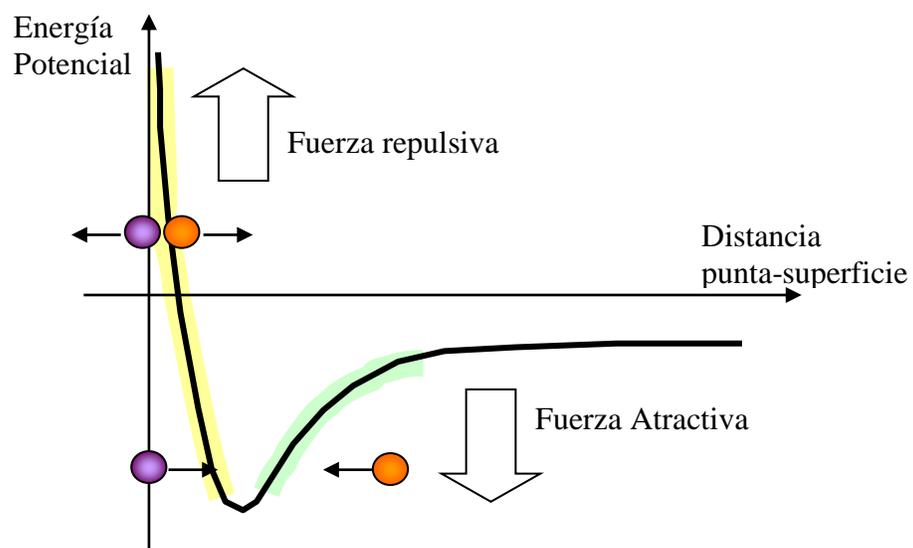


Figura 18. Fuerza de interacción entre átomos de la punta y la muestra

El sistema óptico del microscopio está en su cabezote y permite seguir los movimientos verticales del *cantilever* originados por la interacción de la sonda con la superficie del material que se está estudiando. Este sistema consta de un haz láser que incide sobre el *cantilever*, un espejo ajustable que dirige el haz sobre un arreglo de fotodetectores que perciben el desplazamiento del haz a medida que la punta se desplaza sobre la superficie en estudio. Los desplazamientos verticales del haz amplifican los movimientos angulares de la punta y su señal es traducida en alturas, permitiendo la generación de una imagen de la superficie. Los movimientos longitudinales del *cantilever* se manifiestan en un cambio direccional del haz del láser, mientras que la torsión transversal se refleja en un eje perpendicular al primero. La flexión longitudinal es originada por las fuerzas de atracción y repulsión de las interacciones moleculares y atómicas normales a la superficie y el *cantilever* se flexiona atractiva o repulsivamente hacia la superficie de la muestra y el tamaño de la flexión depende de la distancia entre los átomos que interactúan.

Para la respuesta del *cantilever* hay dos modelos de operación; el primero, llamado de contacto, por existir una interacción directa entre la punta y la superficie. Este primer modo puede, por lo general, ocasionar daños en la superficie o en la punta, y el *cantilever* actúa con flexión repulsiva. El segundo modo es de no contacto y el *cantilever* es atraído a la superficie sin interacción directa. Este modo fue el utilizado en este trabajo. El área máxima barrida por la punta depende del piezoeléctrico que desplaza la muestra bajo la punta en el *cantilaver*. El piezoeléctrico utilizado para el barrido de nuestras muestras permite un barrido máximo de $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$.

El AFM se utilizó en el *tapping mode* con el fin de obtener la máxima resolución del sistema, en este modo el *cantilever* oscila a su frecuencia de resonancia, cuando el *cantilever* oscila verticalmente, el haz del láser reflectado se defleca en un patrón regular sobre el arreglo de fotodiodos generando una señal electrónica sinusoidal que es convertida en DC con un filtro pasabajos con amplitud rms (raíz cuadrada de la señal medida en el detector) la que es proporcional al movimiento del *cantilever*. El sistema de retroalimentación compara la rms con el voltaje de base. Los dos voltajes se igualan y

controlan el movimiento del *cantilever*. Debido a que la punta del *cantilever* está muy cercana a él, habrá un contacto con la superficie sólo en los puntos más bajos de la oscilación. Este modo de funcionamiento a la vez que mantiene una alta resolución, reduce los daños sobre las muestras.

2.2 Proceso Experimental

2.2.1 Espectros de Fotoluminiscencia.

A continuación se describirá brevemente el proceso realizado para la obtención de cada espectro. Inicialmente se coloca la muestra en estudio en el portamuestras del dedo frío del crióstato, asegurándola con grasa para vacío y centrándola para asegurar que el láser incida sobre ella. Este proceso se realiza bajo condiciones de presión y temperatura ambiente.

Seguidamente se procede a hacer vacío, empleando una bomba para tal fin, y abriendo la llave de la manguera que comunica el equipo de vacío con el crióstato y prendiendo un medidor de presión que nos permite controlar el vacío que estamos obteniendo, hasta 10^{-3} Torr. Dentro de éste proceso, y en el momento de obtener una presión pequeña, comenzamos a bajar la temperatura, utilizando un controlador de ésta variable, la llave de la manguera que comunica la bomba de vacío con el crióstato nos permite igualar la presión de ambos lados, y así se evita el paso de aceite de la bomba al crióstato. Una vez obtenida una temperatura de 10K y después de sintonizar el cortador mecánico con el *lock-in*, elegir la abertura de entrada al monocromador y tener alineado el equipo de PL, procedemos a hacer mediciones, realizando barridos de acuerdo con informaciones preliminares que se poseen de la muestra.

Algunas variables como la temperatura, la abertura de entrada y salida al monocromador, la sintonía entre *lock-in* y el interruptor de haz mecánico, la potencia del láser se controlan desde el mismo instrumental de PL y otras como la sensibilidad, la constante de tiempo, el

número de lecturas, el tamaño de los pasos y el rango del barrido se realizan utilizando un software desarrollado previamente. Una vez comienzan los barridos, los datos obtenidos son llevados a una central sistematizada y un programa diseñado para manejar y graficar los datos nos permite obtener los espectros de la señal fotoluminiscente emitida por la muestra en estudio.

La calibración del sistema fue realizada con una muestra de GaSb debido a que la respuesta de este material semiconductor se encuentra en la misma zona de trabajo del material en estudio y ha sido reportada ampliamente en la literatura especializada.

Las muestras estudiadas presentan cada una, tres pozos cuánticos de diferentes anchos que oscilan entre 5 y 10 nm de $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ ($x = 0.45 - 0.48$), separados por barreras de 50 nm a 70 nm de AlInAs.

Tabla 3: Muestras estudiadas y sus temperaturas de crecimiento (T_C).

Códigos de las Muestras	T_C (K)
269	625
270	650
271	675

Estas muestras fueron crecidas por la técnica de MOCVD a diferentes temperaturas como se indica en la anterior tabla. La codificación de las muestras se ha conservado para mantener relación con resultados reportados previamente[36].

En la figura 19 se presenta un espectro típico de PL para la muestra 269 (Crecida a $T=625\text{K}$). En el espectro se observan tres picos que corresponden a los tres pozos que contiene la muestra, con valores de ancho nominales de 5nm, 7nm, y 10 nm cuyas energías corresponden a 0.902eV, 0.864eV y 0.826 eV respectivamente. Como es de esperar el pico

de mayor energía corresponde al pozo más estrecho, y el pico de menor energía corresponde al pozo más ancho.

Para los espectros de fotoluminiscencia es fundamental que los picos, dentro del espectro, aparezcan bien definidos y en la PL la resolución depende fundamentalmente de la rejilla del monocromador y de la calidad de la muestra.

El poder de resolución R de un monocromador indica el límite de su capacidad para separar imágenes adyacentes que tienen longitudes de onda ligeramente diferentes y esta resolución se calcula mediante la relación[26]

$$R = \lambda / \Delta\lambda \quad (17)$$

donde λ es la longitud de onda promedio de las dos imágenes adyacentes y $\Delta\lambda$ su diferencia.

Para una red de difracción, como es nuestro caso, el poder de resolución puede calcularse mediante la expresión $R = nN$, donde n es el orden de la difracción y N es el número de surcos o líneas de la red iluminados por la radiación precedente de la rendija de entrada. Esto indica que las redes más largas, de menor espaciado entre sus surcos y de órdenes de difracción más elevados tienen un mayor poder de resolución.

Como el poder separador aumenta con el ángulo sólido del cono de rayos interceptados por el instrumento óptico y es inversamente proporcional a la longitud de la luz utilizada, existe un criterio físico, propuesto por Rayleigh[27] que expresa que dos fuentes puntuales quedan justamente separadas, si el máximo central de la figura de difracción de uno de ellos coincide con el primer mínimo de la figura de difracción del otro.

En este trabajo se utilizó una red de difracción de 600líneas/mm y la entrada al monocromador fue variada hasta obtener una buena resolución en los espectros obtenidos.

Para el monocromador que se usó en éste trabajo, la resolución (R) para los diferentes anchos de slits utilizados, se calculó con la siguiente expresión $R = D \times \text{ancho de slits}$ [26]. Donde D es la dispersión del monocromador, $D = 1.6 \text{ nm/mm}$ [28].

Los multipozos cuánticos han sido estudiados para diferentes materiales [29,30,31,32,33].

En nuestro caso las muestras consistieron en estructuras de tres pozos cuánticos.

Los parámetros principales del material en estudio (GaInAs/AlInAs) se presentan en la tabla 4.

Tabla 4: dimensiones teóricas de la heteroestructura

Anchos	Sustrato (mm)	0.5
	Pozo 1 (nm)	5
	Pozo 2 (nm)	7
	Pozo 3(nm)	10
	Barrera(nm)	70 – 90
Profundidad pozo electrones (eV)	0.21	
Profundidad pozo Huecos (eV)	0.49	

El efecto de la interdifusión de oxígeno en pozos cuánticos del mismo material ha sido estudiado por la técnica de fotoluminiscencia[34].

Los pozos cuánticos fueron caracterizados en el rango de temperaturas de 10-220K. A temperaturas superiores la relación señal ruido impidió tomar espectros con posiciones bien definidas.

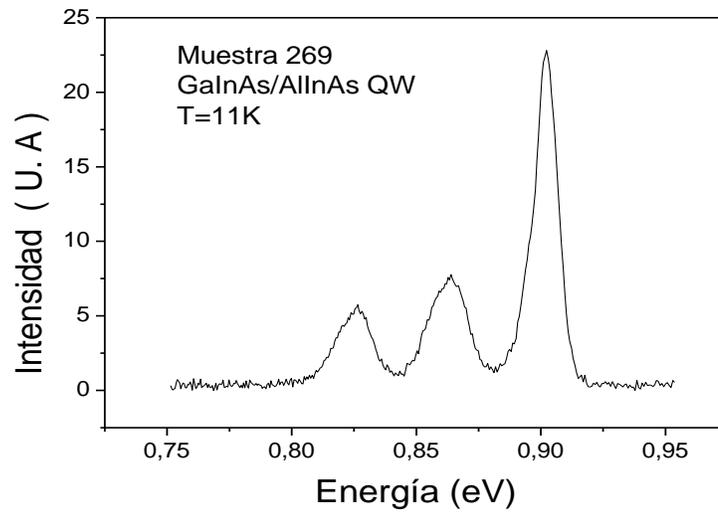


Figura 19 Espectro de PL para la muestra 269

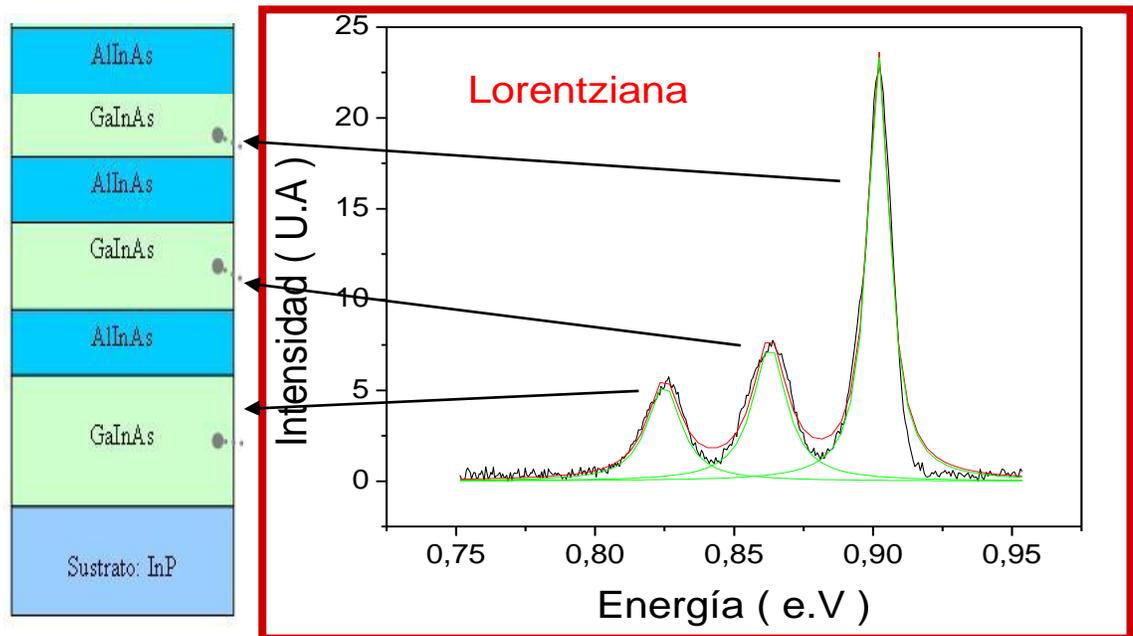


Figura 20. Espectro de la muestra 269 GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico, ajustado con una función Lorentziana.

Tal como ha sido predicho por la teoría y demostrado experimentalmente,[35] se presenta un corrimiento de los picos de fotoluminiscencia, hacia longitudes de onda más cortas, cuando el espesor del pozo se reduce. En la figura 20 observamos cómo cada pico puede ser atribuido a cada una de las capas del multipozo cuántico que ha sido estudiado. Las líneas verdes son la aproximación del espectro a través de tres curvas lorentzianas, realizada con el programa Origin 7.0. La línea roja representa la superposición de las tres curvas lorentzianas.

2.2.2 Evaluación superficial de las muestras por medio de AFM

Utilizando la técnica de microscopía por fuerza atómica se tomaron diferentes imágenes a lo largo de la superficie de las muestras estudiadas. La evaluación de la morfología consistió, fundamentalmente, en evaluar perfiles de superficie para obtener valores promedio de su rugosidad y profundidad de la estructura superficial.

Para esto se utilizó el programa SPIP que permite evaluar imágenes de microscopía. La figura 21 muestra una de tales imágenes para la muestra 270. Los perfiles obtenidos a lo largo de distancias de 100 y 300 nm son presentados en la figura 22a y 22b. Como se observa en ambos casos se puede sugerir que la altura de las islas oscila entre $0.25 \pm 0.05 \text{ nm}$ y $0.40 \pm 0.05 \text{ nm}$.

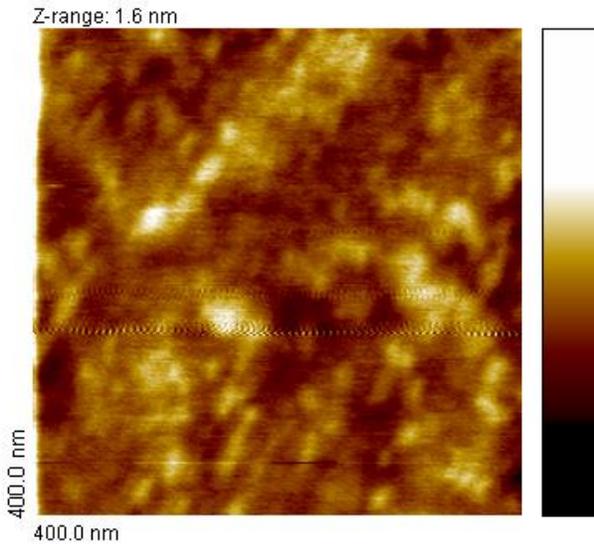


Figura 21. Imagen de AFM tomada sobre la muestra 270

El análisis de rugosidad se realizó a través del programa SPIP, sobre imágenes de diferente área. El análisis superficial para las diferentes muestras mostró variación en este promedio de rugosidad, de tal manera que la rugosidad más alta fue identificada en la muestra 269 ($T_C = 625K$) y la más baja en la muestra 271 ($T_C = 675K$). Estos resultados son presentados en el capítulo III.

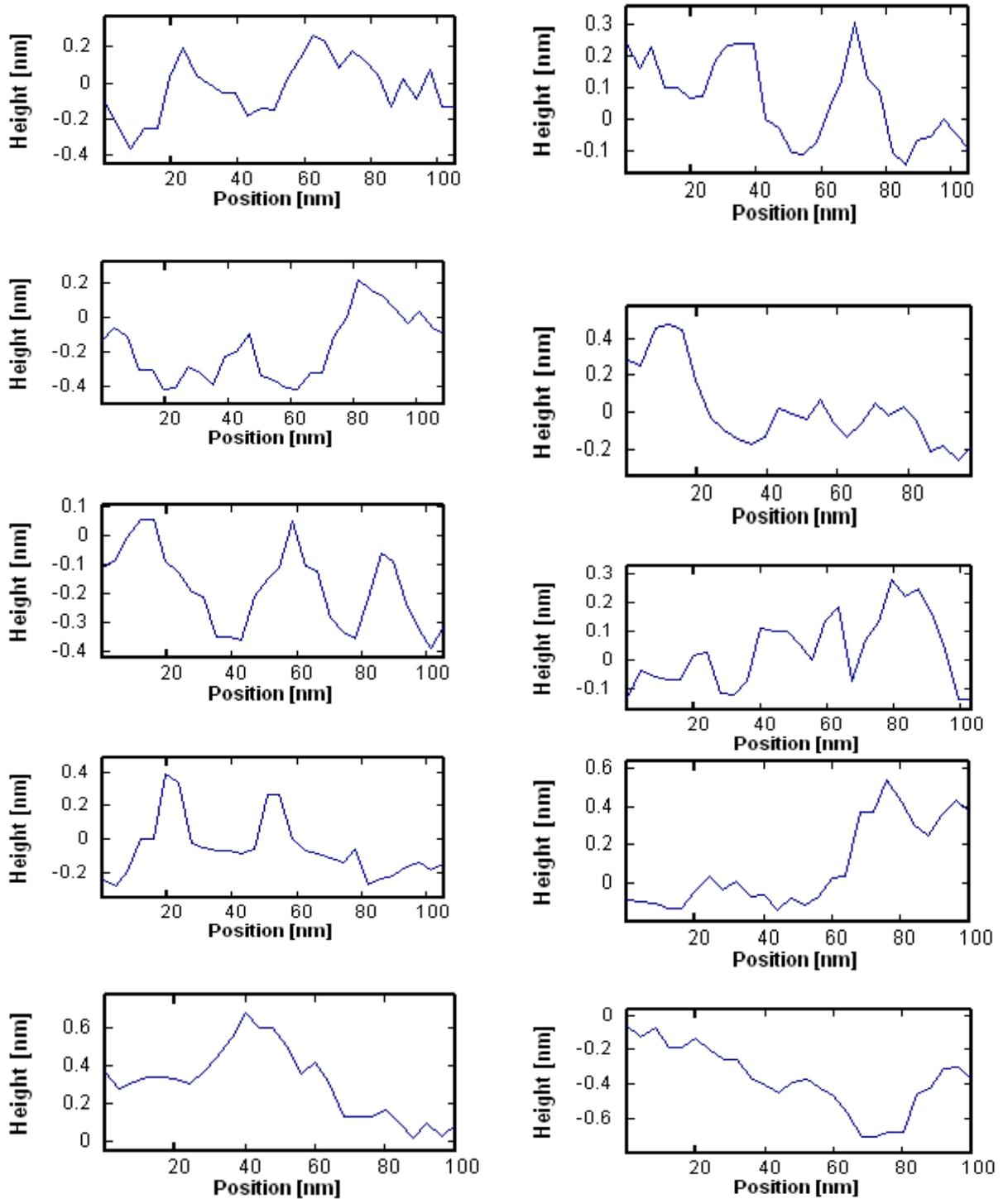


Figura 22a. Perfiles de 100 nm a lo largo de la superficie de la película #270

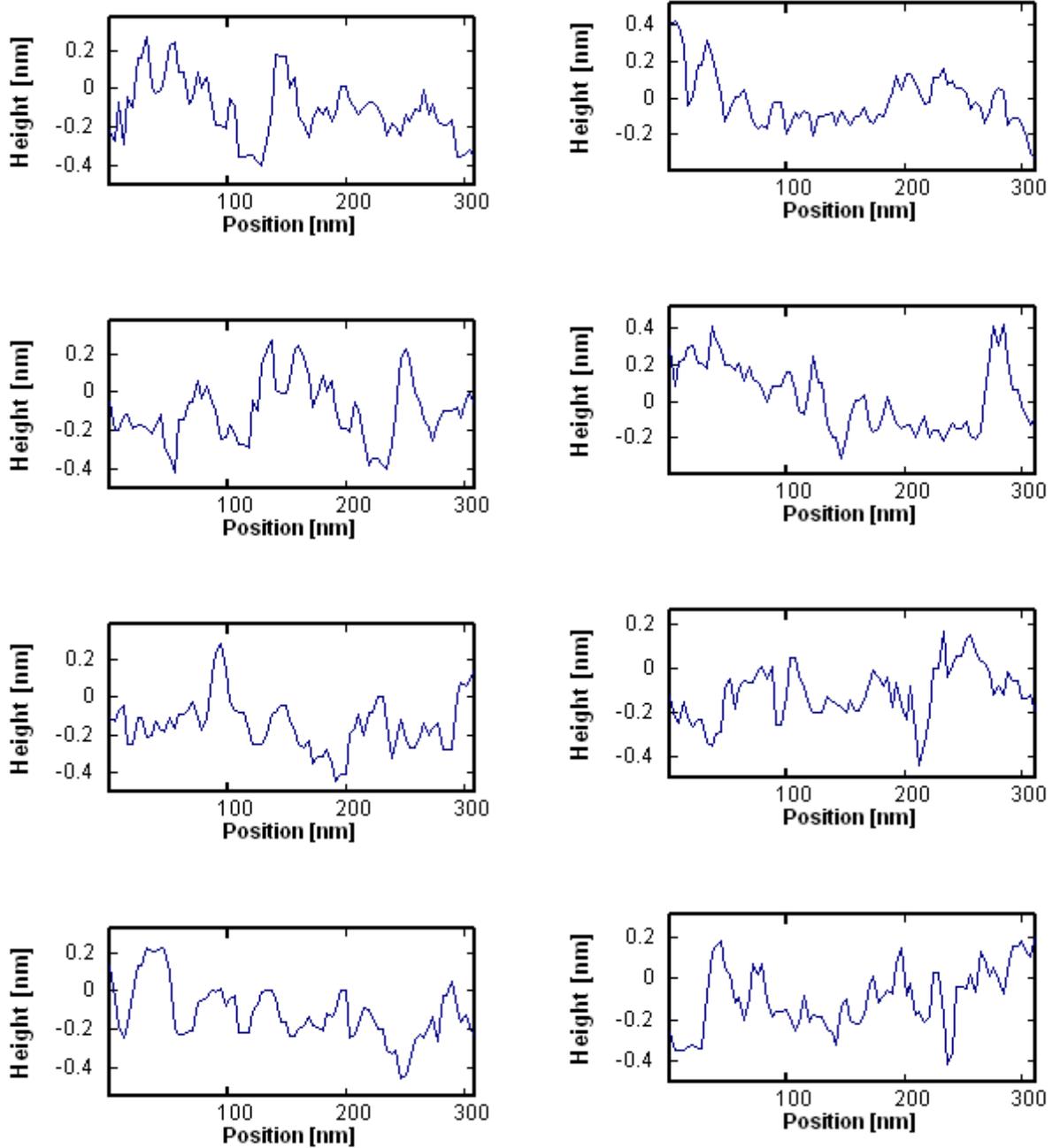


Figura 22b. Perfiles de 300 nm a lo largo de la superficie de la película #270

CAPITULO III

ANALISIS DE RESULTADOS

3.1 Imágenes de AFM - Rugosidad

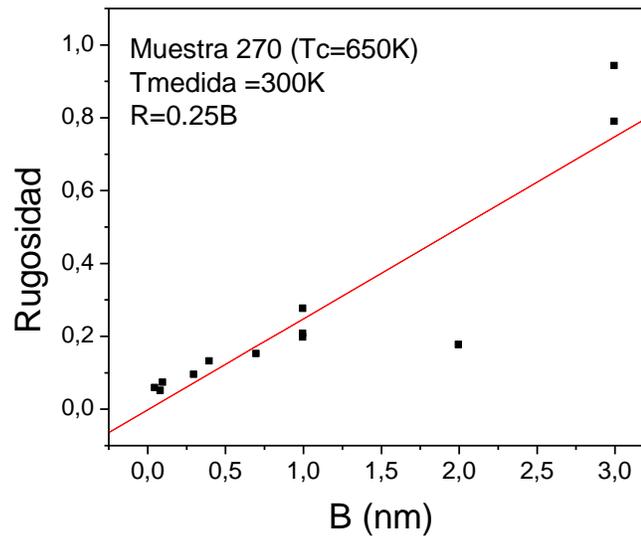


Figura 23. Dependencia de la rugosidad, con B (el lado de la imagen obtenida por AFM)

Las imágenes de AFM mostraron superficies uniformes, en las muestras estudiadas.

De la evaluación de rugosidad en la superficie de las imágenes, se observa una dependencia de este parámetro con el tamaño de las imágenes obtenidas por AFM, tal como se espera en éste tipo de análisis[12]. En el caso de la muestra 271 se encontró mayor homogeneidad de la superficie y tamaños de las islas similares. La altura de las islas osciló entre 2.5 ± 0.5 nm y 4.0 ± 0.5 nm. Estos parámetros serán tenidos en cuenta en el análisis de movilidad de los excitones dentro del pozo, debido a que la profundidad de las islas se constituye en el parámetro fundamental que define el potencial percibido por los excitones. La variación del ancho promedio del pozo cuántico será entonces desde -4.0 ± 0.5 nm hasta 4.0 ± 0.5 nm, como lo demuestra la distribución superficial de las alturas presentado en la figura 24b.

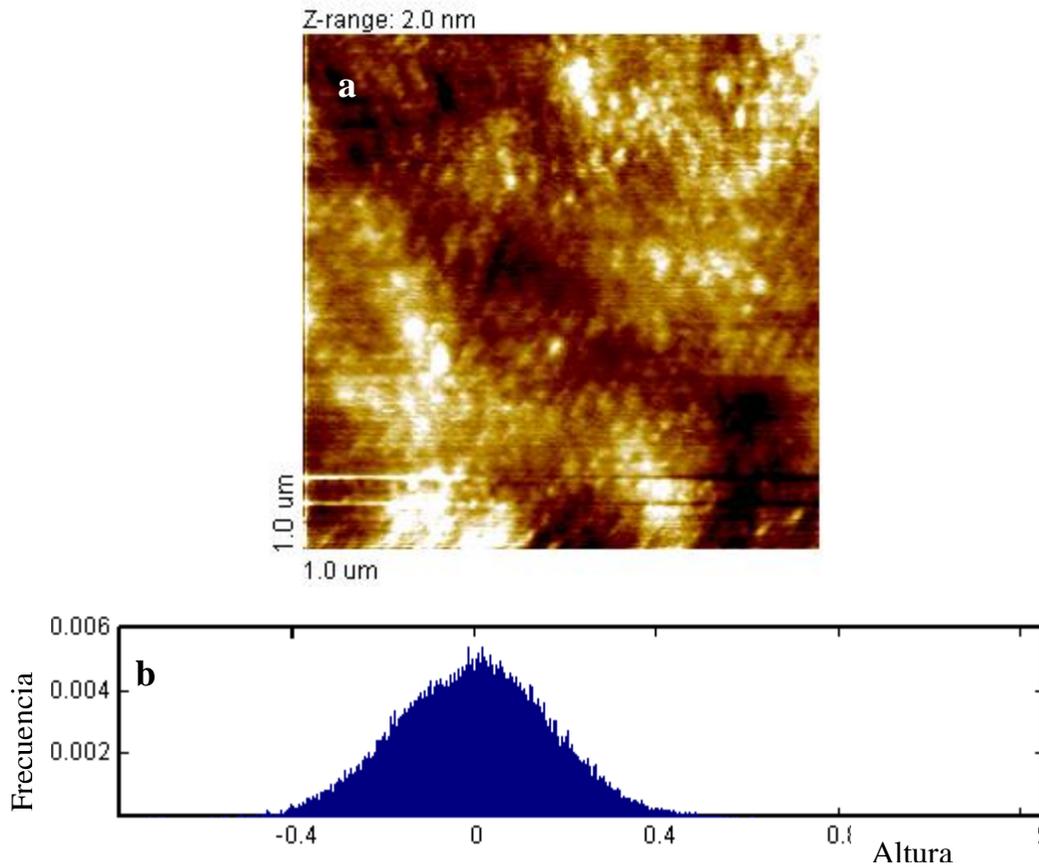


Figura 24. a. Imagen de AFM sobre la muestra #271
b. Distribución de alturas a lo largo de la superficie. Muestra #271

3.2 Efecto de la temperatura sobre los espectros de PL

Como se observa de los espectros de PL, los multipozos estudiados están caracterizados por tres picos claramente diferenciados, y correspondientes a cada uno de los tres pozos existentes en las muestras (ver tabla 4). Utilizando un programa disponible, desarrollado en el Instituto Interdisciplinario de las Ciencias, hemos calculado el ancho promedio de los pozos a partir de los espectros de PL. Los valores obtenidos a partir del espectro de la muestra 269 ($T_C = 625\text{K}$) fueron: 4.93, 9.13 y 14.00 nm. Dentro del modelo empleado no se han tenido en cuenta posibles efectos colectivos de la temperatura. Esto es, se ha

considerado la temperatura en el cálculo de la brecha de energía, sin considerar la energía térmica de los excitones, ni tampoco posibles efectos de dilatación.

El espectro de fotoluminiscencia es construido a partir del voltaje detectado y la longitud de onda controlada en el monocromador. El software diseñado para la adquisición de datos es una aplicación de Basic. Los datos que ofrece el sistema corresponden a intensidad (u.a) vs energía (e.V). El cambio de unidades que realiza el sistema para dar un espectro en energías cumple con la relación: $\lambda = 1239.8/E$ en donde λ está en nm y E esta en eV.

La ecuación anterior se obtiene relacionando la velocidad de una onda con su energía cuantizada. La velocidad de propagación para una onda, se calcula mediante las relaciones $v = \lambda \nu$ y su energía cuantizada mediante $E = h\nu$. Combinando ambas ecuaciones y haciendo $v = c$, obtenemos: $\lambda = \frac{hc}{E}$, en donde $hc = 1239.8$ y las unidades corresponden a $E(\text{J})$ y $\lambda(\text{nm})$.

Los espectros presentados en la figuras 25a, 25b, 25c muestran esta equivalencia, ya sea en energía o en longitud de onda para la muestra 271 en el rango $10 < T < 220$. En las figuras hay un evidente crecimiento en la relación señal ruido con la temperatura. Esto puede deberse a la aparición de otras recombinaciones en los niveles y a la vibración de la red.

Para estudiar el efecto de la temperatura de medida sobre el espectro de fotoluminiscencia, realizamos una superposición de los espectros, como el que se presenta en la figura 26. En él se observa claramente que cuando la temperatura de medida se incrementa, la energía del pico disminuye. Este comportamiento puede ser explicado teniendo en cuenta dos aspectos. La brecha de energía disminuye con el incremento de la temperatura, y es necesario tener en cuenta que esta energía hace parte de la energía de recombinación del excitón (ecuación 2.). Por lo anterior se hace necesario restar esta energía al valor obtenido experimentalmente. De esta manera observamos que los espectros de fotoluminiscencia son fuertemente sensibles a la temperatura.

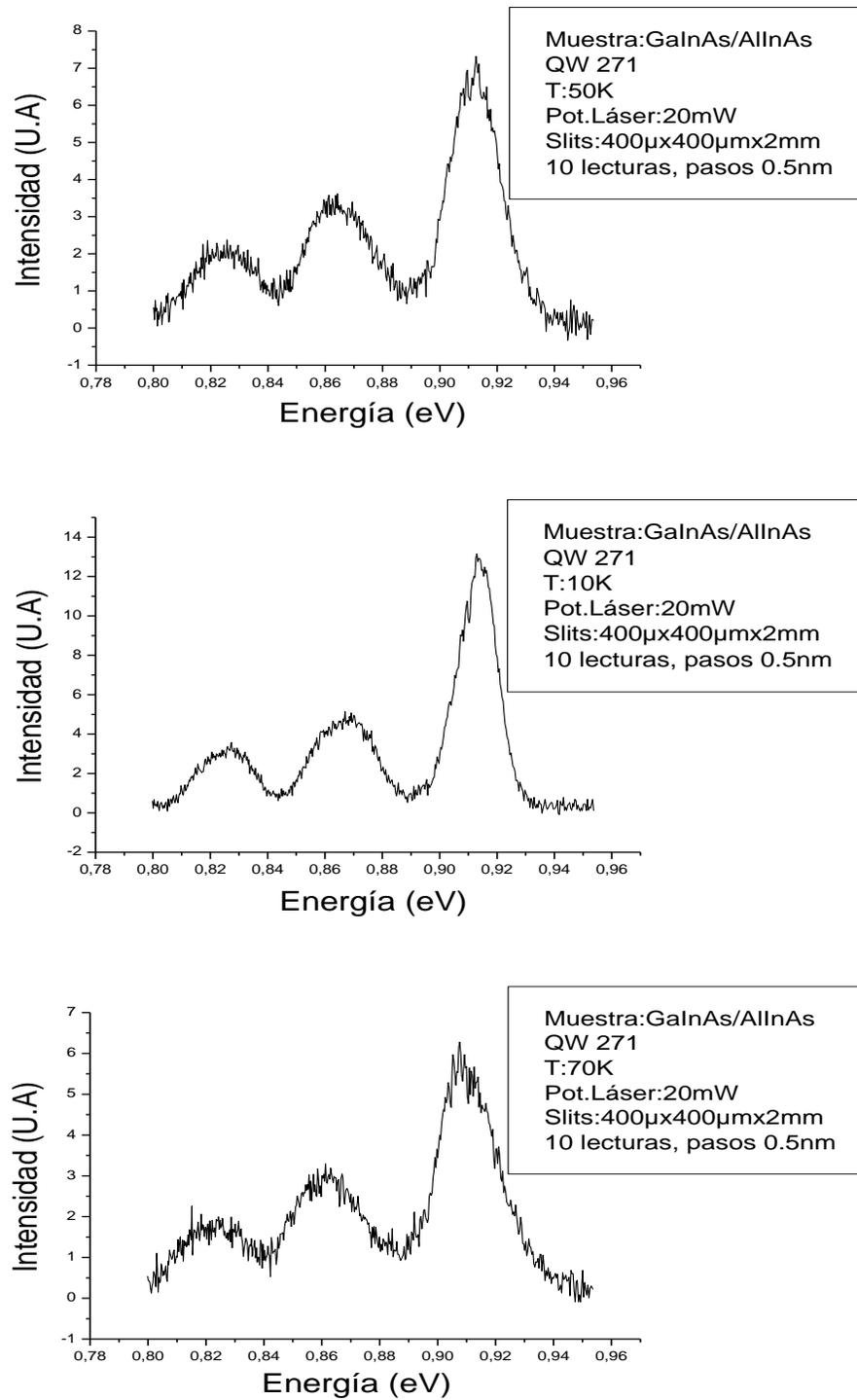


Figura 25a. Espectros de fotoluminiscencia para la muestra 271 para T=10K, 50K y 70K

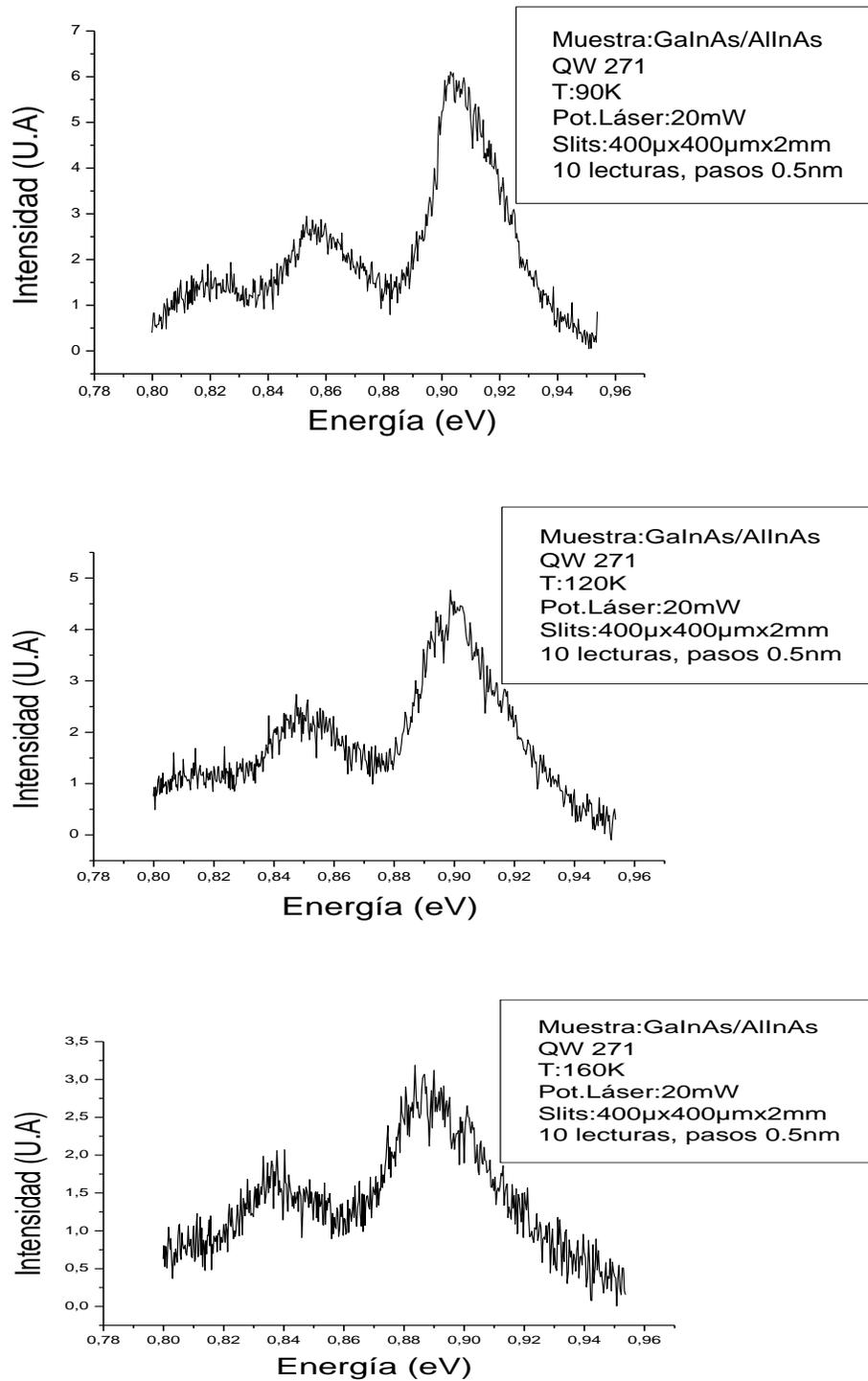
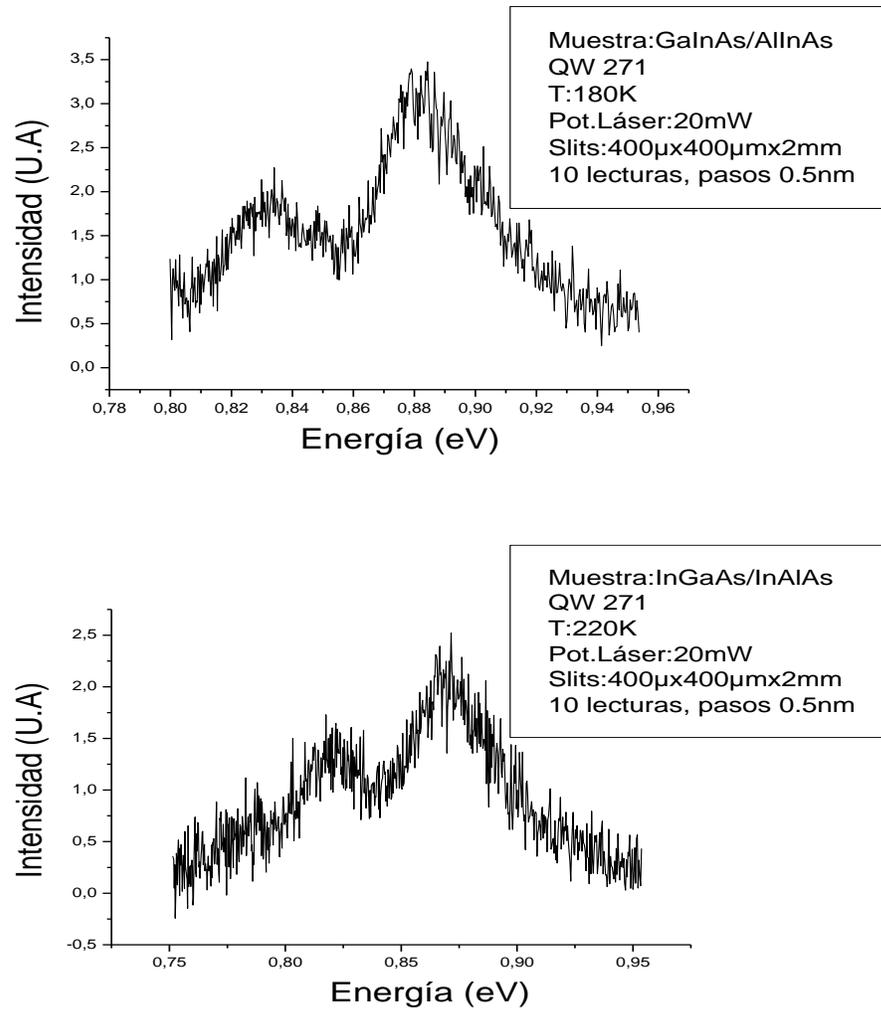


Figura 25b. Espectros de fotoluminiscencia para la muestra 271 para T=90K, 120K y 160K



**Figura 25c. Espectros de fotoluminiscencia para la muestra 271
Para T=180K y 220K**

3.2.1 Hipótesis 1. La morfología de la interfase es responsable del corrimiento de los picos de PL con la temperatura

Teniendo en cuenta que durante el proceso de crecimiento, la absorción de átomos en la superficie de las películas ocurre alrededor de islas, en el borde de los escalones o alrededor de los defectos, podemos considerar la superficie con una rugosidad que depende de las condiciones de crecimiento como sustrato, temperatura, presión, tiempo de deposición, etc. Cada técnica de crecimiento epitaxial presenta un tipo de estructura o morfología en la superficie característica, ya sean escalones, islas, espirales, etc.[25].

Por lo anterior, es de entender que el ancho del pozo no tiene un valor constante a lo largo del mismo, sino que variará en una cantidad correspondiente a las fluctuaciones en el espesor de las películas debido a la morfología, tal como se mencionó en la sección 1.4.1. Esto se esquematiza en la Figura 5, donde vemos cómo las superficies internas presentan una morfología y en consecuencia[6]el ancho del pozo tendrá un valor mínimo cuando dos picos de la superficie coinciden, y un valor máximo cuando dos valles coinciden.

Se ha propuesto para este tipo de comportamiento [36] una variación en la movilidad del excitón dentro del pozo, originada en la activación térmica de los mismos.

Para evaluar esta posibilidad se tuvo en cuenta la variación de la posición del pico de PL a diferentes temperaturas, como se observa en la figura 27.

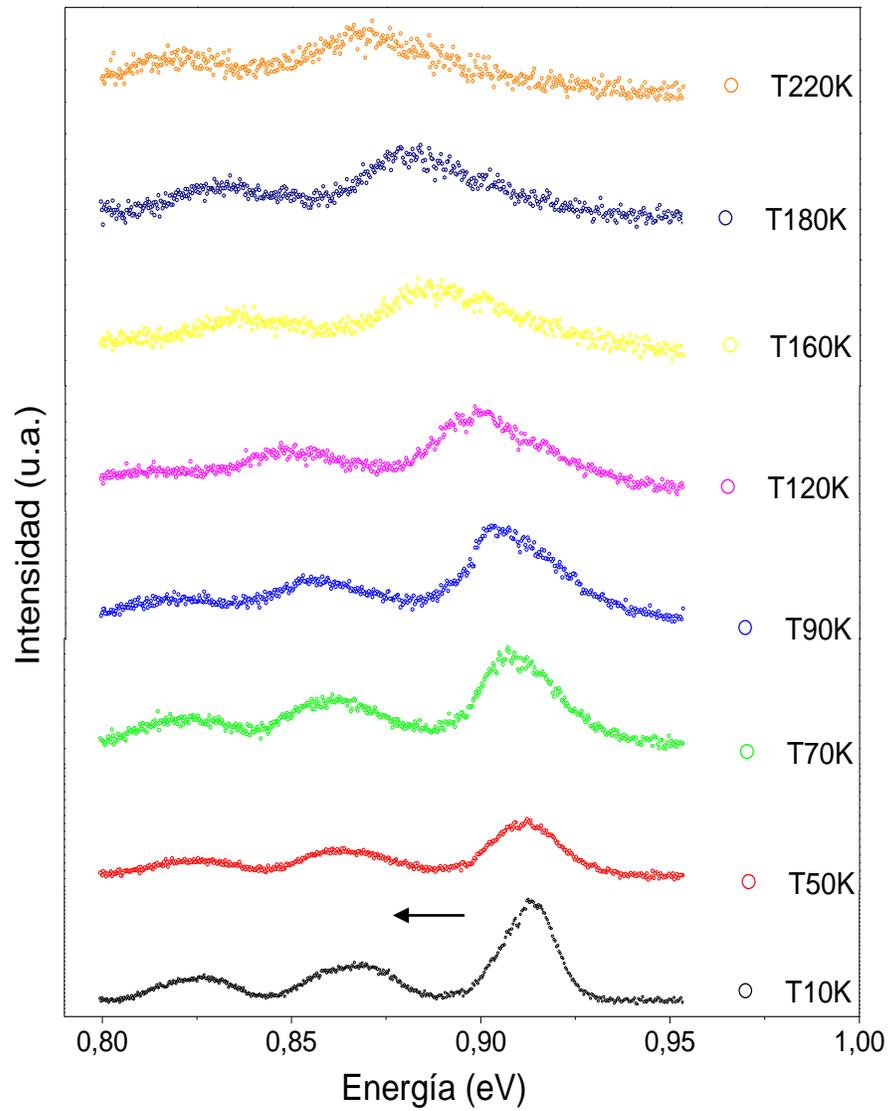


Figura 26. Espectros de PL para la Muestra 271 (Crecida a mayor temperatura) de GaInAs/ AlInAs con estructura de pozo cuántico a diferentes temperaturas

En la siguiente tabla se presentan los valores tabulados.

Tabla 5: Energía pico (1) Vs T para la muestra 271

$T_{\text{medida}} \text{ (K)}$	$E_{\text{pico 1}} \text{ (eV)}$
10	0,9128
50	0,9122
70	0,9076
90	0,9031
120	0,8985
160	0,8869
180	0,8843
220	0,8736

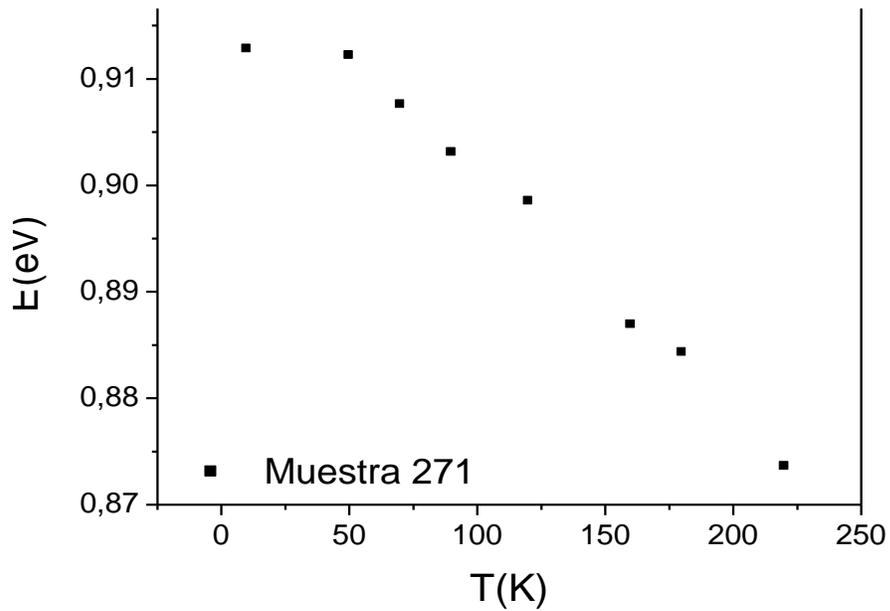


Figura 27. Variación de la posición del pico de mayor intensidad de PL para la Muestra 271 de GaInAs/ AlInAs como función de la temperatura

En la figura 27 han sido graficados estos valores mostrando claramente una reducción en la energía de recombinación a medida que la temperatura aumenta[37]. Este comportamiento con la temperatura ha sido observado en otros materiales III-V[38].

Como se sugirió en un trabajo previo[36], se hizo necesario considerar la dependencia de la brecha de energía con la temperatura, para eliminar el efecto que esta variación tenga sobre el corrimiento del pico, para lo cual se utilizó la relación de Varshni

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{C_1 T^2}{T + C_2} \quad (18)$$

En donde $E_g(0) = 0.814$ e.V $C_1 = 4.906 \times 10^{-4}$ y $C_2 = 301$ para nuestro material[9].

Tabla 6: Brecha de energía para el GaInAs

T_{medida} (K)	$E_g(T)$ (eV)
10	0.8326
50	0.8105
70	0.8075
90	0.8078
120	0.7972
160	0.7867
180	0.7809
220	0.7684

Como se observa, en la tabla 6, sigue presentándose un corrimiento a menores energías con el incremento de la temperatura. Este resultado refuerza aun más la hipótesis de suponer que hay un efecto de activación térmica que lleva a los electrones a desplazarse a posiciones de menor energía, dentro del pozo a medida que la activación térmica se lo permite.

Para evaluar esta posibilidad se ha empleado un software que permite a excitones ubicados de manera aleatoria sobre una superficie rugosa, difundir siguiendo las leyes de la difusión térmica. El software considera los tamaños de las diferentes islas que componen la

superficie, el número de excitones que se evalúan, su radio excitónico, y su energía térmica. La generación de islas en la superficie es aleatoria. El valor que se muestra para cada isla corresponde a alturas que varían desde la menos profunda, a la cual se le asignó el número 1, hasta la más profunda con el número 10. En la figura 28 se observa que las islas 1 corresponden al menor valor del ancho del pozo, y las islas 10 al de mayor valor. De la relación inversa entre el ancho del pozo y la energía de los portadores $E \propto L_{qw}^{-1}$ se deduce que las islas más profundas, corresponden a menores valores de energía. Esto se traduce en una “morfología” en donde las energías de las posiciones de los mínimos corresponden a las posiciones de las islas más profundas.

Posteriormente los excitones se ubican aleatoriamente en dicha superficie con una energía inicial definida por la temperatura. Posteriormente el excitón se desplazará en la dirección en la cual encuentre un mínimo de energía y que se encuentre delimitado por el área que genera su radio excitónico.

El movimiento del excitón y la dirección que toma dentro de la superficie es el resultado iterativo entre cada nueva posición alcanzada y la posición de mínima energía que lo circunda. Haciendo un análisis, con un número significativo de excitones, se encuentra que la distribución de posiciones finales de los excitones, cuando se les agota su energía (y lugar desde el cual ocurre la recombinación entre electrón y hueco) sobre la superficie corresponde exactamente a la distribución de islas de diferentes dimensiones existentes en la interfase.

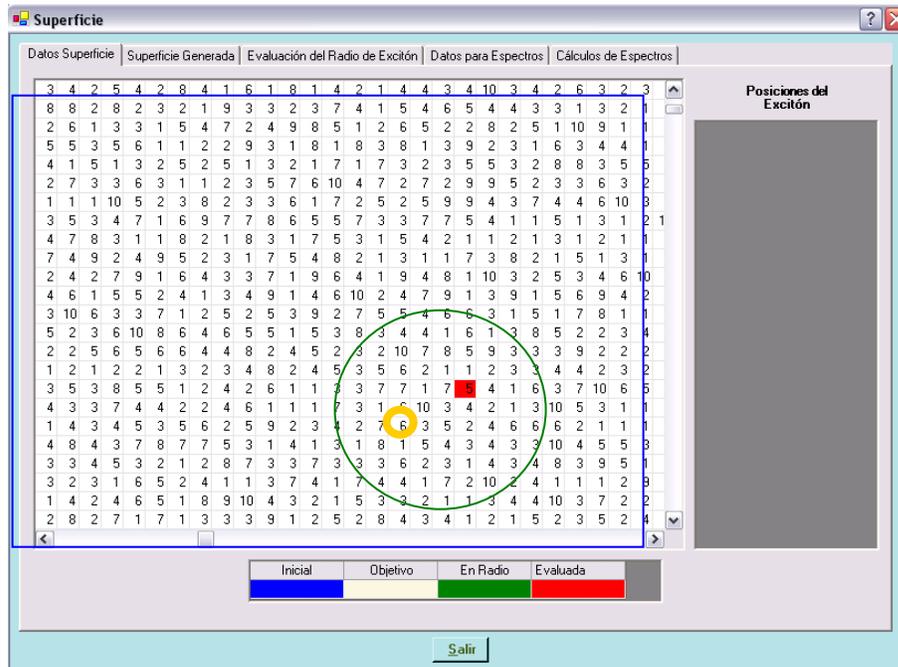


Figura 28. Excitón ubicado dentro de la superficie (azul), su radio (Verde), y la celda más profunda y cercana que define su movimiento (amarillo).

Una vez se termina el proceso para los n excitones, los porcentajes de las profundidades se utilizan para calcular los espectros de fotoluminiscencia, por medio de un modelo de pozo cuadrado. Los resultados, de uno de dichos cálculos, se presentan en la figura 29.

A partir de los corrimientos de las posiciones de los picos de energía para diferentes temperaturas podemos intuir que las variaciones en el ancho del pozo son del orden de los nm, lo cual está en buen acuerdo si tenemos en cuenta que el parámetro de red es 0.58 nm. Lo anterior significa que los tamaños de las islas son de 1 o dos celdas unitarias, lo cual es de esperar para un tipo de crecimiento como el MOCVD, empleado en estas películas.

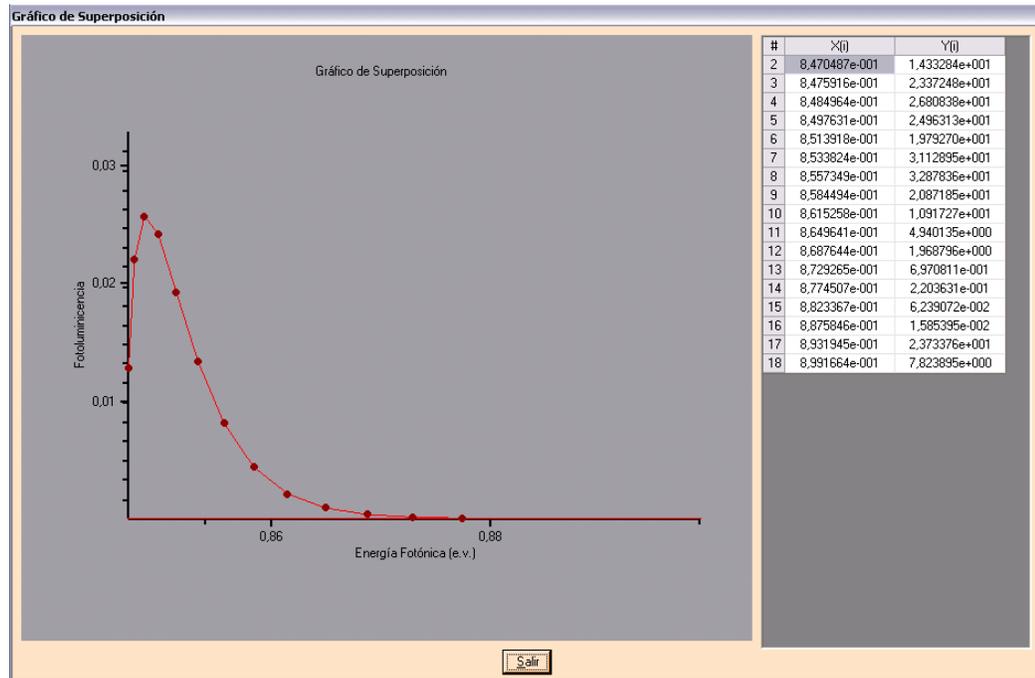


Figura 29. Espectro final de fotoluminiscencia generado por el programa en el cual se incluyen los diferentes anchos del pozo.

3.2.2. Hipótesis 2. Corrimiento del pico de fotoluminiscencia por efectos de la dilatación térmica

En este trabajo sugerimos adicionalmente una posible dilatación de las celdas debido a las variaciones térmicas a las que son sometidas las muestras durante su evaluación. Para ello, empleando el programa disponible *SEFPCAV*, con el cual se calculó el ancho del pozo que correspondería a la energía medida por medio de PL. Con este valor obtenido a partir de datos experimentales para L , y suponiendo que no hay efectos de difusividad o energía de activación, se calcularon los valores de variación del ancho del pozo $\Delta L (T)$, como función de la temperatura.

Los datos para el coeficiente de dilatación térmica lineal (α) de la tabla 7 fueron obtenidos aplicando la ecuación: $\alpha = -1.12 + 4.1 \times 10^{-2}T - 5.9 \times 10^{-5}T^2$ con T (K)[9] y los valores de ΔL con la ecuación $\Delta L = L_0 \alpha \Delta T$ para el GaInAs, y se utilizó la teoría atómica para la dilatación térmica descrita en el anexo 3 de este trabajo.

Como se observa, en la tabla 7, la variación en el ancho de dilatación térmica necesaria para ser responsable por el corrimiento del pico en los espectros de PL es tres órdenes de magnitud mayor que la dilatación térmica calculada para este tipo de materiales cuando la dilatación se da por encima de 120K.

TABLA DE RESULTADOS DILATACION TERMICA.

Tabla 7. Valores de dilatación térmica lineal para GaInAs

Temperatura (K)	α (K ⁻¹)	L (nm) Experimental	ΔL (nm)
			Teórico
120	2.9506×10^{-6}	12.700	1.648511×10^{-3}
160	3.8996×10^{-6}	13.8255	1.140327×10^{-3}
180	4.3484×10^{-6}	13.8410	2.712393×10^{-3}
220	4.3484×10^{-6}	14.8410	

CONCLUSIONES

1. La energía de recombinación de los pares electrón – hueco, varía inversamente con la temperatura.
2. La hipótesis de responsabilizar a la dilatación térmica por el corrimiento de los picos no puede ser considerada, pues el efecto de la dilatación es tres órdenes de magnitud menor que el requerido para observar los corrimientos del orden de décimas de eV observados experimentalmente en los espectros de PL.
3. Los tamaños de las islas presentes en las interfases predichos a partir de un modelo de pozo cuadrado están en buen acuerdo con los valores obtenidos a partir del análisis de rugosidad de las muestras. La altura de las islas es del orden de una o dos celdas unitarias, lo cual es de esperar para un tipo de crecimiento como el empleado en estas películas. MOCVD.
4. El ancho de un pozo cuántico está directamente relacionado con el tamaño de las islas generadas en la fabricación del semiconductor.

REFERENCIAS

- [] Z. Ye, J. C. Campbell, Z. Chen, E-T Kim, A. Madhukar, J. Appl. Phys. **92**. No 12 (2002).
- [2] H. S. Brandi, A. Latgé, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. **92**, (2002) p.4209-4212.
- [3] C. Monier, A. Freundlich, M.F. Vilela, J. Appl. Phys. **83**. No 5. (1999) p.27130-2218.
- [4] Y. P. Feng, H.N. Spector, J. Appl. Phys. **86**. No 8 (1999) p.4477 – 4482.
- [5] Z. Barticevic, M. Pacheco, C. A. Duque, and L. E. Oliveira, J. Phys. Condens. Matter **14**, (2002) p. 1021-1033.
- [6] Z. Barticevic, M. Pacheco, C. A. Duque, and L. E. Oliveira, J. Appl. Phys. **92**, (2002) p.1227-1231.
- [7] J.F. Chen, P.Y. Wang, N.C. Chen, X. J. Guo, Y. F. Chen, J. Appl. Phys. **87**. No 3 (2000) p.1251 – 1254.
- [8] W. K. Metzger, M. W. Wanlass, L.M. Gedvilas, J. C. Verley, J.J. Carapella, R. K. Ahrenkiel, J. Appl. Phys. **92**. No 7 (2002) p.3524 – 3529.
- [9] O. Madelung, W. Vonder Osten, U. Rössler, “Intrinsische Eigen Schaften Von Elementen der IV. Gruppe und Von III - , II, VI, und I – VII“ Springer - Verlag, Berlin (1987) p.82-93, 136, 142-143.
- [0] K. Chang, F.M Peeters. J. Appl. Phys. **88**. No 9 (2000) p.5246–5251.
- [1] M.E. Gómez, “Magnetotransport Properties and Interfacial Structure Correlation on Fe/Cr Sperlattices”. Tesis Doctoral U. del Valle. Cali (2001).
- [2] J. G. Ramírez “Estudio estadístico de imágenes de AFM aplicado a películas delgadas magnéticas basadas en el sistema $La_{2/3}Ca_{1/3}MnO_3$ ” Universidad del Valle (2004).
- [3] E. K. Mukhamedzhanov, C. Bocchi , S. Franchi, A. Baraldi, R. Magnanini, L. Nasi, J. Appl. Phys. **87** No 9 (2000) p.4234 – 4239.
- [4] L.C. Poças, J. L. Duarte, I.F. L. Dias, E. Laureto, S.A. Lourenco, D. O. Toginho Filho, E. A. Meneses, I. Mazzaro, J.C. Harmand, J. Appl. Phys. **91**. No 11 (2002) p.8999 – 9004.
- [5] V.K. Yang, S.M. Ting, M. E. Groenert, M.T. Bulsara, M.T. Currie, C. W. Leitz, E. A. Fitzgerald, J. Appl. Phys. **93**. No 9 (2003) p.5095 – 5102.

- [6] A. Lagé, N. Porrás-Montenegro L.E. Oliveira, Phys. Rev. **B45** (1992) p.6742.
- [7] F. J. Betancour, I. D. Mikhailov, Phys. Rev **51** (1995) p.4982.
- [8] M. Zambrano “Espectroscopía, Mapeo de la Función de onda y dinámica para electrones en pozos cuánticos bajo campos”, Tesis doctoral Universidad del Valle (2003).
- [9] S. Torres “Respuesta óptica de los Excitones en Pozos cuánticos”. Tesis de Maestría Univ. Del Quindío 2003.
- [20] M. Grass Alessi, F. Fragano, A. Patane, M. Capizzi, E. Runge, R. Zimmermann, Phys. Rev. **B61**, (2000) p.10985.
- [2] R. W. Martin, Phys. St. Sol. **B66** (1974) p.627.
- [22] A. Juárez, T. Tello, G. Röpke, A. Zehe, Rev. Mex. de Fís., 37 No2, (1991) p.294-302.
- [23] N.W. Ashcroft, N. D. Mermin, “Solid State Physics” Edit. Harcourt College publishers, New York (1976).
- [24] P.Y. Yu, M. Cardona, “Fundamentals of semiconductors, Physics and Materials Properties”, Springer Verlag, Berlín (1996).
- [25] G.A. Mendoza, “Estudio de las propiedades morfológicas de películas epitaxiales de YBa₂Cu₃O_{7-x}” Tesis Doctoral U. Nacional. Bogotá (2001).
- [26] Skoog, Holler, Nieman, “Principios de análisis Instrumental” Edit.. Mcgraw–Hill. 1992.
- [27] W. Sears, M.W. Zemansky, “Física General” Edit. Aguilar. Madrid. 1979
- [28] M. Spex “Instrument performance Report, M series Spectrometers 500M, 750M, 1000 M, 1250”, Industries, INC. USA.
- [29] J.F. Chen, P.Y. Wang, J.S. Wang, C.Y. Tsai, N.C. Chen, J. Appl. Phys. **87**.No 3 (2000) p.1369 – 1373.
- [30] M. Vallote, D. Campi, C. Caccuatore, J. Appl. Phys. **87**,6 (2000).
- [31] Y. Ohizumi, T. Tsuruoka, S. Ushioda. J. Appl. Phys. **92** 5(2002) p.2385 – 2390.
- [32] L. Jedral, C. Edirisinghe, H. Ruda, A. Moore, B. Lent, J. Appl. Phys. **82** 1(1997) p.375 – 379.
- [33] K. Tanaka, N. Kotera, H. Nakamura. J. Appl. Phys. **85**. 8(1999) p.4071 – 4075.

- [34] J. S. Choe, S. W. Ryu, B. D. Choe, H. Lim, J. Appl. Phys. **83** 11(1998) p.5779-5782.
- [35] A.C. Han, M. Wojtowicz, T.R Block, X. Zhang, T.P. Chin, A. Cavus, A. Oki, D.C. Streit, J. Appl. Phys. **86** 11(1999) p.6160–6163.
- [36] A. Villada, “Estudio de pozos cuánticos de GaInAs/AlInAs por medio de la técnica de fotoluminiscencia en función de la temperatura” Tesis de Maestría. Universidad del Quindío (2004).
- [37] M.Y. Kong, X. L. Wang, D.Pan, Y. P. Zeng, J. Wang, W. Ge. J. Appl. Phys. **86** 3(1999) p.456 – 1459.
- [38] A. Bonfiglio, M. Lomascolo, G. Traetta, R. Cingolani, A.Di Carlo, F. Della Sala, P. Lugli, A. Botchkarev, H. Morkoc, J. Appl. Phys. **87** 5(2000) p.2289 – 2292.
- [39] R. Eisberg, R. Resnick, “Física Cuántica” Edit. Limusa, Mexico (1979).

Anexo 1

Espectros de fotoluminiscencia

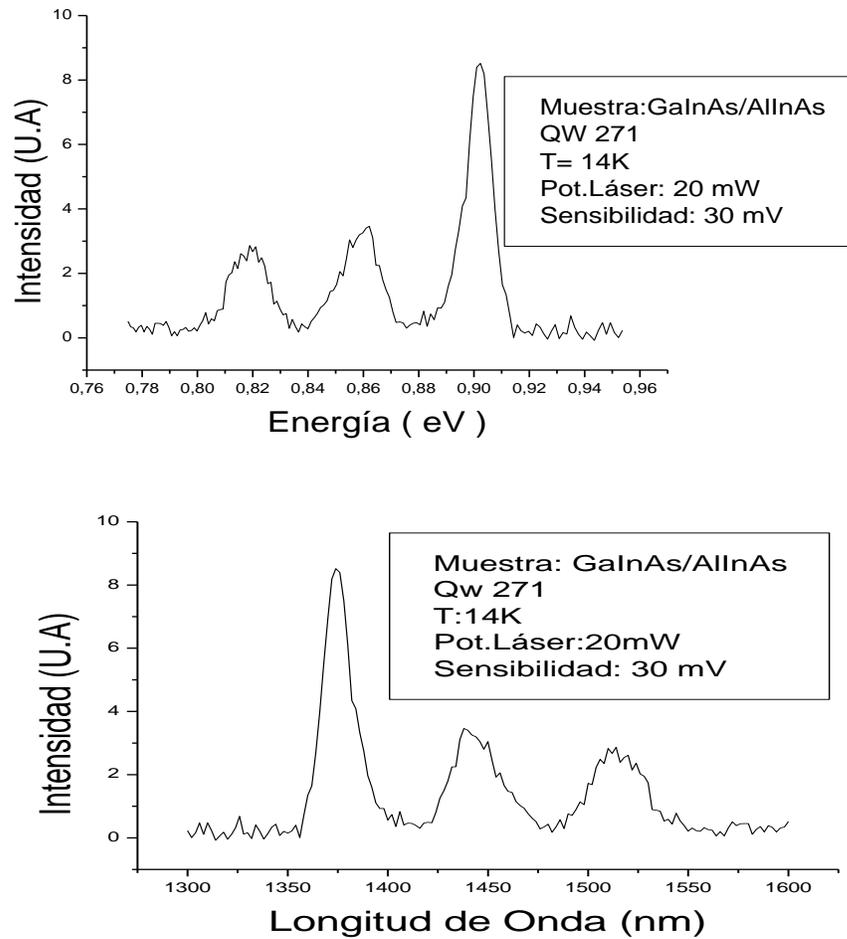


Figura A1.1. Espectros de PL para GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico.
Muestra QW 271 (Crecida a 675 K)

Picos	Valores de Energía en (e.V)	Valores de λ (nm)
Primero	$0.9025 \pm 1.04 \times 10^{-3}$ eV	1374.7 ± 1.6 nm
Segundo	$0.8627 \pm 1.04 \times 10^{-3}$ eV	1438.1 ± 1.6 nm
Tercero	$0.8194 \pm 1.04 \times 10^{-3}$ eV	1514.7 ± 1.6 nm

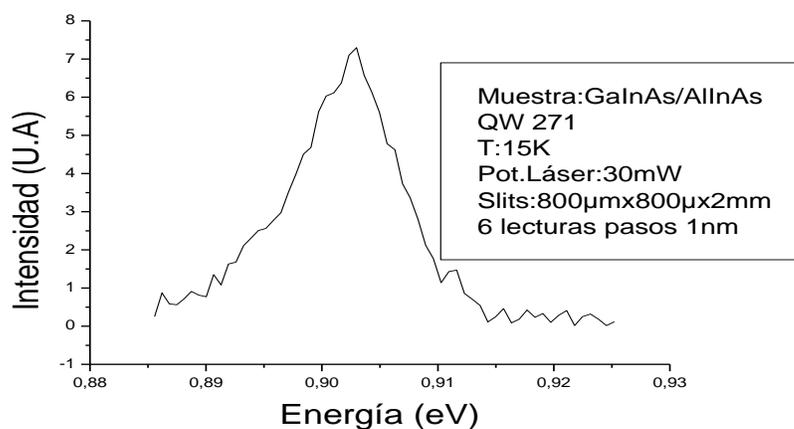
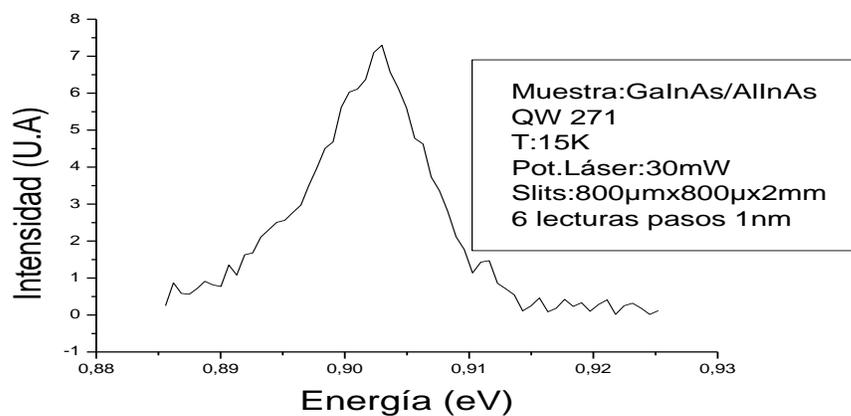


Figura A.1.2. Espectros de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/ AlInAs con estructura de pozo cuántico variando la potencia, las lecturas por pasos y entrada al monocromador, para un solo pico. muestra QW 271 (Crecida a 675 K)

PRIMER PICO

Potencia (mW)	Aberturas de entradas al monocromador	Lecturas	Energia (eV)	λ (nm)
30	800 μm x 800 μm x 2mm	6 pasos 1nm	$0.9030 \pm 8.4 \times 10^{-4}$ eV	1373.2 ± 1.28 nm
20	500 μm x 500 μm x 2mm	10 pasos 0.3 nm	$0.9028 \pm 5.3 \times 10^{-4}$ eV	1373.9 ± 0.8 nm

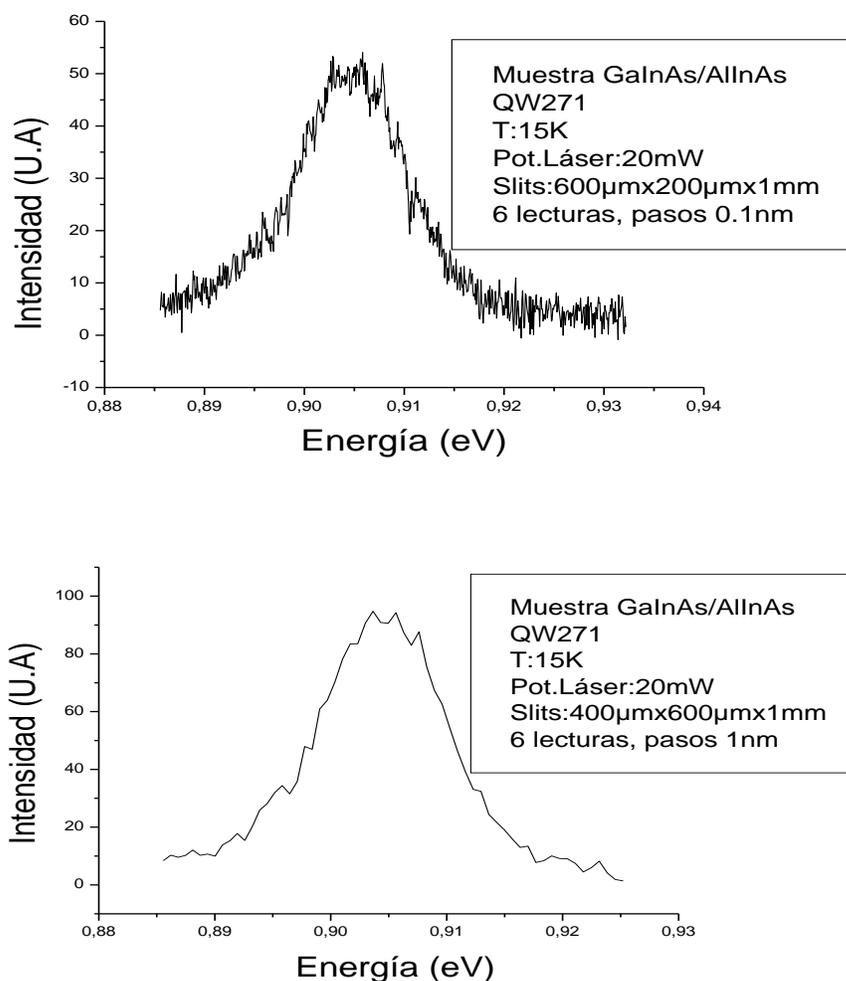


Figura A.1.3. Espectros de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo QW 271, variando la abertura de entrada al monocromador y los pasos. Muestra 271 (Crecida a 675K)

PRIMER PICO

Pasos (nm)	Abertura de entradas al monocromador	Energía (eV)	λ (nm)
0.1	600 μm x 200 μm x 1mm	$0.9057 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1368.8 ± 0.64 nm
1	400 μm x 600 μm x 1mm	$0.9037 \pm 5.3 \times 10^{-4}$ eV	1372.0 ± 0.8 nm

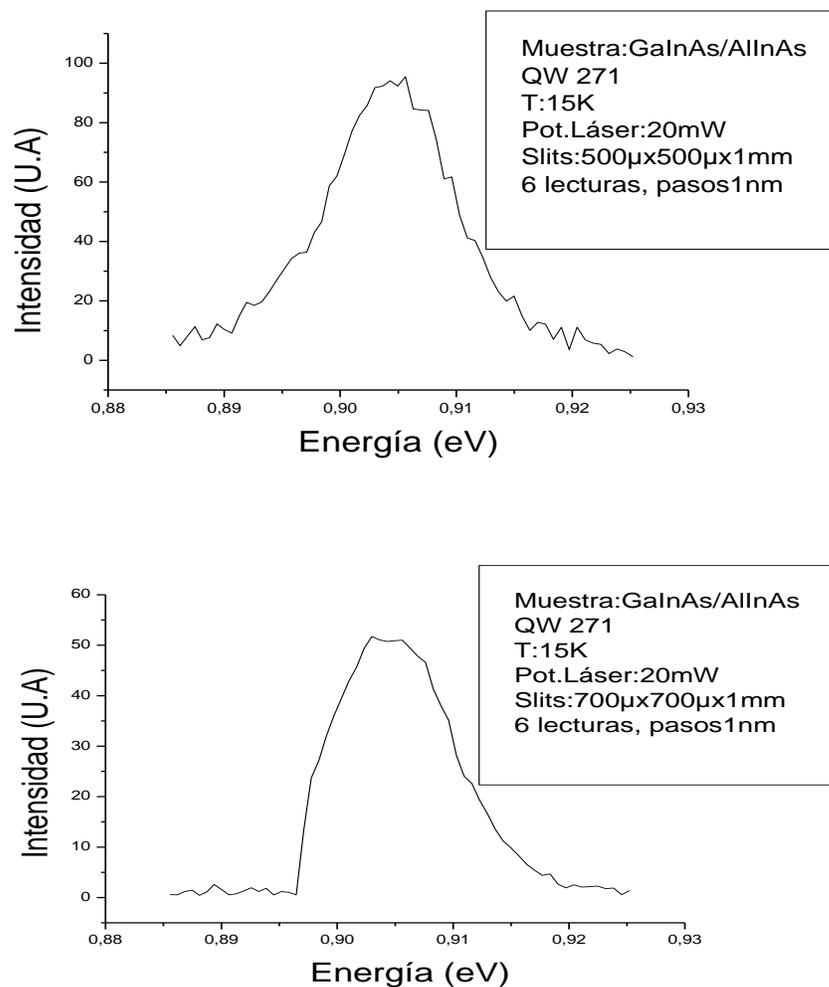


Figura A.1.4. Espectros de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo QW 271, variando la abertura de entrada al monocromador y los pasos. Muestra 271 QW (Crecida a 675 K)

PRIMER PICO

Pasos (nm)	Abertura de entrada al monocromador	Energía (eV)	λ (nm)
1	500 μm x 500 μm x 1 μm	$0.9055 \pm 5.3 \times 10^{-4}$ eV	1369.0 ± 0.8 nm
1	700 μm x 700 μm x 1 μm	$0.9030 \pm 7.4 \times 10^{-4}$ eV	1373.2 ± 1.12 nm

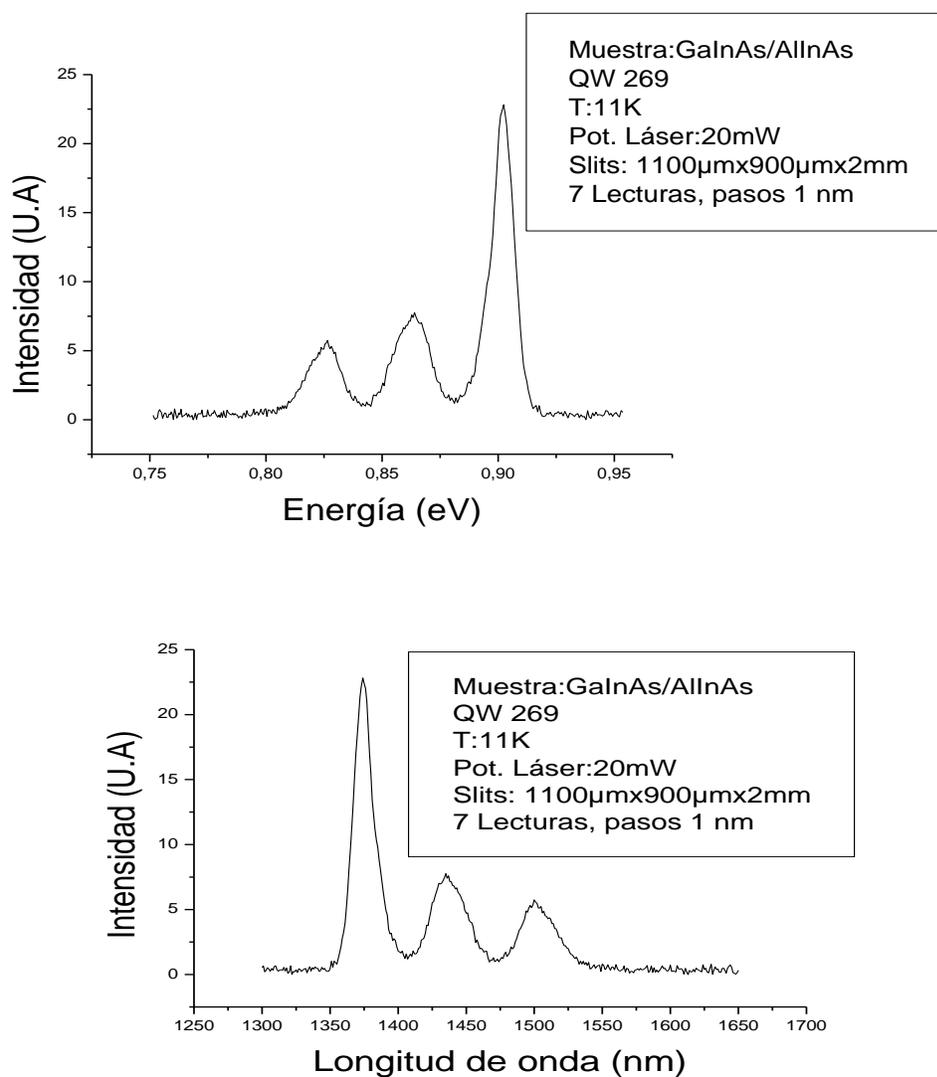


Figura A.1.5 espectro de PL de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico . muestra QW 269 (Crecida a 625K)

Picos	Valores de Energía en (e.V)	Valores de λ (nm)
Primero	$0.9024 \pm 1.04 \times 10^{-3}$ eV	1374.4 ± 1.6 nm
Segundo	$0.8640 \pm 1.04 \times 10^{-3}$ eV	1435.8 ± 1.6 nm
Tercero	$0.8256 \pm 1.04 \times 10^{-3}$ eV	1501.7 ± 1.6 nm

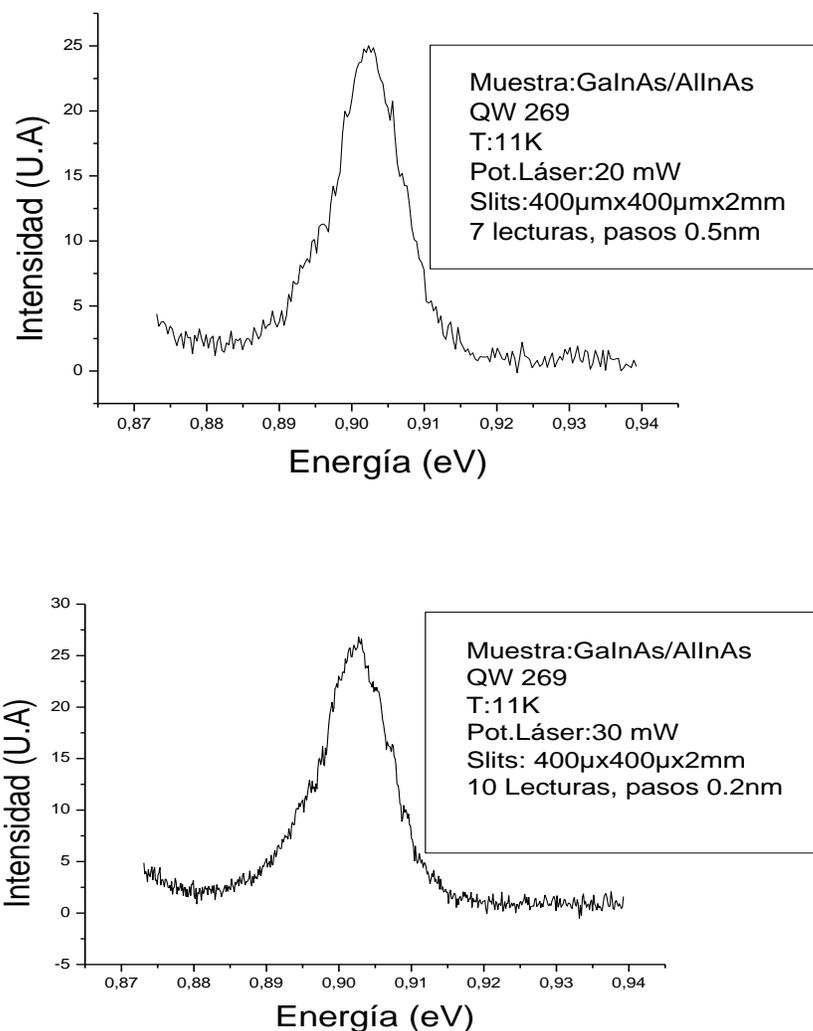


Figura A.1.6. Espectros de PL de Intensidad contra Energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo QW 269 (Crecida a 625K), variando la potencia de excitación y los pasos de lectura. Muestra 269 QW (Crecida a 625 K)

PRIMER PICO

POTENCIA (mW)	LECTURAS	ENERGIA (eV)	λ (nm)
20	7 pasos 0.5nm	$0.9023 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1374.0 ± 0.64 nm
30	10 pasos 0.2nm	$0.9029 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1373.0 ± 0.64 nm

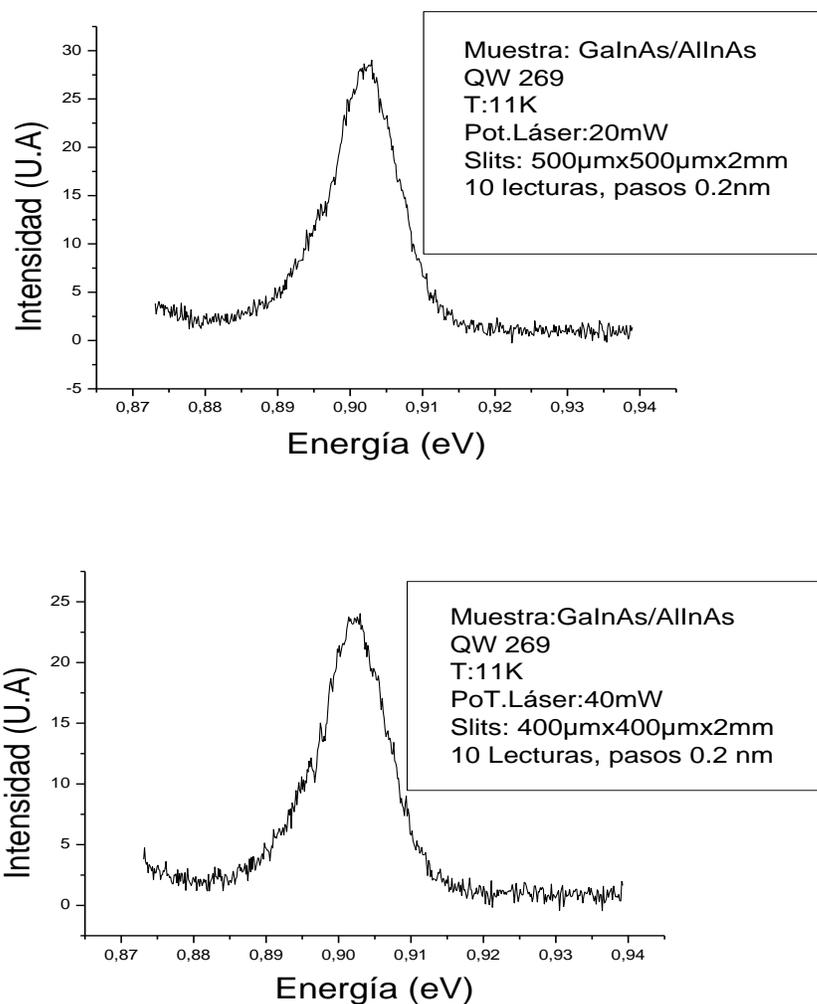


Figura A.1.7. Espectros de PL de Intensidad contra Energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo QW 269, variando la potencia de excitación y la abertura de entrada al monocromador. Muestra 269 QW (Crecida a 625 K)

PRIMER PICO

POTENCIA (mW)	LECTURAS	ENERGIA (eV)	λ (nm)
20	10 pasos 0.2nm	$0.9023 \pm 5.3 \times 10^{-4}$ eV	1373.4 ± 0.8 nm
40	10 pasos 0.2nm	$0.9029 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1373.4 ± 0.64 nm

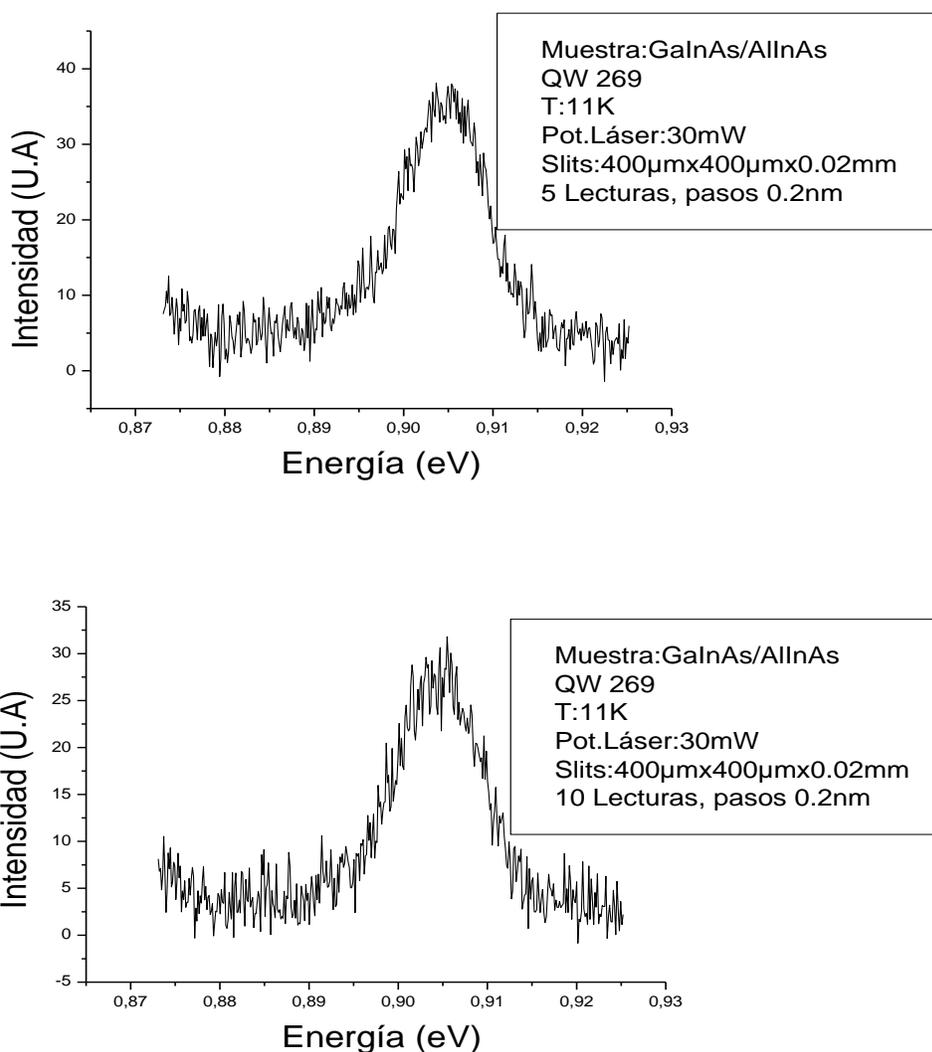


Figura A.1.8. Espectros de PL de Intensidad contra Energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo QW 269, variando el número de lecturas. Muestra 269 QW (Crecida a 625 K)

PRIMER PICO

LECTURAS	ENERGIA (eV)	λ (nm)
5 lecturas pasos 0.2nm	$0.9051 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	13689 ± 0.64 nm
10 lecturas pasos 0.2nm	$0.9058 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	13699 ± 0.64 nm

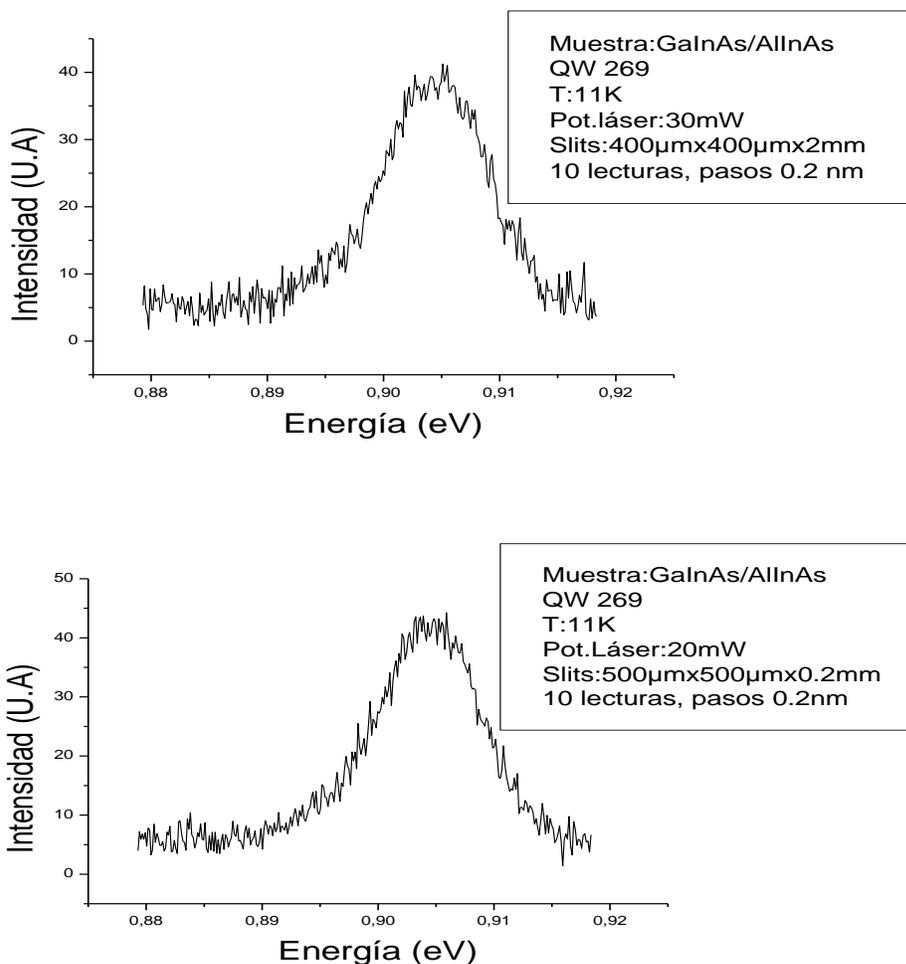


Figura A.1.9. Espectros de PL de intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico muestra QW 269 (Crecida a 625K) variando la abertura de entrada al monocromador y la potencia

PRIMER PICO

POTENCIA (mw)	Abertura de entrada al monocromador	ENERGÍA (eV)	λ (nm)
30	400 μm x 400 μm x 2 μm	$0.9053 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1369.4 ± 0.64 nm
20	500 μm x 500 μm x 0.2 μm	$0.9058 \pm 5.3 \times 10^{-4}$ eV	1370.3 ± 0.8 nm

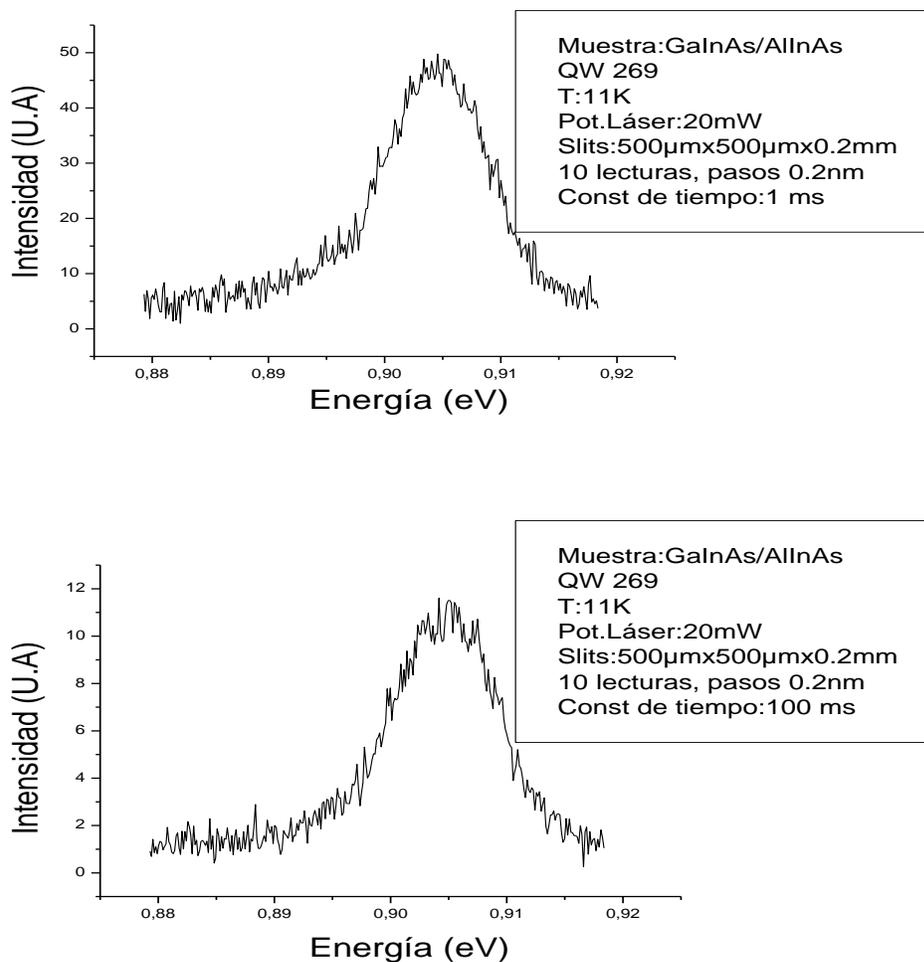


Figura A.1.10. Espectros de PL de Intensidad contra Energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico. Muestra QW 269 (Crecida a 625K), variando constante de tiempo

PRIMER PICO

CONSTANTE TIEMPO (s)	Energía (eV)	λ (nm)
1	$0.9045 \pm 5.3 \times 10^{-4}$ eV	1370.8 ± 0.8 nm
100	$0.9053 \pm 5.3 \times 10^{-4}$ eV	1369.8 ± 08 nm

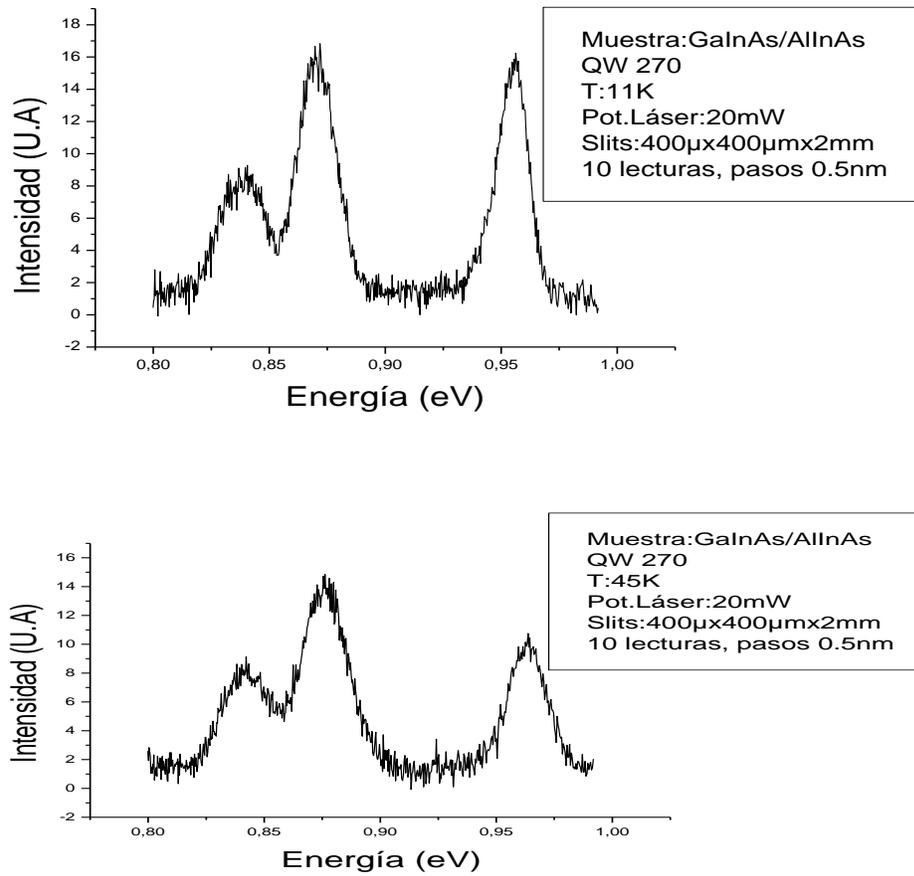


Figura A.1.11. Espectro de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico. Muestra 270 (Crecida a 650K) . Variando la temperatura

PICOS	TEMPERATURA (K)	ENERGIA (e.V)
Primer pico	11	$0.9566 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV
Segundo pico	11	$0.8713 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV
Tercer pico	11	$0.8398 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV
Primer pico	45	$0.9634 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV
Segundo pico	45	$0.8765 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV
Tercer Pico	45	$0.8432 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV

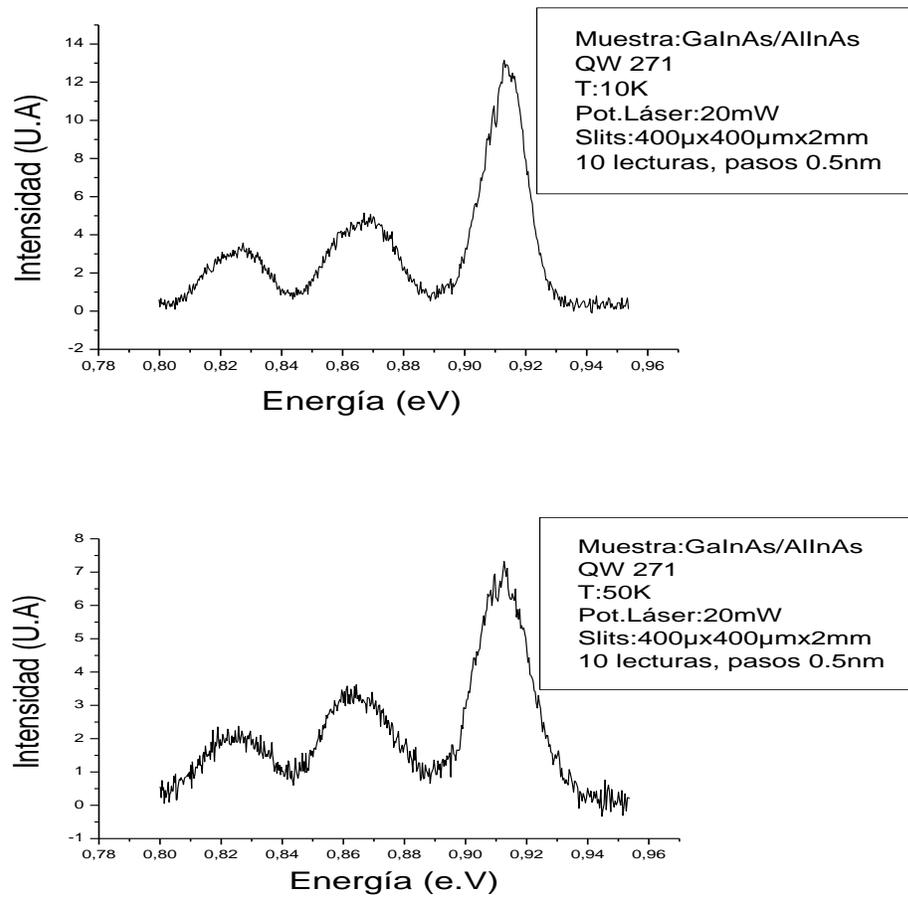


Figura A.1.12. Espectro de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico. Muestra 271 (Crecida a 675K). Variando la temperatura

PICOS	Temperatura(K)	ENERGIA (eV)	Longitud de onda (nm)
Primer pico	10	$0.9128 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1358.0 ± 0.64 nm
Segundo pico	10	$0.8694 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1430.6 ± 0.64 nm
Tercer pico	10	$0.8273 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1498.0 ± 0.64 nm
Primer pico	50	$0.9122 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1358.9 ± 0.64 nm
Segundo pico	50	$0.8636 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1437.7 ± 0.64 nm
Tercer Pico	50	$0.8264 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1505.2 ± 0.64 nm

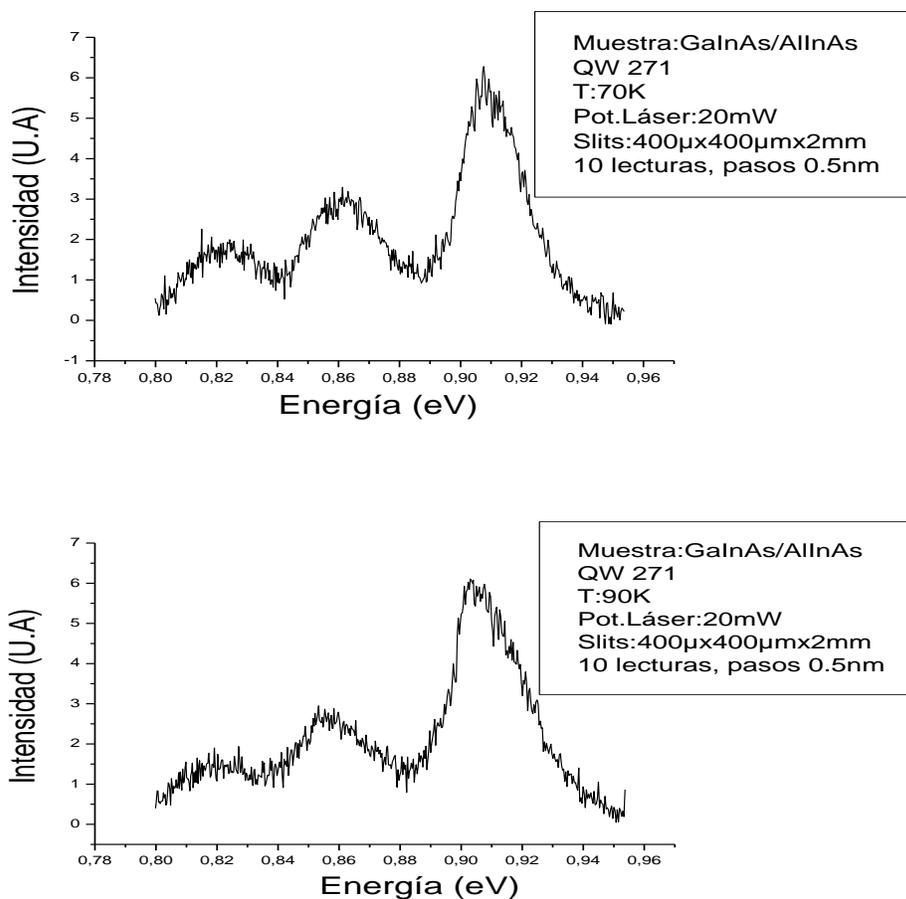


Figura A.1.13. Espectro de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico. Muestra 271 (Crecida a 675K). Variando la temperatura

PICOS	Temperatura (K)	ENERGIA (eV)	λ (nm)
Primer pico	70	$0.9076 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1366.1 ± 0.64 nm
Segundo pico	70	$0.8610 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1438.7 ± 0.64 nm
Tercer pico	70	$0.8241 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1507.3 ± 0.64 nm
Primer pico	90	$0.9031 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1373.4 ± 0.64 nm
Segundo pico	90	$0.8558 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1450.2 ± 0.64 nm
Tercer pico	90	$0.8266 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1515.8 ± 0.64 nm

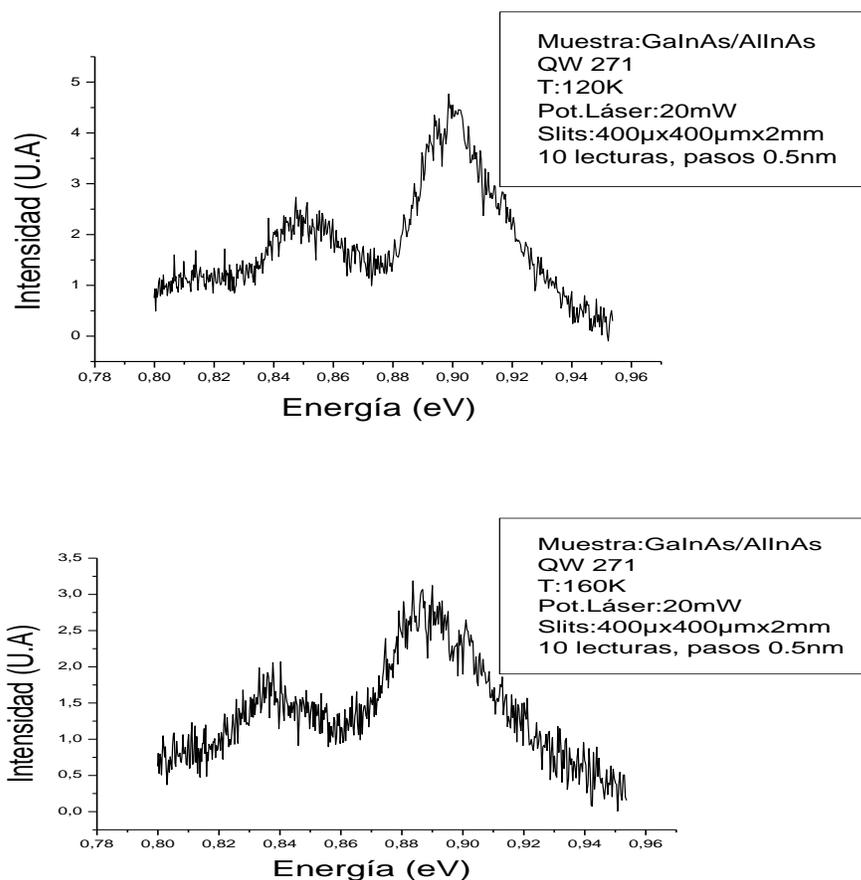


Figura A.1.14. Espectro de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico. Muestra 271 (Crecida a 675K). Variando la temperatura

PICOS	Temperatura (K)	ENERGIA (eV)	λ (nm)
Primer pico	120	$0.8985 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1379.4 ± 0.64 nm
Segundo pico	120	$0.8586 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1451.3 ± 0.64 nm
Tercer pico	120	$0.8137 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1533.8 ± 0.64 nm
Primer pico	160	$0.8869 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1397.8 ± 0.64 nm
Segundo pico	160	$0.8370 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1481.9 ± 0.64 nm
Tercer pico	160		

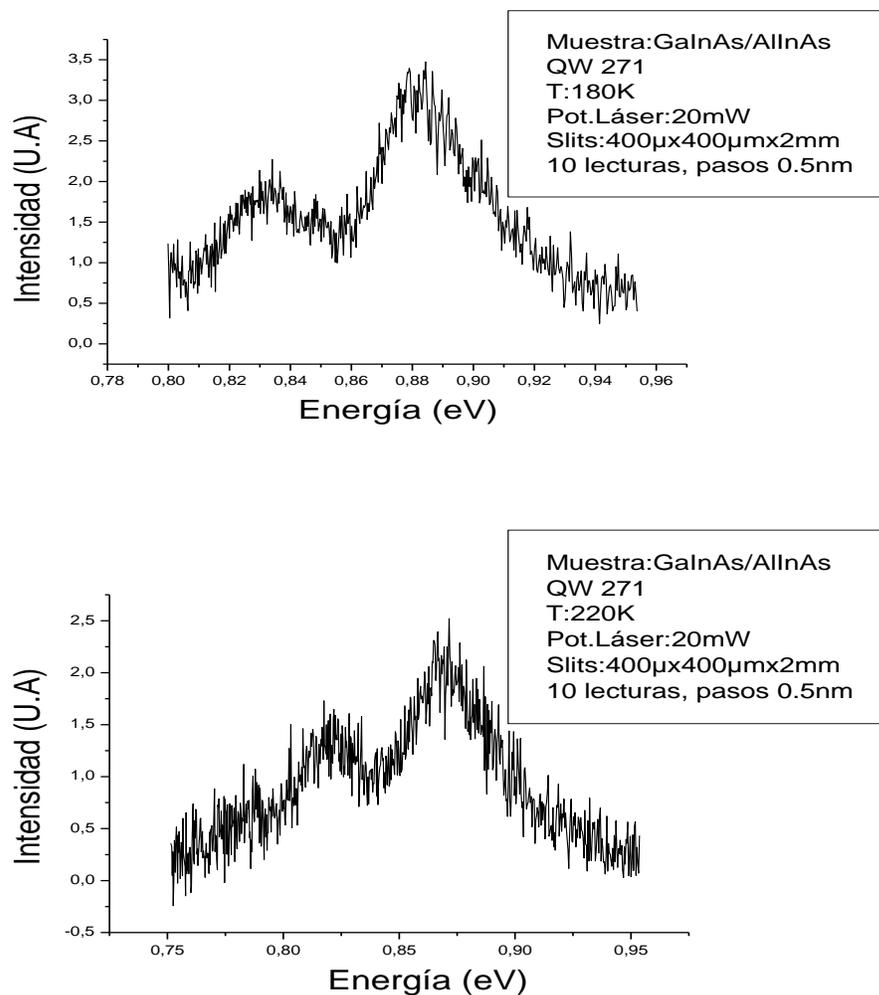


Figura A.1.15. Espectro de PL de Intensidad contra energía de GaInAs/AlInAs con estructura de pozo cuántico. Muestra 271 (Crecida a 675K). Variando la temperatura

PICOS	Temperatura (K)	ENERGIA (E _v)	λ (nm)
Primer pico	180	$0.8843 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1407.0 ± 0.64 nm
Segundo pico	180	$0.8338 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1487.0 ± 0.64 nm
Primer pico	220	$0.8736 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1425.3 ± 0.64 nm
Segundo pico	220	$0.8224 \pm 4.2 \times 10^{-4}$ eV	1509.4 ± 0.64 nm

ANEXO 2

SOLUCIÓN GRÁFICA DE LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER INDEPENDIENTE DEL TIEMPO PARA UN POTENCIAL DE POZO CUADRADO.

La influencia de las rugosidades en las interfaces de pozos cuánticos sobre las propiedades ópticas del sistema formado por un conjunto de excitones confinados en un pozo semiconductor, de interfaces abruptas, puede ser modelada a partir de un pozo de potencial cuadrado con ancho variable. Lo anterior se puede esquematizar como se indica en la siguiente figura:

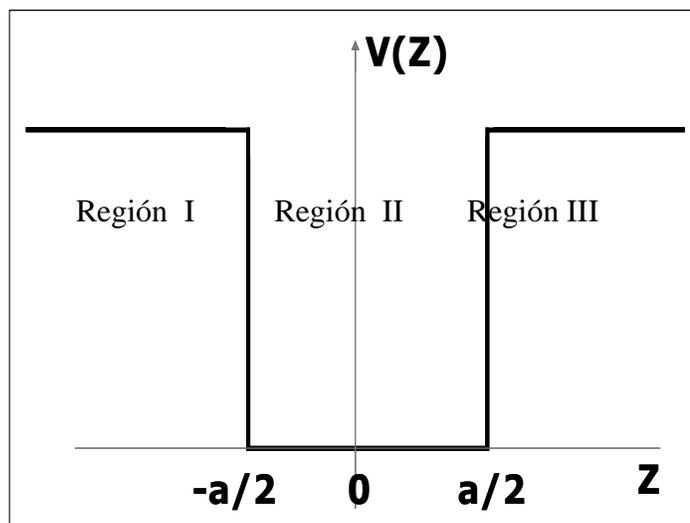


Figura A.2.1 Pozo de potencial cuadrado

El pozo de potencial cuadrado es uno de los potenciales más simples, capaces de ligar una partícula y evidenciar la cuantización de la energía. Una partícula en presencia de dicho potencial podrá ser descrita a través de la relación:

$$H\psi = E\psi \quad (18)$$

En donde el Hamiltoniano incluye un término cinético y uno potencial ($V(z)$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \nabla^2 \psi + V(Z) \psi = E \psi \quad (19)$$

Si consideramos el problema unidimensional, esta relación puede ser reescrita como:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi = 0 \quad (20)$$

De acuerdo con la Física Clásica, el movimiento de una partícula dentro en un pozo de potencial cuadrado puede tratarse como el movimiento de ondas estacionarias y la ecuación de Schrödinger, en este caso, se resuelve independiente del tiempo, en las regiones situadas afuera y dentro del pozo. El potencial del pozo cuadrado puede definirse en cada una de las tres regiones como:

$$\text{Región I} \quad -\infty < x < -a/2 \quad V(x) = V_0 \quad (21)$$

$$\text{Región III} \quad +a/2 < x < \infty \quad V(x) = V_0 \quad (22)$$

$$\text{Región II.} \quad -a/2 < x < +a/2 \quad V(x) = 0 \quad (23)$$

Si la partícula tiene un energía total $E < V_0$, entonces la partícula, según la mecánica clásica sólo puede estar dentro del pozo, en la región $-a/2 < x < +a/2$. La partícula está ligada a ésta región y va y viene entre los extremos de ella con impulso de magnitud constante pero con dirección alterna y cualquier valor de $E \geq 0$ de la energía total es posible. Pero en mecánica cuántica solamente son posibles ciertos valores de la energía total separados discretamente.

y la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo es:

$$\psi(x) = Ce^{k_1 x} + De^{-k_1 x} \quad -\infty < x < -a/2 \quad (\text{I}) \quad (24)$$

$$\psi(x) = A \sin(k_2 x) + B \cos(k_2 x) \quad -a/2 < x < +a/2 \quad (\text{II}) \quad (25)$$

$$\psi(x) = Fe^{k_1x} + Ge^{-k_1x} \quad + a/2 < x < \infty \quad (\text{III}) \quad (26)$$

$$\text{Donde } k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar}} \quad \text{y} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar}} \quad \text{con } E > V_0$$

Para determinar los valores de las constantes arbitrarias, se imponen dos requisitos:

1. Que las funciones propias permanezcan finitas para todos los x .

Al considerar este requisito para la ecuación de la región I, en el límite cuando $x \rightarrow \infty$, se exige $D = 0$ y aplicando el mismo requisito para la ecuación de la región III, en el límite cuando $x \rightarrow -\infty$, se exige $F = 0$

2. Que las funciones propias y sus primeras y segundas derivadas sean continuas.

Al considerar este requisito se obtienen las cuatro ecuaciones siguientes:

$$-A \operatorname{sen}(k_1 a / 2) + B \cos(k_1 a / 2) = C e^{k_2 a / 2} \quad (27)$$

$$A k_1 \cos(k_1 a / 2) + B k_1 \operatorname{sen}(k_1 a / 2) = C k_2 e^{-k_2 a / 2} \quad (28)$$

$$A \operatorname{sen}(k_1 a / 2) + B \cos(k_1 a / 2) = G e^{-k_2 a / 2} \quad (29)$$

$$A k_1 \cos(k_1 a / 2) - B k_1 \operatorname{sen}(k_1 a / 2) = -G k_2 e^{-k_2 a / 2} \quad (30)$$

Al solucionar el sistema, se obtiene:

$$k_1 \tan(k_1 a / 2) = k_2 \quad \text{Con } B \neq 0 \text{ y } (G + C) \neq 0 \quad (31)$$

$$k_1 \cot(k_1 a / 2) = -k_2 \quad \text{Con } A \neq 0 \text{ y } (G - C) \neq 0 \quad (32)$$

Las dos soluciones anteriores no se pueden satisfacer simultáneamente porque si así fuera, la combinación lineal de las dos, también sería una solución, es decir,

$$k_1 \tan(k_1 a / 2) + k_1 \cot(k_1 a / 2) = 0 \quad (33)$$

y al multiplicar por $\tan(k_1 a/2)$ se obtiene:

$$k_1 \tan^2(k_1 a/2) + k_1 = 0 \quad (34)$$

Entonces $\tan^2(k_1 a/2) = -1$ que no es válido si a y k_1 son reales, por lo tanto las funciones propias del pozo de potencial cuadrado forman dos clases:

$$k_1 \tan(k_1 a/2) = k_2 \quad ; \quad \text{con } A = 0 \quad \text{y} \quad (G - C) = 0 \quad (35)$$

y al reemplazar en (29), obtenemos las siguientes funciones propias para la **primera clase**.

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \left\{ B \cos(k_1 a/2) e^{k_2 a/2} \right\} e^{k_2 x} & -\infty < x < -a/2 \\ \psi(x) &= [B] \cos(k_1 x) & -a/2 < x < +a/2 \\ \psi(x) &= \left\{ B \cos(k_1 a/2) e^{k_2 a/2} \right\} e^{-k_2 x} & +\infty > x > +a/2 \end{aligned} \quad (36)$$

Para la segunda clase.

$$k_1 \cot(k_1 a/2) = k_2 \quad ; \quad \text{con } B = 0 \text{ y } G + C = 0 \quad (37)$$

y al reemplazar en (29) obtenemos las siguientes funciones propias para la **segunda clase**:

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \left\{ -A \operatorname{sen}(k_1 a/2) e^{k_2 a/2} \right\} e^{k_2 x} & -\infty < x < -a/2 \\ \psi(x) &= [A] \operatorname{sen}(k_1 x) & -a/2 < x < +a/2 \\ \psi(x) &= \left\{ A \operatorname{sen}(k_1 a/2) e^{k_2 a/2} \right\} e^{-k_2 x} & +\infty > x > +a/2 \end{aligned} \quad (38)$$

Valores propios para la primera clase.

Considerando la ecuación (35), evaluando k_1 y k_2 y multiplicando por $a/2$, se obtiene:

$$\sqrt{mEa^2/2\hbar^2} \tan\left(\sqrt{mEa^2/2\hbar^2}\right) = \sqrt{m(V_0 - E)a^2/2\hbar^2} \quad (39)$$

Para una partícula de masa m y un potencial dado de profundidad V_0 y ancho a existe una ecuación con una incógnita E . Las soluciones son los valores permitidos para la energía total de la partícula que corresponden a los valores propios para las funciones propias de la primera clase. Esta ecuación trascendente solo se puede solucionar por métodos gráficos o numéricos.

Enseguida mostramos el método gráfico para resolver la ecuación (39).

Sea $\varepsilon = \sqrt{mEa^2/2\hbar^2}$ al reemplazar en (39),

$$\text{tenemos: } \varepsilon \tan \varepsilon = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2} = q(\varepsilon) \quad (40)$$

Las intersecciones de la gráficas de las funciones $p(\varepsilon) = \varepsilon \tan \varepsilon$ y $q(\varepsilon) = \sqrt{\frac{mV_0a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2}$ son los valores de ε que son soluciones de la ecuación (40)

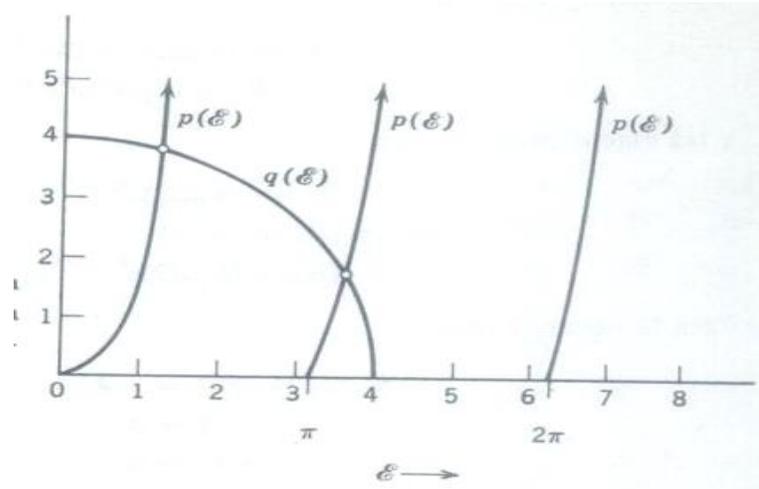


Figura A.2.2. Solución gráfica de la ecuación para valores propios de primera clase para un pozo de potencial cuadrado particular¹.

$$\varepsilon \tan \varepsilon = \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2} \quad \bullet \quad p(\varepsilon) = q(\varepsilon)$$

En la figura A.2.2 se observa que la función $p(\varepsilon)$ tiene ceros en $\varepsilon = 0, \pi, 2\pi, \dots$ y tiene asíntotas en $\varepsilon = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots$, mientras que la función $q(\varepsilon)$ es un círculo de radio

$\sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}}$, notamos claramente que el número de soluciones que existen para la ecuación

(40) dependen del radio del círculo y cada solución es un valor propio para

$E < V_0$ que corresponde a una función propia de la primera clase.

Si $\sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}} < \pi$ existe uno de estos valores propios.

Si $\pi \leq \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}} < 2\pi$ existen dos valores propios.

Si $2\pi \leq \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}} < 3\pi$ existen tres valores y así sucesivamente.

Valores propios para la segunda clase.

Con base en la ecuación (35) y siguiendo un proceso análogo a como se encontraron los valores propios para la primera clase, se hallan los valores propios para la segunda clase y

en este caso se resuelve la ecuación trascendente $-\varepsilon \cot \varepsilon = \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2}$ y se gráfica

$$r(\varepsilon) = q(\varepsilon) \quad \text{con} \quad r(\varepsilon) = -\varepsilon \cot \varepsilon \quad \text{y} \quad q(\varepsilon) = \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2} - \varepsilon^2} \quad (41)$$

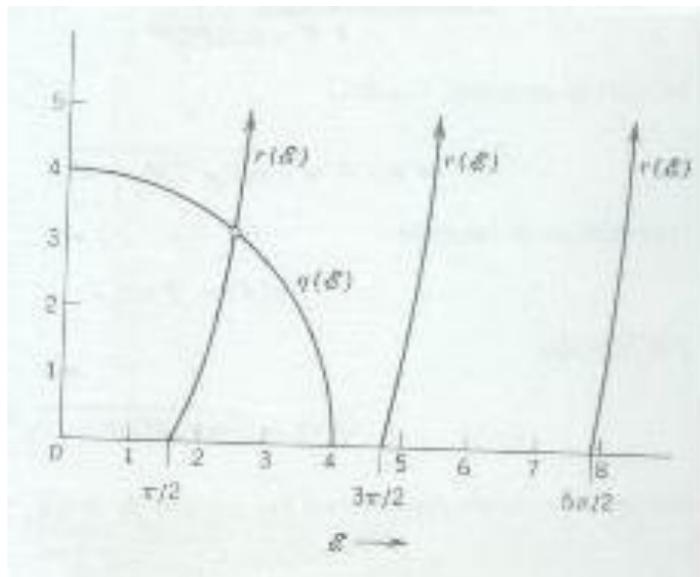


Figura A.2.3. Solución gráfica de la ecuación para valores propios de segunda clase para un pozo de potencial cuadrado particular.

La Figura A.2.3 muestra solución de la ecuación (41), en ella se observa que no hay soluciones para $E < V_0$ que corresponden a funciones propias de la segunda clase si

$$\sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}} < \frac{\pi}{2}$$

Si $\frac{\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}} < \frac{3\pi}{2}$ Habrá un valor propio.

Si $\frac{3\pi}{2} \leq \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}} < \frac{5\pi}{2}$ Habrán dos valores propios y así sucesivamente.

Se observa que para un pozo de potencial cuadrado dado, solamente existe un número restringido de valores permitidos de la energía total E para $E < V_0$. Estos son los valores propios discretos para los estados ligados de la partícula. Para $E > V_0$ está permitido cualquier valor de E. Los valores propios para los estados no ligados forman un continuo. Para un pozo de potencial poco profundo y/o muy estrecho, solamente uno de los valores propios de la primera clase estará ligado. Al incrementar los valores de $\sqrt{\frac{mV_0 a^2}{2\hbar^2}}$ se obtendrá un valor ligado de la segunda clase y así sucesivamente.

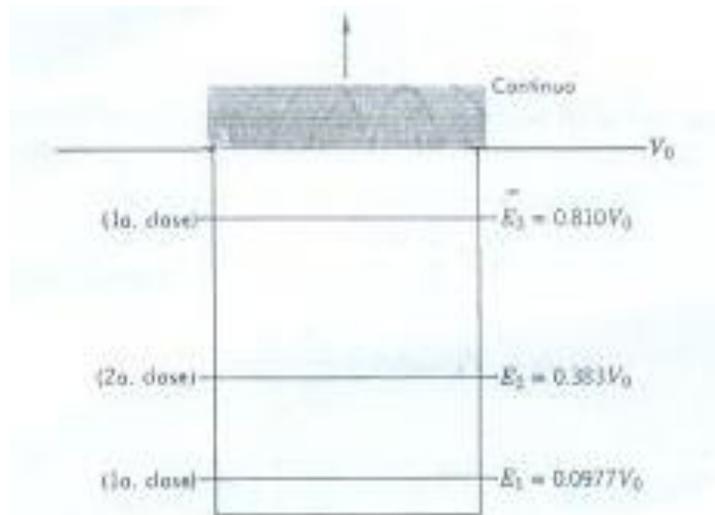


Figura A.2.4. Valores propios para un pozo de potencial cuadrado particular.

Anexo 3

Dilatación Térmica

Los cambios de temperatura en los materiales tienen como efectos más comunes, cambios de tamaño o cambios de estado.

Para estudiar el cambio de tamaño, sin que ocurran cambios de estado, escogemos como modelo un sólido cristalino. Sus átomos se mantienen juntos en una disposición regular por el efecto de fuerzas de origen eléctrico, las cuales se pueden asimilar a las fuerzas originadas por un conjunto de “resortes” muy rígidos que mantienen unidos dichos átomos y cuya densidad es aproximadamente de $10^{22}/\text{cm}^3$ (Fig. A.3.1)

A cualquier temperatura los átomos del sólido vibran con amplitud aproximada de 10^{-9} cm, lo que representa 1/10 del diámetro atómico y con frecuencia de vibración de aproximadamente 10^{13} hertz.

Cuando se aumenta la temperatura, la distancia promedio entre los átomos aumenta, originando una dilatación del cuerpo sólido. La dilatación del espesor, la anchura o el largo, se denomina dilatación lineal y experimentalmente se ha demostrado que el cambio en la longitud debido al cambio en la temperatura de un material se puede calcular mediante la siguiente ecuación.

$$\Delta l = l\alpha\Delta T$$

Donde: Δl es el cambio de longitud, α es el coeficiente de dilatación térmica lineal (Diferente para cada material), ΔT es el cambio de temperatura

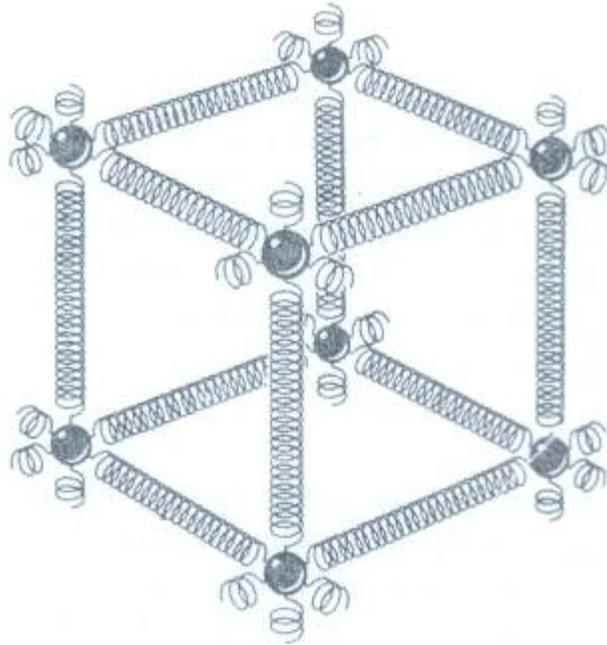


Figura A.3.1 Modelo mecánico para representar las fuerzas que mantienen unidos los átomos de un sólido cristalino.

El valor de α depende de la temperatura real y de la temperatura de referencia que se elija para calcular l , pero para la precisión que se maneja en ingeniería, se puede considerar independiente de la temperatura y constante para cada material, en nuestro caso, como el trabajo está dentro del marco de la nanofísica, consideraremos el cambio de α con la temperatura.

La expansión térmica de un sólido, a nivel microscópico, sugiere un aumento en la separación promedio entre los átomos del sólido. La curva de energía potencial de átomos contiguos en un sólido cristalino, como función de su separación internuclear, es una curva asimétrica, como se observa en la figura A.3.2

Cuando los átomos se aproximan, su separación disminuye con respecto al valor del equilibrio r_0 , entonces intervienen fuerzas repulsivas intensas y la curva de potencial

aumenta rápidamente. $F = -dU/dr$. Conforme los átomos se alejan, sus separaciones aumentan respecto al valor de equilibrio y entonces intervienen fuerzas un tanto más débiles y la curva de potencial aumenta más lentamente.

Para una energía vibracional dada, la separación de los átomos cambiará periódicamente de un valor mínimo a un máximo y la separación promedio será mayor que la separación de equilibrio, debido a la naturaleza asimétrica de la curva de energía potencial. Cuando la energía vibracional se hace más grande, la separación promedio también se hará mayor. El efecto se incrementa porque al tomar el promedio temporal del movimiento, se debe tener en cuenta el mayor tiempo transcurrido en las separaciones extremas, porque en sus puntos la rapidez vibracional es menor. Debido a que la energía vibracional aumenta con el aumento de temperatura, la separación entre los átomos aumenta y el sólido se expande.

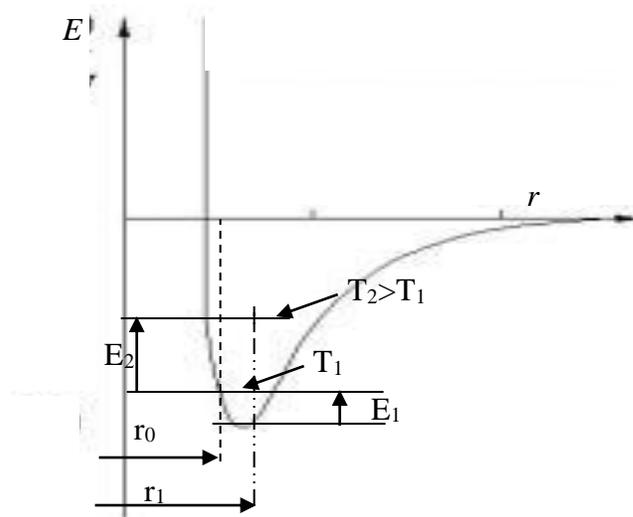


Figura A.3.2 Curva de energía potencial de dos átomos contiguos en un sólido cristalino en función de la separación internuclear.

Si la curva de potencial fuese simétrica en torno a la separación de equilibrio, la separación promedio correspondería a la separación de equilibrio, sin importar el valor de la amplitud de la vibración, lo que indica que la expansión térmica es una consecuencia directa de la asimetría de la curva de energía potencial que caracteriza a los sólidos.

Algunos sólidos cristalinos pueden contraerse, en ciertas regiones de temperatura, cuando la temperatura aumenta, pero el análisis anterior sigue teniendo validez, si se considera que existen únicamente modos de vibración compresionales, es decir, longitudinales y que esos modos son predominantes. Sin embargo, los sólidos pueden vibrar en modos transversales, es decir, cortantes, al igual que en modos vibracionales y esto hace que los sólidos se contraigan a medida que se aumenta la temperatura, disminuyendo con ello la separación promedio de los planos atómicos. En ciertos tipos de estructuras cristalinas, y para ciertos intervalos de temperatura, los modos transversales de vibración pueden predominar sobre los longitudinales, dando lugar a un coeficiente de dilatación térmica negativo, además también se debe considerar si el sólido es isotrópico o anisotrópico.

Anexo 4

PARTICIPACION EN EVENTOS Y PUBLICACION EN REVISTA NACIONAL

Los resultados de este trabajo fueron presentados parcialmente en el XX Congreso Nacional de Física realizado en la Universidad del Quindío en 2003.

Los resultados fueron publicados en la Revista Colombiana de Física. El artículo es presentado en el presente anexo.
