



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS**

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

***“Estructura electrónica de sistemas con pozos cuánticos  
delta-dopados múltiples”***

## **TESIS**

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

***DOCTOR EN CIENCIAS***

PRESENTA

***HUMBERTO NOVEROLA GAMAS***

**DIRECTOR DE TESIS**

***Dr. Outmane Oubram***

***Codirector de Tesis***

***Dr. Luis Manuel Gaggero Sagger***



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

Coordinación de Programas Educativos

Posgrado en Ciencias

Cuernavaca, Mor., 11 de febrero de 2020

PC/0166/2020

**M. en C. Humberto Noverola Gamas**  
**Candidato a Doctor en Ciencias**  
**Presente**

La Comisión Académica del Posgrado en su reunión del 05 de febrero del 2020 aprobó su solicitud para la integración del comité examinador de su tesis titulada: **“Estructura electrónica de sistemas con pozos cuánticos delta-dopados múltiples”** el jurado queda integrado por:

JURADO	NOMBRE	ADSCRIPCIÓN	LÍNEA DE INVESTIGACIÓN
Presidente	Dr. Rolando Pérez Álvarez	CInC-UAEM	Sistemas Cuánticos y Química Computacional
Secretario	Dr. Raúl Salgado García	CInC-UAEM	Física Estadística y Sistemas Complejos
Vocal	Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos	CInC-UAEM	Sistemas Cuánticos y Química Computacional
Vocal	Dr. Isaac Rodríguez Vargas	UACTLM-UAZ	Propiedades electrónicas y de transporte en materiales 2D y Semiconductores
Vocal	Dr. Juan Carlos Martínez Orozco	UAF-UAZ	Propiedades optoelectrónicas de sistemas cuánticos semiconductores
Suplente	Dr. Outmane Oubram	FCQel-UAEM	Automatización de procesos y simulación de propiedades nano-optoelectrónicas
Suplente	Dr. Luis Manuel Gaggero Sager	CIICAP-UAEM	Sistemas Cuánticos y Química Computacional

Por lo tanto, le pido se ponga en contacto con los Doctores antes mencionados para hacerles entrega del oficio de invitación a formar parte de jurado examinador y haga entrega de una copia de su tesis.

Sin más por el momento, aprovecho la ocasión para enviarle un cordial saludo.

**ATENTAMENTE**  
*Por una humanidad culta*  
*Una universidad de excelencia*

**Dr. Victor Barba López**  
**Coordinador del Posgrado en Ciencias**



C.c.p. Expediente

Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca Morelos, México, 62209  
Tel. (777) 329 70 00, Ext. 6011 posgradoenciencias@uaem.mx  
dvsf\*

**UA  
EM**

Una universidad de excelencia

RECTORÍA  
2017-2023

*Para Ofe y Regi*

# Agradecimientos

Agradezco en primer lugar a mi familia, la cual estuvo siempre a mi lado apoyándome durante estos cuatro años. Especialmente a mi esposa Ofe y a mi hija Regina, quienes fueron mi motivación.

Sin duda, quiero agradecer a mis dos asesores: al Dr. Outmane Oubram y al Dr. Luis Manuel Gaggero Sager ya que sin ellos habría sido imposible lograr este trabajo y los artículos que hemos publicado. Agradezco su apoyo académico y todos sus consejos los cuales me han formado como un investigador y un mejor ser humano.

A mi comité tutorial integrado por mis asesores y el Dr. Raúl Salgado García que, gracias a sus comentarios, sugerencias y críticas, hicieron de esta tesis un mejor trabajo.

Al comité evaluador integrado por los profesores-investigadores: Dr. Rolando Pérez Álvarez, Dr. Raúl Salgado García, Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos, Dr. Isaac Rodríguez Vargas, Dr. Juan Carlos Martínez Orozco, Dr. Outmane Oubram y el Dr. Luis Manuel Gaggero Sager, quienes con sus comentarios, impresiones, preguntas y sugerencias mejoraron significativamente mi trabajo.

Particularmente agradezco al Dr. Mora por su apoyo en el desarrollo de la teoría detallada en los apéndices A y B de este trabajo.

Reconozco a Cristina, Verónica, Omar y Mayumi de Posgrado y Servicios Escolares por siempre estar al pendiente de mi desarrollo profesional y por todo su apoyo.

Quiero agradecer al Posgrado en Ciencias de la UAEM por la oportunidad de ser parte de su historia.

Gratifico al Programa para el Desarrollo Profesional Docente (PRODEP Folio UJAT-245) por el apoyo de beca doctoral durante los tres primeros años y al Conacyt por otorgarme la beca doctoral el último año de mi posgrado.

Sin duda mi más grande reconocimiento y gratitud a la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco quien mediante su Programa Institucional de Superación Académica (PISA 2016–1 UJAT) me otorgó la descarga académica total con el fin de estudiar este doctorado.

# Lista de publicaciones

[1] H. Noverola-Gamas, L. M. Gaggero-Sager, O. Oubram. Optical absorption coefficient in  $n$ -type double  $\delta$ -doped layers GaAs quantum wells. *Int. J. Mod. Phys. B* 2019; **33**: 1950215.

[2] H. Noverola-Gamas, L. M. Gaggero-Sager, O. Oubram. Interlayer distance effects on absorption coefficient and refraction index change in  $p$ -type double  $\delta$ -doped GaAs quantum wells. *Chin. Phys. B* 2019; **28**, 124207.

[3] H. Noverola-Gamas, L. M. Gaggero-Sager, O. Oubram. Model of  $n$ -type quadruple  $\delta$ -doped GaAs quantum wells. *Eur. Phys. J. B* 2020; **93**: 18.

## **En colaboración**

[4] O. Oubram, O. Navarro, I. Rodríguez-Vargas, L. M. Gaggero-Sager, H. Noverola-Gamas. Controlling the optical absorption properties of  $\delta$ -FETs by means of contact voltage and hydrostatic pressure effects. *Superlattice Microst.* 2019; **127**: 157.

# Resumen

Dentro de los sistemas de gran relevancia en la física de Semiconductores se encuentran los pozos cuánticos delta-dopados, los cuales se fabrican al dopar un semiconductor con otro elemento en una capa bidimensional de ancho atómico. Derivado de esta idea surgieron los pozos delta-dopados dobles DDD, los cuales consisten en semiconductores fuertemente dopados en dos capas bidimensionales paralelas de ancho atómico.

En el marco de la teoría de Thomas-Fermi hemos determinado la estructura electrónica de un sistema DDD en GaAs, y particularmente estudiamos los efectos de la distancia interplanar en las propiedades ópticas no lineales de este sistema con dopaje tipo  $n$  y tipo  $p$ .

Dichas propiedades están determinadas en función de dos parámetros principales: la concentración del dopante y la distancia de separación entre las capas. Así pues calculamos el coeficiente de absorción y el cambio relativo en el índice de refracción para electrones y huecos pesados como medida de la distancia entre capas dopantes.

Además hemos propuesto un modelo físico para estudiar la estructura electrónica en un sistema delta dopado cuádruple (DDC) con dopaje tipo  $n$ , como medida de los parámetros previamente citados.

En la actualidad las estructuras con múltiple dopaje deltaico son empleadas en la ingeniería de dispositivos electrónicos y ópticos.

# Abstract

The delta-doped quantum wells are of great interest in semiconductor physics, and are manufactured by doping a semiconductor with another element in a two-dimensional layer growth layer by layer. Derived from this system, the double delta doped (DDD) quantum wells emerged, which consist of semiconductors strongly doped in two parallel two-dimensional layers of atomic width.

In the framework of Thomas-Fermi approximation, we determined the electronic structure of a DDD system in GaAs, particularly we study the effects of interlayer distance on the nonlinear optical properties of this  $n$ -type and  $p$ -type system.

These properties are determined based on two main parameters: the dopant concentration and the interlayer distance. So we calculate the absorption coefficient and the relative change on the refractive index for electrons and heavy holes versus the distance between doped layers. We have also proposed a physical model to study the electronic structure in a quadruple delta-doped system (QDD) with  $n$ -type doping, as a measure of the parameters previously mentioned.

At present, structures with multiple delta doping are used in the engineering of electronic and optical devices.

# Índice general

Agradecimientos	II
Lista de publicaciones	III
Resumen	IV
Abstract	V
Índice de figuras	VII
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Generalidades . . . . .	1
1.2. Materiales III-V . . . . .	3
1.3. Sistemas dopados . . . . .	6
1.3.1. El $\delta$ -dopado . . . . .	8
1.4. Aproximación de masa efectiva por el método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ . . . . .	9
1.5. Teoría de Thomas-Fermi . . . . .	12
1.5.1. Teoría Thomas-Fermi en pozos $\delta$ -dopados tipo $n$ . . . . .	16
1.5.2. Teoría de Thomas-Fermi en pozos $\delta$ -dopados tipo $p$ . . . . .	20
<b>2. Técnicas de cálculo</b>	<b>24</b>
2.1. Matriz de transferencia . . . . .	24
2.1.1. Potencial simétrico . . . . .	28
2.2. Método de diagonalización . . . . .	30

<b>3. Sistemas <math>\delta</math>-dopados: modelos previos</b>	<b>34</b>
3.1. Delta dopado simple . . . . .	34
3.2. Delta dopado doble . . . . .	35
<b>4. Nuevos modelos del <math>\delta</math>-dopado</b>	<b>38</b>
4.1. Delta dopado doble . . . . .	38
4.2. Delta dopado cuádruple . . . . .	41
4.3. Determinación de la energía de Fermi . . . . .	43
<b>5. Resultados</b>	<b>45</b>
5.1. El GaAs $\delta$ -dopado doble tipo $n$ . . . . .	45
5.1.1. Estructura electrónica . . . . .	47
5.1.2. Coeficiente de absorción . . . . .	50
5.1.3. Cambio en el índice de refracción . . . . .	54
5.2. El GaAs $\delta$ -dopado doble tipo $p$ . . . . .	57
5.2.1. Estructura electrónica . . . . .	58
5.2.2. Coeficiente de absorción . . . . .	60
5.2.3. Cambio en el índice de refracción . . . . .	63
5.3. El $\delta$ -dopado cuádruple . . . . .	64
5.3.1. Estructura electrónica . . . . .	66
<b>6. Conclusiones</b>	<b>72</b>
<b>7. Apéndices</b>	<b>74</b>
7.1. Apéndice A: Matriz densidad . . . . .	74
7.2. Apéndice B: Definiciones previas: Óptica lineal y no lineal . . . . .	85
7.2.1. Óptica lineal . . . . .	85
7.2.2. Óptica no lineal . . . . .	87

# Índice de figuras

1.1. Representación de una celda tipo <i>zinc – blenda</i> . En este caso uno de los átomos representa al As y el otro al Ga. En la figura <i>a</i> representa la constante de red. . . . .	4
1.2. Primera zona de Brillouin y puntos de alta simetría para la red <i>fcc</i> correspondientes a una estructura tipo <i>zinc – blenda</i> en GaAs. . . . .	5
1.3. Estructura de bandas del GaAs. Se muestran los tres valles principales y las bandas asociadas a <i>hh</i> , <i>lh</i> y <i>so</i> . . . . .	5
1.4. Muestra los diferentes tipos de dopaje en una estructura a base de Silicio (Si). En la imagen superior a) se muestra el dopaje tipo <i>n</i> en el que un P sustituye un Si, generando un electrón extra. En b) tenemos un B que sustituye a un Si produciendo una vacancia (hueco) teniendo dopaje tipo <i>p</i> . . . . .	7
1.5. Muestra a) un esquema del dopaje tipo delta de Si en una estructura de GaAs. En b) se presenta el perfil de potencial producido por la capa de impurezas ionizadas, los niveles de energía y sus correspondientes funciones de onda. . . . .	9
2.1. Representación esquemática de un pozo cuántico rectangular de ancho <i>a</i> y fondo $V_0$ . . . . .	31

3.1.	Muestra el perfil de potencial para dos diferentes distancias intercapas. En ambos casos el fondo del potencial es el mismo. Se ha usado una densidad bidimensional de impurezas efectiva con un valor $N_{2D} = 4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	37
4.1.	Esquema de una estructura $\delta$ -dopada cuádruple. En esta figura se muestra una sección transversal de la estructura citada relacionada al plano $xz$ o $yz$ . En azul los cuatro planos dopantes separados a una distancia $d$ . . . . .	42
5.1.	Perfil de potencial de una estructura DDD en GaAs tipo $n$ . Se muestran diferentes perfiles para diferentes valores de distancias entre capas dopantes $d$ . En este caso se ha considerado la densidad de impurezas bidimensionales $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	46
5.2.	Muestra el perfil de potencial, las autoenergías y auto funciones de un sistema DDD con distancias de separación a) $d = 25 \text{ \AA}$ y b) $d = 50 \text{ \AA}$ . En ambos casos se ha empleado una densidad de impurezas ionizadas $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	48
5.3.	Niveles de energía del sistema $\delta$ -doble dopado en GaAs tipo $n$ contra la distancia intercapas $d$ . Se muestran las distancias de degeneración de los niveles energéticos, así como en nivel de Fermi representado por la línea segmentada. Se ha considerado que la densidad de impurezas ionizadas en cada plano dopante sea $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	49
5.4.	Comportamiento del cuadrado de los elementos de matriz de dipolo relativos respecto a la distancia de separación entre capas dopantes $d$ . Para este cálculo hemos tomado las funciones propias asociadas al DDD con la concentración de $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ . . . . .	52
5.5.	Coefficiente de absorción relativo a) lineal b) no lineal y c) total de un sistema DDD para diferentes valores de distancias intercapas. Se ha usado como referencia la transición 1-0 de un sistema delta dopado simple. Se ha usado para este cálculo $\tau_{in} = 0.14 \text{ ps}$ . . . . .	53

5.6. Muestra los coeficientes de absorción relativos totales para a)  $d = 25$  y b)  $d = 50$  Å. En ambos casos se ha usado como referencia el coeficiente de absorción en la transición 1-0 para un pozo delta aislado simple con una concentración fija  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  . . . . . 55

5.7. Cambio en el índice de refracción relativo para una estructura delta doble dopada tipo  $n$  en GaAs. Para este cálculo se empleó una densidad bidimensional de impurezas ionizadas  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y una intensidad de haz luminoso  $I = 0.1 \text{ MW/cm}^2$ . La gráfica en negro representa el valor de referencia para el cambio en el índice de refracción para un sistema delta aislado. . . . . 56

5.8. Comportamiento del perfil de potencial para una estructura DDD tipo  $p$  en GaAs. Se muestra el cambio de la geometría del potencial con relación a la distancia de separación entre capas dopantes  $d$ . Se ha empleado un valor de densidad de impurezas ionizadas  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . . . . . 58

5.9. Perfil de potencial, niveles de energía y funciones de onda para valores de distancias intercapas a)  $d=10$  Å, b)  $d=25$  Å y c)  $d=50$  Å respectivamente. Para todos los casos, la concentración de impurezas en cada capa dopantes es  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . En cada figura, están indicados los niveles correspondientes a huecos pesados ( $hh$ ) y a huecos ligeros ( $lh$ ). . . . . 59

5.10. Muestra el cuadrado del momento dipolar relativo entre el cuadrado de la carga eléctrica versus la distancia de separación entre capas dopantes en una estructura DDD tipo  $p$  en GaAs. Se ha usado una concentración constante de  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  por capa, además de que el valor de referencia se ha calculado para la transición 1-0 de un sistema de capa aislada. . . . . 62

5.11. Coeficiente de absorción relativo a) lineal, b) no lineal y c) total; para una estructura DDD tipo  $p$ . El cálculo es relativo respecto al coeficiente de un delta dopado simple en la transición 1-0. . . . . 63

5.12. Cambio en el índice de refracción relativo de un DDD tipo  $p$ , respecto a una capa aislada simple. Se muestra a) el caso lineal, b) no lineal y c) total. . . . . 64

5.13. Perfil de potencial del delta-dopado cuádruple tipo  $n$  en GaAs para diferentes distancias de separación  $d$ . Cálculos realizados con una concentración de impurezas ionizadas  $N_{2D} = 2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . . . . . 66

5.14. Perfil de potencial, niveles de energía, funciones de onda y nivel de Fermi de una estructura DDC tipo  $n$  en GaAs con a)  $d = 50 \text{ \AA}$  y b)  $d = 100 \text{ \AA}$ . En ambos casos la concentración de impurezas ionizadas en cada una de las cuatro capas es  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . . . . . 67

5.15. Perfil de potencial, niveles de energía, funciones de onda y nivel de Fermi de una estructura con el nuevo modelo para el DDC tipo  $n$  en GaAs con a)  $d = 50 \text{ \AA}$  y b)  $d = 100 \text{ \AA}$ . En ambos casos la concentración de impurezas ionizadas en cada una de las cuatro capas es  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . . . . . 71

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Generalidades

En el presente, diferentes métodos permiten realizar cálculos de propiedades físicas en los semiconductores. Tal es el caso de la Teoría del Funcional de la Densidad (Density Functional Theory: DFT) que permite describir una gran variedad de cálculos de propiedades electrónicas, ópticas, mecánicas y más [1, 2, 3, 4]. Pero en DFT, la eficiencia de rutinas de diagonalización determina fuertemente el tiempo del proceso de cálculo [5]. Otro camino para determinar propiedades físicas de los Semiconductores es la aproximación de Thomas-Fermi (TF) [6], en la cual se determina la estructura electrónica en un material de una forma mucho más sencilla en comparación a DFT.

Por otro lado, recientemente, ha tomado gran relevancia el estudio de estructuras cuánticas de bajas dimensiones, tales como los *quantum dots* (puntos cuánticos), *quantum wires* (alambres cuánticos) y los llamados *quantum wells* (pozos cuánticos) [7, 8, 9, 10, 11]. Dentro del marco de la teoría Thomas-Fermi (TF), es posible determinar la estructura electrónica de las estructuras como pozos cuánticos (QW's). Existe una gran variedad de estructuras tipo QW's, como heteroestructuras y dopajes delta. Por su parte, los pozos cuánticos han sido sujeto de un gran número de investigaciones debido principalmente a sus propiedades electrónicas y ópticas [12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22] y por los cambios en dichas propiedades debido a efectos externos [23, 24, 25, 26, 27, 28, 29]. Den-

tro de los pozos cuánticos, estudiaremos particularmente los llamados delta dopados [30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39] que tomaron gran relevancia en el pasado reciente. Las propiedades físicas de los sistemas delta cambian significativamente respecto a otros pozos cuánticos debido al fuerte confinamiento de carga derivado de que las impurezas ionizadas en el sistema se ubican únicamente en un plano bidimensional [40]. En estos sistemas con una capa 2-D de impurezas se crea un perfil de potencial muy particular conocido como "forma de V". Dichos sistemas son esenciales en el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos desde su introducción por Wood en los años 80's [41].

Los sistemas delta dopados son posibles gracias a técnicas de crecimiento epitaxial, tal como la Epitaxia de Haces Moleculares (MBE) [42, 43, 44, 45, 46] que permite el crecimiento capa por capa en una determinada dirección cristalina.

Técnicas como el MBE permitieron el desarrollo de nuevos sistemas como los  $\delta$ -dopados dobles (DDD), que cambiaron las propiedades de los sistemas cristalinos respecto a los sistemas  $\delta$ -simple. En los sistemas DDD el transporte en los portadores de carga se incrementa además de que se abren nuevos canales de conducción [47, 48].

Por otro lado, la base para la ingeniería de dispositivos optoelectrónicos son las transiciones intersubbanda en estructuras semiconductoras tipo QW's [49, 50, 51]. Dentro de esta ingeniería podemos encontrar transistores de efecto de campo, detectores de luz, diodos emisores, heteroestructuras multicapas y otros dispositivos de nueva generación [52, 53, 54, 55]. Para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos, la disposición de las capas tipo  $n$  y tipo  $p$  en *sándwich* es esencial, un claro ejemplo es el diodo láser basado en GaAs [56]; en esta estructura, los portadores de carga están confinados en la región central del pozo cuántico. Particularmente los pozos cuánticos tipo  $p$  y  $n$  son muy importantes en el desarrollo de celdas solares [57], además de ser usados en LED's con crecimiento MBE [58].

En trabajos relativamente recientes, se han reportado cálculos de propiedades ópticas y electrónicas de sistemas con dopaje delta doble tipo  $n$ , en los cuales se ha propuesto como solución matemática el principio de superposición de dos sistemas  $\delta$ -simples [14, 59, 60, 61]. En estos modelos, no se toma en consideración que la

ecuación de Poisson asociada al sistema es una ecuación diferencial no lineal, que por ende no admite el principio de superposición.

En relación a lo anterior, trabajos *ab initio* recientes [33, 34, 62] han determinado la estructura electrónica de un sistema  $\delta$ -dopado doble en Silicio con impurezas de Fósforo. En este artículo muestran la estructura electrónica del sistema versus la distancia de separación entre las capas dopadas. Sus cálculos determinaron que la distribución de los portadores de carga es una función de la distancia entre capas de impurezas. Además demostraron que cuando dos capas son muy próximas entre sí, el sistema se comporta como una sola capa delta con un mínimo que tiende al doble de cada una de las capas aisladas. Estos cálculos nos han permitido sustentar una idea más clara del comportamiento del perfil de potencial a medida que las dos capas de impurezas ionizadas son próximas entre sí, y discrepar de esta manera de modelos previos en la literatura.

Por otra parte trabajos como el de Zheng et al. [63], han mostrado la importancia del dopaje doble respecto al dopaje simple, ya que, específicamente la movilidad electrónica se ve beneficiada cuando tenemos sistemas dobles respecto a los sencillos. Lo anterior se debe a las diferentes configuraciones del confinamiento de los portadores de carga como función de la distancia intercapas.

Nuestro trabajo se centra en el cálculo de los efectos de la distancia intercapas en las propiedades ópticas lineales y no lineales en un sistema DDD para GaAs tipo  $n$  y tipo  $p$ . Además, a partir del modelo doble, hemos propuesto un nuevo modelo en la literatura que muestra la estructura electrónica de un sistema  $\delta$ -cuádruple dopado.

## 1.2. Materiales III-V

Dentro de los compuestos llamados III-V, el Arseniuro de Galio (GaAs) es uno de los más estudiados [64], debido a que fue uno de los primeros materiales que fueron sujeto de estudio. Este material presenta un enlace tipo covalente, rígido y direccional, característico de los orbitales  $sp^3$  de sus electrones de la banda de valencia.

El GaAs presenta una configuración cristalina tipo *zinc – benda* que consiste en

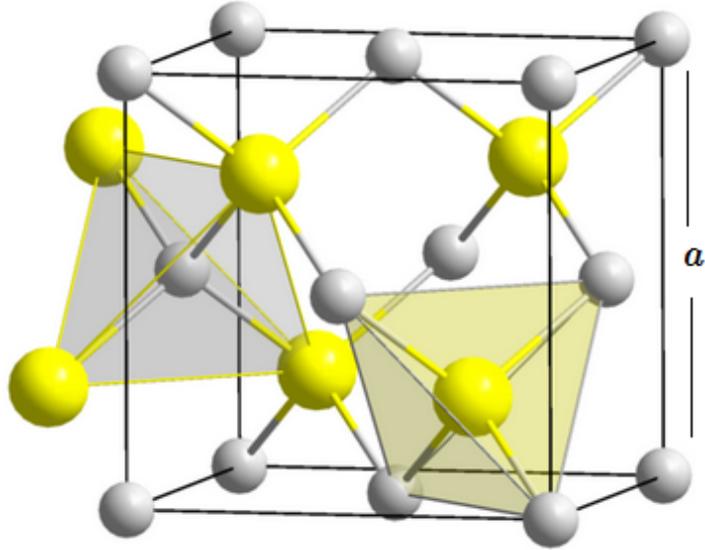


Figura 1.1: Representación de una celda tipo *zinc – blenda*. En este caso uno de los átomos representa al As y el otro al Ga. En la figura  $a$  representa la constante de red.

dos redes cúbicas centradas en la cara (*fcc*) entrelazadas, desplazadas una de la otra por una traslación  $(a/4)(1, 1, 1)$  sobre la diagonal principal donde  $a$  es el parámetro de red. Lo anterior se puede apreciar en la **figura 1.1 [65]**, donde se muestra que las coordenadas de los átomos base son  $(000)$  y  $a/4(111)$ . Particularmente el GaAs presenta simetría del grupo puntual  $T_d$ . En esta estructura, los puntos de una de las redes *fcc* están ocupados por los átomos de Ga (cationes) y los otros puntos por los As (aniones). En relación a la red recíproca del GaAs, ésta es una del tipo centrada en el cuerpo (*bcc*), de tal forma que su primera zona de Brillouin es un octaedro truncado; lo anterior puede verse a detalle en la **figura 1.2 [66]** donde además se observan los puntos de alta simetría definidos como  $\Gamma$  ( $k_x = k_y = k_z = 0$ ),  $X$  ( $k_x = 0, k_y = 2\pi/a, k_z = 0$ ) y  $L$  ( $k_x = k_y = k_z = 2\pi/a$ ), donde  $a$  representa la constante de la red.

En el sólido de GaAs, los electrones de valencia están deslocalizados y forman bandas de energía. Los dos electrones que ocupan el orbital *s* dan lugar a la banda de conducción, mientras que los otros seis electrones ocupan los tres orbitales tipo *p* dando lugar a las tres bandas de valencia: banda de huecos pesados (*hh*), de huecos ligeros (*lh*) y de desdoblamiento (*so*) [67]. En la **figura 1.3** notamos que el máximo

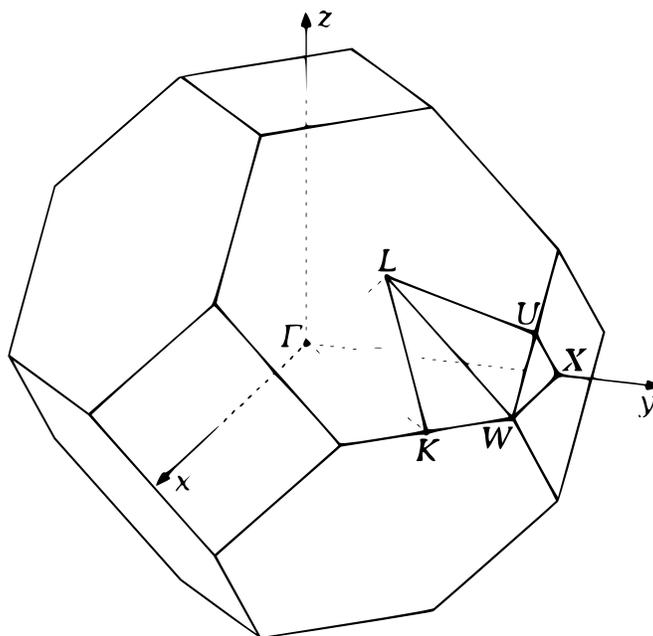


Figura 1.2: Primera zona de Brillouin y puntos de alta simetría para la red *fcc* correspondientes a una estructura tipo *zinc-blenda* en GaAs.

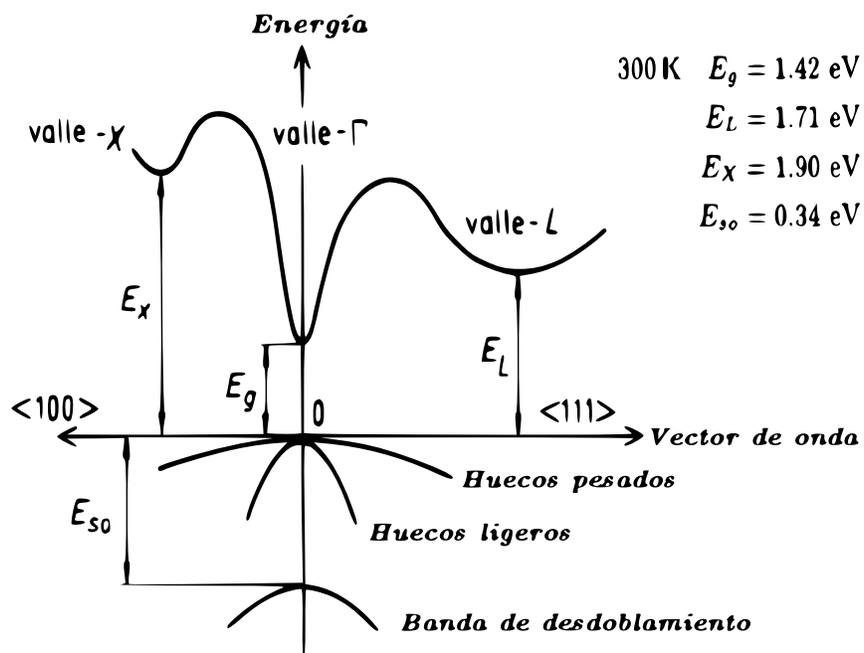


Figura 1.3: Estructura de bandas del GaAs. Se muestran los tres valles principales y las bandas asociadas a *hh*, *lh* y *so*.

de la banda de valencia se localiza sobre el punto  $\Gamma$  de la zona de Brillouin, y sin considerar la interacción espín-órbita, se dice que las tres bandas están degeneradas. Por otro lado, en la misma figura se puede observar que el mínimo en la banda de conducción se localiza sobre el mismo punto  $\Gamma$ , por esta razón se dice que el GaAs es un material de *banda prohibida* directa (GAP directo). Es importante mencionar que en el entorno de  $\Gamma$  las bandas de conducción y de valencia se pueden considerar parabólicas.

Algunos parámetros importantes en este sistema son: la constante dieléctrica relativa  $\epsilon_r = 12.5$ , la masa efectiva de los electrones  $m_e^* = 0.063m_0$ , la masa efectiva de los huecos pesados  $m_{hh} = 0.52m_0$  y la masa efectiva de los huecos ligeros  $m_{lh} = 0.087m_0$ ; donde  $m_0$  representa la masa del electrón libre. Finalmente otro parámetro importante es el ancho de la banda prohibida ( $E_g$ ) con un valor de 1.424 eV [68, 69]. Cabe destacar que respecto a la temperatura la energía del GAP se comporta como  $E_g = 1.519 - [5.405 \times 10^{-4} \cdot T^2 / (T + 204)]$  (eV) [70].

### 1.3. Sistemas dopados

Los pozos cuánticos se construyen al impurificar un material semiconductor, de forma tal que, estas impurezas en la estructura del material modulan un potencial debido a un campo electrostático, además de que introducen portadores de carga en el sistema. Las impurezas pueden ser del tipo donadoras o aceptoras. Las impurezas donadoras tienen un electrón extra (respecto a la estructura cristalina) en la capa de valencia, a estas se les conoce como tipo *n*; un ejemplo de éstas son el Fósforo (P) en una estructura de Silicio (Si). La **figura 1.4 a)** [71] muestra una representación del dopaje tipo *n* en una estructura de Si. Por otro lado, las impurezas son aceptoras siempre que tengan un déficit de un electrón en la última capa de valencia respecto al material base; un ejemplo de éste sería el Boro (B) en el Si, tal y como se muestra en la **figura 1.4 b)** [71]. A este tipo de dopaje se le conoce como dopaje tipo *p*.

En relación a éstos defectos puntuales (impurezas) en la red cristalina, podemos encontrar una clasificación diferente a la previamente mencionada (impurezas tipo *n* y

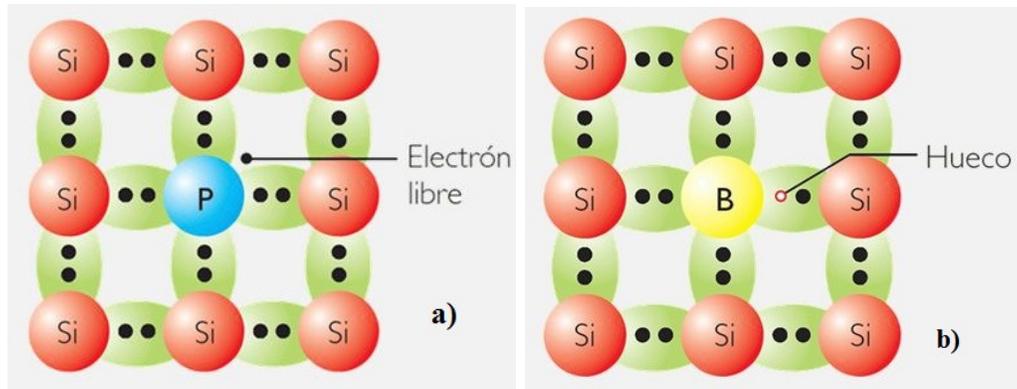


Figura 1.4: Muestra los diferentes tipos de dopaje en una estructura a base de Silicio (Si). En la imagen superior a) se muestra el dopaje tipo  $n$  en el que un P sustituye un Si, generando un electrón extra. En b) tenemos un B que sustituye a un Si produciendo una vacancia (hueco) teniendo dopaje tipo  $p$ .

$p$ ) que se basa en la importancia relativa del potencial introducido por la impureza [72, 73] (que lo denotaremos por  $U_{imp}$ ) respecto al potencial cristalino (que lo denotaremos por  $V_{cris}$ ). Al introducir un átomo dopante en el material, el potencial  $U_{imp}$  es casi esféricamente simétrico alrededor del punto fijo del sitio de la impureza. En primer lugar, si para  $U_{imp}$  tenemos que  $V_{cris}$  actúa como una pequeña perturbación sobre algunos estados cuyos funciones de onda electrónicas no se extienden apreciablemente sobre la red y están localizados donde es grande  $U_{imp}$ ; los estados que satisfacen ésta condición de contorno son llamados estados fuertemente unidos por impurezas profundas (deep impurities). Por otro lado, la situación opuesta puede ocurrir cuando el potencial de la red  $V_{cris}$  es dominante; en este caso  $U_{imp}$  puede ser considerado como una perturbación. Estos son llamados estados de impurezas poco profundas, impurezas rasas o superficiales (shallow impurities). Finalmente, también existen algunos casos con la situación más general donde el potencial introducido y el potencial cristalino tienen una importancia comparable.

Ahora bien, en el material base, los enlaces de aceptores o donores deben diferir muy poco de los enlaces de dicho material, de tal forma que los electrones de valencia de las impurezas tomen parte en los enlaces que tenían los electrones sustituidos. De tal forma que, se tiene un electrón (hueco) de más ligado a la impureza para un donante (aceptor). Éste es el caso de nuestro sistema con impurezas rasas o superficiales

(shallow). De esta manera se puede usar la descripción del átomo de Hidrógeno para representar la física del problema, pero se debe tener en cuenta que el portador de carga está dentro de un material, por lo que se deberá considerar su masa efectiva, además de considerar la constante dieléctrica del material  $\epsilon_r$ . Así, el radio de Bohr efectivo  $a_0^*$  y la energía de ionización  $E_{In}$  estará dada como

$$a_0^* = \epsilon_r \left( \frac{m_0}{m^*} \right) a_0, \quad (1.1)$$

$$E_{In} = \frac{m^*}{m_0} \frac{1}{\epsilon_r^2} \frac{E_{1H}}{n^2}, \quad (1.2)$$

donde  $a_0=0.53 \text{ \AA}$  es el radio de Bohr y  $E_{1H} = -13.6 \text{ eV}$  es el Rydberg. Los niveles de los donores ( $E_d$ ) y los aceptores ( $E_a$ ) están justo por debajo y encima de la banda de conducción y valencia respectivamente.

Finalmente cabe destacar que la constante dieléctrica relativa ( $\epsilon_r$ ) en los semiconductores tiene valores típicos entre 10 y 80, y su energía de ionización es de algunos meV.

### 1.3.1. El $\delta$ -dopado

En los pozos  $\delta$ -dopados, hipotéticamente solo se dopa una lámina 2D de ancho atómico en la estructura 3D. Por esta razón se puede considerar que el ancho del dopaje es cero, respecto al tamaño del sistema completo, de forma tal que la distribución espacial de las impurezas tiene la forma de una  $\delta$  de Dirac, de aquí el nombre que reciben estas estructuras [74]. Estos sistemas dopados fueron introducidos por Wood et al. en 1980 [41], y a la fecha son ampliamente estudiados principalmente por sus propiedades electrónicas y ópticas. Dentro de sus primeras aplicaciones destaca el transistor de efecto de campo con dopaje delta ( $\delta$ -FET) el cual fue desarrollado por Schubert, Fischer y Ploog [75].

Una imagen clara de este dopaje, se muestra en la **figura 1.5** del trabajo de Ploog [42]. En la **figura 1.5 a)** observamos un esquema de una estructura de GaAs en la que en una sola capa (perpendicular al plano de la figura) se ha sustituido algunos

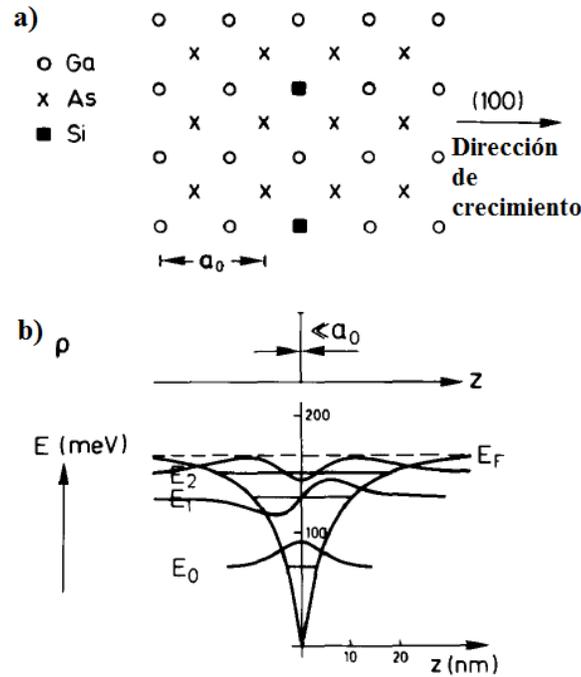


Figura 1.5: Muestra a) un esquema del dopaje tipo delta de Si en una estructura de GaAs. En b) se presenta el perfil de potencial producido por la capa de impurezas ionizadas, los niveles de energía y sus correspondientes funciones de onda.

átomos de As por átomos de Si, generando así el dopaje tipo delta. En la **figura 1.5 b)** observamos el típico perfil de potencial, niveles de energía y funciones de onda de la estructura.

## 1.4. Aproximación de masa efectiva por el método

### $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

El método  $\vec{k} \cdot \vec{p}$  es utilizado para describir las bandas energéticas y las funciones de onda de sistemas semiconductores cristalinos en torno a los puntos de alta simetría en la zona de Brillouin usando la teoría de perturbaciones [76]. Para un electrón en un cristal, la ecuación de Schrödinger tiene la forma

$$H\Psi = \left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) \Psi = E\Psi, \quad (1.3)$$

donde  $m_0$  representa la masa del electrón libre y  $\mathbf{p}$  es el operador de momento. Es importante mencionar que este Hamiltoniano es invariante ante translaciones en la red, de tal forma que el vector de onda cristalino  $\mathbf{k}$  es un buen número cuántico para describirlo. De esta manera, las funciones propias del Hamiltoniano pueden escogerse de manera que sean simultáneamente autofunciones de operador de traslación en la red  $T_{\vec{d}}$

$$T_{\vec{d}}\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(\vec{r} + \vec{d}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}}\Psi(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

de forma tal que pueden escogerse como funciones de Bloch:

$$\Psi_{n\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.5)$$

en la ecuación (1.5)  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  es una función con la periodicidad del cristal, además  $n$  numera los autoestados electrónicos y  $\mathbf{k}$  es el vector de onda del estado para un electrón/hueco. Si sustituimos (1.5) en (1.3) obtenemos

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}\cdot\mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

para un vector de onda  $\mathbf{k}$  dado, el conjunto de todas las funciones  $u_{n\mathbf{k}}$  es completo para funciones con periodicidad del cristal. Eligiendo  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ , la función de onda para cualquier vector de onda del cristal  $\mathbf{k}$  puede expresarse en términos de  $u_{n\mathbf{k}_0}$ ,

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} c_{n'n}(\vec{k} - \vec{k}_0)u_{n\vec{k}_0}(\mathbf{r}). \quad (1.7)$$

Definimos ahora

$$H_{\mathbf{k}_0} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0}\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}), \quad (1.8)$$

de tal forma que podemos reescribir la ecuación (1.6) como

$$\left[ H_{\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar}{m_0}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)\cdot\mathbf{p} + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (1.9)$$

que multiplicada por  $u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r})$ , e integrada sobre la celda unitaria, en la que las funciones  $u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})$  están normalizadas, se obtiene

$$\sum_{n'} \left\{ \left[ E_{n'}(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2(k - k_0)}{2m_0} \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m_0} \right\} c_{nn'} = E_n(\mathbf{k}) c_{nn'}, \quad (1.10)$$

donde

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int_{cu} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{p} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.11)$$

donde  $cu$  indica que se integra sobre la celda unitaria. La expresión (1.10) es válida para todo el vector de onda del cristal  $\mathbf{k}$ , aunque es útil cuando  $\mathbf{k} \approx \mathbf{k}_0$ , de modo que los términos no diagonales  $\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}/m_0$  son pequeños, y pueden ser tratados como una perturbación de  $H_{\mathbf{k}_0}$ . En el caso de una sola banda (valencia o conducción), usando la teoría de perturbaciones de segundo orden, la ecuación (1.10) adopta la forma

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}}{m_0} + \frac{\hbar^2(k^2 - k_0^2)}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n'} \frac{|\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \cdot \mathbf{p}_{nn'}|^2}{E_n(\mathbf{k}) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)}, \quad (1.12)$$

que es válida en un entorno a  $\mathbf{k}_0$ . Normalmente  $\mathbf{k}_0$  es un extremo, por lo que el término lineal en  $k - k_0$  es cero. Usando los ejes principales, tenemos

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}_0) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{(k_i - k_{0i})^2}{m_i}. \quad (1.13)$$

$$\frac{1}{m_i} = \frac{1}{m_0} + \frac{2}{m_0^2} \sum_{n'} \frac{|\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{p}_{nn'}|^2}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)}. \quad (1.14)$$

En un sistema isotrópico las tres masas efectivas son iguales, es decir  $m_1 = m_2 = m_3 = m^*$ , de forma tal que podemos describir la ecuación (1.13) de la forma

$$E_n(k) = E_n(k_0) + \frac{\hbar^2(k - k_0)^2}{2m^*}. \quad (1.15)$$

La última ecuación representa la energía de una partícula libre con una masa efectiva  $m^*$ . El efecto del potencial cristalino y del resto de las bandas queda enmarcado

por las masas efectivas. La presente teoría es de suma importancia en la física de semiconductores debido a que permite atribuir todos los efectos del cristal en una masa efectiva, que por lo regular es un tensor, y que en un sistema isotrópico es simplemente un escalar.

## 1.5. Teoría de Thomas-Fermi

El objetivo de la teoría de Thomas-Fermi (TF), también conocida como teoría del gas no homogéneo de electrones, es describir las propiedades del estado base en términos de la densidad electrónica [6]. Dicha densidad es el número de electrones por unidad de volumen en  $\vec{r}$  y se denota como  $n(\vec{r})$ . Es importante mencionar que la cantidad  $n(\vec{r})$  es una observable física. El origen de la teoría del gas no homogéneo de electrones está fundamentada en la teoría estadística de Thomas-Fermi [77, 78]. En esta teoría uno parte de las relaciones del gas de electrones homogéneo y aplica esta localidad en la densidad de carga no homogénea. Es importante mencionar que la teoría de TF tiene validez en el límite estadístico de muchas partículas. Un método por el cual la densidad  $n(\vec{r})$  puede ser obtenida directamente desde  $V(\vec{r})$ , sin pasar por las funciones de onda, es muy atractivo, y éste es el logro de la teoría de TF.

Comenzamos asumiendo que en la nube de electrones no homogénea se puede obtener el número de electrones por unidad de volumen  $n(\vec{r})$  en el estado fundamental como

$$n(\vec{r}) = \frac{8\pi}{3h^3} p_f^3(\vec{r}), \quad (1.16)$$

donde  $p_f = p_{Fermi}$ , evidentemente el momento máximo  $p_f(\vec{r})$  se ha especificado para cada vector de posición  $\vec{r}$ . El segundo paso importante es escribir la ecuación de energía clásica para el electrón de mayor energía como

$$\mu = \frac{p_f^2(\vec{r})}{2m} + V(\vec{r}). \quad (1.17)$$

Es posible eliminar  $p_f(\vec{r})$  de la ecuación (1.17) en relación de  $n(\vec{r})$ , obteniéndose

así

$$\mu = \frac{1}{2m} \left( \frac{3h^3}{8\pi} \right)^{2/3} [n(\vec{r})]^{2/3} + V(\vec{r}). \quad (1.18)$$

La expresión anterior es la relación básica entre la densidad electrónica  $n(\vec{r})$  y la energía potencial  $V(\vec{r})$  de la teoría de Thomas-Fermi. Esto es un pilar importante de la teoría, ya que la ecuación (1.18) también se puede obtener como la ecuación de Euler del principio de mínima energía.

Por otro lado, representaremos a la probabilidad de un electrón en la posición  $\vec{r}$  en la que la nube de carga teniendo un momento de magnitud entre  $p$  y  $p + dp$  como  $I_r(p)dp$ . Para el espacio fase tenemos

$$I_r(p)dp = \frac{4\pi p^2}{\frac{4}{3}\pi p_f^3(\vec{r})} dp, \quad \text{donde } p < p_f(\vec{r}). \quad (1.19)$$

Por lo tanto, ya que hay  $n(\vec{r})$  electrones por unidad de volumen en  $\vec{r}$ , podemos escribir que la energía cinética  $t$  por unidad de volumen como:

$$t = \int_0^{p_f} n(\vec{r}) \frac{p^2}{2m} \frac{3p^2}{p_f^3} dp. \quad (1.20)$$

Usando la ecuación (1.16) para la densidad de electrones  $n(\vec{r})$  encontramos al sustituir en (1.20)

$$t = c_k [n(\vec{r})]^{5/3}; \quad \text{donde } c_k = \frac{3h^2}{10m} \left( \frac{3}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (1.21)$$

Así, mediante la integración sobre toda la nube de carga, tenemos la energía cinética  $T$  del gas de electrones no homogéneo

$$T = c_k \int [n(\vec{r})]^{5/3} \vec{r}. \quad (1.22)$$

Por otro lado, en relación a la energía potencial, ésta se puede escribir primeramente como la interacción de la densidad electrónica  $n(\vec{r})$  con la energía potencial

de marco de referencia nuclear, denotado por  $V_N(\vec{r})$ , dando una energía potencial

$$U_{en} = \int n(\vec{r})V_N(\vec{r})d\vec{r}, \quad (1.23)$$

y en segundo lugar por las interacciones electrón-electrón trabajando solo con la interacción clásica coulombiana de la nube electrónica

$$U_{ee} = \frac{1}{2}e^2 \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'. \quad (1.24)$$

De tal manera que la energía electrónica total  $E_{el}$  es la suma de (1.22), (1.23) y (1.24)

$$E_{el} = c_k \int [n(\vec{r})]^{5/3} d\vec{r} + \int n(\vec{r})V_N(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2}e^2 \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \quad (1.25)$$

Esta última expresión depende solamente de la densidad de electrones y del potencial nuclear  $V_N$ . Ahora podemos minimizar esta relación respecto a la densidad de electrones  $n(\vec{r})$ , sujeta solo a la condición de normalización, escrita como

$$\int n(\vec{r})d\vec{r} = N, \quad (1.26)$$

donde  $N$  representa el número total de electrones en el sistema considerado. El método estándar tomando la condición descrita en (1.26) es realizando el principio variacional descrito por

$$\delta(E - \mu N) = 0, \quad (1.27)$$

donde  $\mu$  es el multiplicador de Lagrange. Por lo que tenemos

$$\mu = \frac{5}{3}c_k [n(\vec{r})]^{2/3} + V_N(\vec{r}) + V_e(\vec{r}), \quad (1.28)$$

en la ecuación anterior se ha escrito  $V_e(\vec{r})$  como la energía potencial creada por la nube de electrones  $n(\vec{r})$ . Sustituyendo  $c_k$  de la ecuación (1.21) en la expresión (1.27)

es inmediatamente equivalente a la ecuación (1.18) donde  $V(\vec{r})$  es  $V_N(\vec{r}) + V_e(\vec{r})$ .

El parámetro  $\mu$  ahora es fácilmente reconocido como el potencial químico ya que

$$\mu = \frac{\partial E}{\partial N}. \quad (1.29)$$

Si resolvemos la ecuación (1.18) para  $n(\vec{r})$  encontraremos inmediatamente que la densidad electrónica está dada como

$$n(\vec{r}) = \frac{8\pi}{3h^3} (2m)^{3/2} [\mu - V(\vec{r})]^{3/2}, \quad (1.30)$$

la ecuación (1.30) se cumple para  $\mu \geq V(\vec{r})$ , y será igual a cero en cualquier otro caso. Un camino equivalente a la formulación anterior denota una relación entre  $n$  y  $V$  en la ecuación de Poisson

$$\nabla^2(\mu - V) = \frac{32\pi^2 e^2}{3h^3} (2m)^{3/2} (\mu - V)^{3/2}. \quad (1.31)$$

Una de las características elegantes de la teoría estadística aplicada en átomos e iones es que es posible realizar una solución a escala. En este tenor se introduce la función dimensional  $\phi(z)$ , de esta manera

$$\mu - V(\vec{r}) = \frac{Ze^2}{r} \phi(x), \quad (1.32)$$

donde  $x$  es dimensional y está definida como

$$r = bx, \quad b = \frac{1}{4} \left[ \frac{9\pi^2}{2Z} \right]^{1/3} a_0 = 0.88534 Z^{-1/3} a_0. \quad (1.33)$$

Donde  $Z$  representa el número atómico y  $a_0$  es el radio de Bohr  $\hbar^2/4\pi^2 m e^2$ . De esta manera la ecuación de Thomas-Fermi adimensional adopta la forma

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} = \frac{\phi^{3/2}}{z^{1/2}}, \quad (1.34)$$

La ecuación diferencial anterior acepta soluciones del tipo  $1/f^4(z)$ .

### 1.5.1. Teoría Thomas-Fermi en pozos $\delta$ -dopados tipo $n$

En esta sección aplicaremos la teoría Thomas-Fermi a un sistema  $\delta$ -dopado con impurezas tipo  $n$ . En este caso partiremos del supuesto que trabajamos en el límite de bajas temperaturas, además de que la nube de gas de electrones libres es localmente homogénea. Así pues la densidad de electrones por unidad de volumen  $n_0$  en el estado base estará dada por

$$n_0 = \frac{1}{3\pi^2} \frac{p_F^3}{\hbar^3}, \quad (1.35)$$

donde  $p_F$  representa el radio de la esfera de Fermi en el espacio de momentos. Suponiendo ahora que el gas de electrones es localmente homogéneo, es decir, que la aproximación del gas ideal es válida en cada punto de la nube electrónica, tenemos que la densidad de electrones por unidad de volumen estará dada por

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \frac{p_F^3(\mathbf{r})}{\hbar^3}. \quad (1.36)$$

Por otro lado, se sabe que la probabilidad  $I_r(p)dp$  de que el momento de un electrón tenga un valor entre  $p$  y  $p + dp$ , es

$$I_r(p)dp = \frac{3p^2 dp}{p_F^3(\mathbf{r})} \theta(p_F - p). \quad (1.37)$$

Además, la energía cinética para un electrón en la nube puede expresarse como

$$t = \int_0^{p_F} n(\mathbf{r}) \frac{p^2}{2m^*} I_r(p) dp. \quad (1.38)$$

Ahora al despejar  $p_F$  de la ecuación (1.36), sustituirlo en (1.37) para integrar (1.38) con la nueva expresión de  $I_r(p)$ , tenemos

$$t = \frac{3}{10m^*} n(\mathbf{r}) [3\pi^2 \hbar^3 n(\mathbf{r})]^{2/3}, \quad (1.39)$$

si integramos sobre toda la nube de carga, se obtiene el funcional de energía cinética,

el cual viene dado por

$$T = \frac{3}{10m^*} \int \frac{3}{10m^*} n(\mathbf{r}) [3\pi^2 \hbar^3 n(\mathbf{r})]^{2/3} d\mathbf{r}. \quad (1.40)$$

La energía potencial asociada con la interacción entre el gas de electrones y el plano de las impurezas ionizadas está descrito por

$$U_{en} = e^2 \int n(\mathbf{r}) V_N(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} N_{2D} \int n(z) |z| dz, \quad (1.41)$$

y el funcional de energía que corresponde a la interacción electrón-electrón es

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \int \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}'. \quad (1.42)$$

Aquí hacemos uso del llamado modelo *hidrogenoideo* para las impurezas, donde los electrones se suponen están en un medio homogéneo de constante dieléctrica relativa  $\epsilon_r$ . El primer paso en la deducción de este funcional para la energía de interacción, consiste en separar la integral en dos partes

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \int \int n(z)n(z') dz dz' \int \int \frac{ds ds'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (1.43)$$

escribiendo ahora explícitamente las integrales de área y definiendo  $X' = x - x'$  y  $Y' = y - y'$  tenemos

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \int \int n(z)n(z') dz dz' \int \int dx dy \int \int \frac{dx' dy'}{\sqrt{(X')^2 + (Y')^2 + (z - z')^2}}. \quad (1.44)$$

Reescribiendo la ecuación anterior en coordenadas polares y tomando el límite de radio infinito, la expresión para el funcional de energía estará dado como

$$U_{ee} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \int \int n(z)n(z') dz dz' \left( \sqrt{(R)^2 + |z - z'|^2} - |z - z'| \right). \quad (1.45)$$

En el límite, cuando  $R \rightarrow \infty$ , la primera integral diverge. Éste término corresponde a la energía asociada con auto-interacción de un solo electrón, por lo tanto se desprecia,

de forma tal que la ecuación (1.45) adopta la forma

$$U_{ee} = -\frac{\pi e^2}{\epsilon_r} \int \int n(z)n(z') |z - z'|^2 dz dz'. \quad (1.46)$$

De esta manera, el funcional de energía de Thomas-Fermi está dado por:

$$E_{TF} = \frac{3}{10m^*} \int n(z) [3\pi^2 \hbar^3 n(z)]^{2/3} dz + \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} N_{2D} \int n(z) |z| dz - \frac{\pi e^2}{\epsilon_r} \int \int n(z)n(z') |z - z'| dz dz'. \quad (1.47)$$

Como ya sabemos, la derivada funcional de  $E_{TF}$  con respecto de la densidad da como resultado el potencial químico del sistema, de forma tal que:

$$\mu = \frac{1}{2m^*} [3\pi^2 \hbar^3 n(z)]^{2/3} + \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} N_{2D} |z| - \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} \int n(z) |z - z'| dz. \quad (1.48)$$

Por otro lado, el curvamiento espacial de las bandas está descrito mediante la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2 V(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_r} n(z) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_r} N_{2D} \delta(z), \quad (1.49)$$

cuya solución es

$$V(z) = \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} N_{2D} |z| - \frac{2\pi e^2}{\epsilon_r} \int n(z) |z - z'| dz. \quad (1.50)$$

Si comparamos (1.50) con (1.48) podemos afirmar que

$$\mu = \frac{1}{2m^*} [3\pi^2 \hbar^3 n(z)]^{2/3} + V(z), \quad (1.51)$$

y despejando la densidad de portadores de la última expresión, obtenemos

$$n(z) = \frac{(2m^*)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} [\mu - V(z)]^{3/2}. \quad (1.52)$$

Por simplicidad, de este punto en adelante, usaremos las unidades efectivas para

describir las expresiones con las que trabajaremos. Para tal caso, definiremos primeramente el radio de Bohr efectivo como:

$$a_0^* = \frac{\epsilon_r \hbar^2}{m^* e^2}, \quad (1.53)$$

donde ya hemos definido previamente a  $\epsilon_r$  como la constante dieléctrica relativa del material en cuestión,  $\hbar$  la constante de Planck reducida,  $m^*$  es la masa efectiva de los portadores y  $e$  representa la carga eléctrica. De manera similar definimos el Rydberg efectivo como

$$Ry^* = \frac{e^2}{2\epsilon_r a_0^*}. \quad (1.54)$$

De esta manera reescribimos la relación entre la densidad electrónica y el perfil de potencial, descrita en (1.52) en unidades efectivas usando (1.53) y (1.54), como

$$n^*(z) = \frac{1}{3\pi^2} [\mu^* - V_H^*(z)]^{3/2}. \quad (1.55)$$

De forma análoga, reescribimos la ecuación de Poisson, escrita en (1.49), en unidades efectivas

$$\frac{d^2 V_H^*(z)}{dz^2} = -8\pi n^*(z) + 8\pi N_{2D}^* \delta(z). \quad (1.56)$$

Sustituyendo  $n^*(z)$  en la expresión (1.56) obtenemos

$$\frac{d^2 V_H^*(z)}{dz^2} = -\frac{8}{3\pi^2} [\mu^* - V_H^*(z)]^{3/2} + 8\pi N_{2D}^* \delta(z). \quad (1.57)$$

En este tipo de ecuaciones se buscan soluciones del tipo  $1/f^4(z)$ , donde  $f(z)$  debe ser una función lineal de  $z$ , debido a la presencia de la función delta de Dirac se propone en este caso

$$V_H^*(z) - \mu^* = -\frac{\alpha^2}{(\alpha |z| + z_0)^4}, \quad (1.58)$$

y sustituyendo en la ecuación (1.57) obtenemos que

$$\alpha = 2/15\pi, \quad (1.59)$$

además, al exigir que el sistema sea neutral, encontramos

$$z_0 = \left( \frac{\alpha^3}{\pi N_{2D}^*} \right)^{1/5}. \quad (1.60)$$

La expresión (1.60) representa una escala fundamental de longitud para el problema. Ésta expresa, por ejemplo, que el sistema disminuye su tamaño al incrementar el valor de la densidad bidimensional de impurezas  $N_{2D}^*$  y lo hace como  $(N_{2D}^*)^{-1/5}$ . Este modelo, como lo propone Ioratti [30], es exacto en el límite de altas densidades, que es justamente, el modelo que empleamos.

### 1.5.2. Teoría de Thomas-Fermi en pozos $\delta$ -dopados tipo $p$

La teoría de TF es aplicada en pozos  $\delta$ -dopados tipo  $p$  en GaAs para describir el desdoblamiento de la banda de valencia de forma analítica. Partiremos desde la suposición de bajas temperaturas y que localmente el gas de portadores es homogéneo, de forma tal que el número de portadores por unidad de volumen es

$$p(\mathbf{r}) = \frac{1}{3\pi^2} \frac{p_F^3(\mathbf{r})}{\hbar^3}. \quad (1.61)$$

Siguiendo con la aproximación TF, y teniendo en cuenta que se consideran independientes las bandas de huecos pesados ( $hh$ ) y de huecos ligeros ( $lh$ ), la energía cinética de huecos por unidad de volumen puede ser descrita como en el trabajo de Gaggero et al. [79], para el caso de dos bandas, de la siguiente forma

$$t = \frac{1}{2m_{hh}m_a} \int_0^{p_F} p_m^2 I_r(\mathbf{p}_m) d\mathbf{p}_m = \frac{3}{2m_{hh}m_a p_F} \int_0^{p_F} p_m^4 d\mathbf{p}_m, \quad (1.62)$$

donde  $m_a = [1 + (m_{lh}/m_{hh})^{3/2}]^{2/3}$  en el caso de considerar solo dos bandas, además  $m_{hh}$  ( $m_{lh}$ ) representa la masa de los huecos pesados (ligeros). Sustituyendo el valor de  $p_F$  de la ecuación (1.61) en (1.62) e integrando sobre el intervalo, obtenemos

$$t = \frac{3 [3\pi^2 \hbar^3 p(r)]^{2/3}}{10m_{hh}m_a}, \quad (1.63)$$

De esta manera, el funcional de energía cinética es

$$T = \int p(r) t d\mathbf{r} = \frac{3}{2m_{hh}m_a} \int p(z) [3\pi^2\hbar^3 p(z)]^{2/3} dz. \quad (1.64)$$

El funcional de la energía de interacción hueco-hueco es:

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \int \int \frac{p(\mathbf{r})p(\mathbf{r}') d\mathbf{r}d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (1.65)$$

Ahora consideramos el denominado modelo *hidrogenoideo*, de esta manera los huecos están en un medio homogéneo de constante dieléctrica relativa  $\epsilon_r$

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \int \int p(z)p(z') dz dz' \int \int \frac{d\mathbf{S}d\mathbf{S}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (1.66)$$

donde  $d\mathbf{S}$  y  $d\mathbf{S}'$  representan los diferenciales de área de las coordenadas  $\mathbf{r}$  y  $\mathbf{r}'$  respectivamente. Tomando las integrales de área y definiendo a  $X' = (x - x')$  y  $Y' = (y - y')$  tenemos

$$V_{hh} = \frac{e^2}{2\epsilon_r} \int \int p(z)p(z') dz dz' \int \int dx dy \int \int \frac{dx' dy'}{\sqrt{X'^2 + Y'^2 + (z - z')^2}}, \quad (1.67)$$

ahora si llevamos la expresión anterior coordenadas polares  $X' = R' \cos \theta$  y  $Y' = R' \sin \theta$ , hacemos el cambio de variable  $u = R'^2 + (z - z')^2$  e integrando sobre  $u$ ,  $\theta$ ,  $x$  y  $y$  llegamos a la expresión

$$V_{hh} = \frac{e^2\pi}{\epsilon_r} \int \int p(z)p(z') \left( \sqrt{R'^2 + |z - z'|} - |z - z'| \right) dz dz'. \quad (1.68)$$

En el límite de  $R' \rightarrow \infty$ , la primera integral de (1.68) diverge, por lo que podemos ignorar dicho término que corresponde a la energía de auto-interacción. De esta manera tenemos

$$V_{hh} = -\frac{e^2\pi}{\epsilon_r} \int \int p(z)p(z') |z - z'| dz dz'. \quad (1.69)$$

La expresión (1.69) es muy importante, ya que como omitimos la energía de auto-interacción, esperamos que los resultados sean más próximos a los resultados experi-

mentales.

Por otro lado, la interacción entre el gas de huecos y el plano de impurezas ionizadas está descrita por el siguiente funcional de densidad

$$V_{hn} = \int p(r)V_N(r)dr = \frac{2e^2\pi}{\epsilon_r}\rho_{2D} \int p(z)|z|dz, \quad (1.70)$$

donde  $\rho_{2D}$  representa la densidad del plano de impurezas ionizadas tipo  $p$ .

Sumando cada una de las contribuciones, el funcional  $E_{TF}$ , estará dado por

$$E_{TF} = \frac{3}{10m_{hh}m_a} \int p(z) [3\pi^2\hbar^3 p(z)]^{2/3} dz - \frac{e^2\pi}{\epsilon_r} \int \int p(z)p(z')|z-z'|dzdz' + \frac{e^2\pi}{\epsilon_r}\rho_{2D} \int p(z)|z|dz. \quad (1.71)$$

Aplicando el principio variacional  $\delta(E_{TF} - \mu N) = 0$  se puede determinar el multiplicador de Lagrange  $\mu$  identificado como el potencial químico

$$\mu = \frac{1}{2m_{hh}m_a} [3\pi^2\hbar^3 p(z)]^{2/3} - \frac{e^2\pi}{\epsilon_r} \int p(z')|z-z'|dz' + \frac{e^2\pi}{\epsilon_r}\rho_{2D}|z|. \quad (1.72)$$

Considerando las unidades efectivas  $Ry^* = e^2/(2\epsilon_r a_0^*)$  y  $a_0^* = \epsilon_r \hbar^2 / (e^2 m_{hh})$  y definiendo  $p_{au}(z) = a_0^{*3} p(z)$  es posible reescribir  $\mu$  de la ecuación (1.72) como

$$\mu = \frac{1}{m_a} [3\pi^2 p_{au}(z)]^{2/3} - \frac{2e^2\pi}{\epsilon_r} \int p(z')|z-z'|dz' + \frac{2e^2\pi}{\epsilon_r}\rho_{2D}|z|. \quad (1.73)$$

Por otro lado, el doblamiento espacial de la banda de valencia está descrito por la ecuación de Poisson

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon_r} p(z) + \frac{4\pi e^2}{\epsilon_r} \rho_{2D} \delta(z), \quad (1.74)$$

$$\text{donde } V_H(z) = -2\frac{\pi e^2}{\epsilon_r} \int p(z')|z-z'|dz' + \frac{2e^2\pi}{\epsilon_r}\rho_{2D}|z|. \quad (1.75)$$

En las ecuaciones anteriores  $V_H(z)$  es el potencial de Hartree. Tomando en cuenta

las ecuaciones (1.73) y (1.75), el potencial químico es

$$\mu = \left[ \frac{3\pi^2 p_{au}(z)}{m_a^{3/2}} \right]^{2/3} Ry^* + V_H(z). \quad (1.76)$$

Análogamente al caso tipo  $n$ , podemos escribir la ecuación de Poisson asociada al sistema de la forma

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz_{au}^2} = -\frac{8m_a^{3/2}}{3\pi} [\mu - V_H(z)]^{3/2} + 8\pi\rho_{2D}\delta(z). \quad (1.77)$$

La solución físicamente aceptable de este tipo de ecuación es de la forma  $1/f^4(z)$  [30], y como en el caso tipo  $n$ , la función  $f(z)$  es lineal en  $z$ . Así, la solución para el pozo  $\delta$  tipo  $p$  será

$$V_H^*(z) - \mu = -\frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0)^4}, \quad (1.78)$$

donde los parámetros  $\alpha$  y  $z_0$  tienen los valores

$$\alpha = \frac{2m_a^{3/2}}{15\pi}, \quad z_0 = \left( \frac{\alpha^3}{\pi\rho_{2D}} \right)^{1/5}. \quad (1.79)$$

Las ecuaciones (1.78) y (1.79) resumen el modelo del perfil de potencial en el marco de la teoría TF para pozos delta tipo  $p$ .

# Capítulo 2

## Técnicas de cálculo

### 2.1. Matriz de transferencia

Una de las técnicas más empleadas para la solución de problemas unidimensionales es el de la Matriz de Transferencia (MT) [80, 81]. Gran parte de los trabajos que utilizan esta técnica, analizan un potencial constante en intervalos. Con la técnica de MT, se evalúa la función de onda, su derivada y se transfiere los coeficientes de la función de onda de un intervalo a otro.

Partiendo de que la ecuación de Schrödinger

$$\psi''(z) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(z))\psi(z) = 0, \quad (2.1)$$

se puede llevar a la forma

$$\frac{dF(z)}{dz} = P(z)F(z), \quad (2.2)$$

donde

$$P(z) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(z)) & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.3)$$

$$F(z) = \begin{bmatrix} \psi(z) \\ \psi'(z) \end{bmatrix}. \quad (2.4)$$

Entonces

$$\frac{d}{dz} \begin{bmatrix} \psi(z) \\ \psi'(z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{2m}{\hbar^2}(E - V(z)) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi(z) \\ \psi'(z) \end{bmatrix}. \quad (2.5)$$

Definiendo la matriz de transferencia  $M(z_0, z)$  como la matriz de  $2 \times 2$  que transfiera alguna solución  $F(z)$  desde  $z_0$  hasta  $z$ ,

$$F(z) = M(z, z_0) F(z_0), \quad (2.6)$$

donde  $M(z, z_0)$  tiene las siguientes propiedades:

1.  $M(z, z_0)$  es real.
2.  $M(z_0, z_0) = I$ .
3.  $M(z, z_0) M(z_0, z) = I$ .
4. Si  $z_1$  es un punto del intervalo  $(z_0, z)$ , para el cual la función de onda y su derivada son continuas, entonces  $M(z, z_0) = M(z, z_1) M(z_1, z_0)$ .
5. Si  $g_1(z)$  y  $g_2(z)$  son dos soluciones linealmente independientes de la ecuación (2.2), entonces

$$M(z, z_0) = \frac{1}{\Delta} \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}, \quad (2.7)$$

donde

$$M_{11} = g_2'(z_0)g_1(z) - g_1'(z_0)g_2(z),$$

$$M_{12} = g_1(z_0)g_2(z) - g_2(z_0)g_1(z),$$

$$M_{21} = g_2'(z_0)g_1'(z) - g_1'(z_0)g_2'(z),$$

$$M_{22} = g_1(z_0)g_2'(z) - g_2(z_0)g_1'(z),$$

$$\Delta = g_1(z_0)g_2'(z_0) - g_1'(z_0)g_2(z_0).$$

En particular, en intervalos con potencial constante la matriz de transferencia presenta la forma

$$M(z, z_0) = \begin{bmatrix} \cos [P(z - z_0)] & \frac{1}{P} \sin [P(z - z_0)] \\ -P \sin [P(z - z_0)] & \cos [P(z - z_0)] \end{bmatrix}, \quad (2.8)$$

donde  $P = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - V)}$ . Supongamos ahora que se quieren transferir las soluciones desde  $a_1$  hasta  $a_2$ , con dos valores constantes para el potencial en los extremos del intervalo nombrados  $V_1$  y  $V_2$  respectivamente, y con valores arbitrarios para el potencial dentro del intervalo

$$V(z) = \left\{ \begin{array}{ll} V_1 & z < a_1 \\ \text{arbitrario} & z \in (a_1, a_2) \\ V_2 & z > a_2 \end{array} \right\}, \quad (2.9)$$

para  $z \leq a_1$

$$\psi''(z) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1)\psi(z) = 0, \quad (2.10)$$

$$\psi(z) = e^{\kappa z}, \quad (2.11)$$

$$\kappa^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_1) = 0. \quad (2.12)$$

Entonces tenemos

$$\kappa = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)}. \quad (2.13)$$

Si solo nos interesan los estados acotados, tenemos

$$\psi(z) = Ae^{H_1 z} + Be^{-H_1 z}, \quad (2.14)$$

$$H_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_1 - E)}. \quad (2.15)$$

De manera análoga para la región  $z \geq a_2$  tenemos

$$H_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_2 - E)}. \quad (2.16)$$

Si  $M$  es la MT que lleva las soluciones desde  $a_1$  hasta  $a_2$ , tenemos pues que

$$F(z) = \begin{cases} A \begin{bmatrix} 1 \\ H_1 \end{bmatrix} e^{H_1 z} + B \begin{bmatrix} 1 \\ -H_1 \end{bmatrix} e^{-H_1 z}, & z \leq a_1 \\ M(z, a_1)F(a_1), & a_1 \leq z \leq a_2 \\ C \begin{bmatrix} 1 \\ H_2 \end{bmatrix} e^{H_2 z} + D \begin{bmatrix} 1 \\ -H_1 \end{bmatrix} e^{-H_2 z}, & z \geq a_2 \end{cases} \quad (2.17)$$

Exigiendo que las constantes  $B = C = 0$  y ejerciendo la condición de continuidad en  $z = a_1$  tenemos

$$F(z) = \begin{cases} A \begin{bmatrix} 1 \\ H_1 \end{bmatrix} e^{H_1 z}, & z \leq a_1 \\ Ae^{H_1 a_1} M(z, a_1) \begin{bmatrix} 1 \\ H_1 \end{bmatrix}, & a_1 \leq z \leq a_2 \\ D \begin{bmatrix} 1 \\ -H_1 \end{bmatrix} e^{-H_2 z}, & z \geq a_2 \end{cases} \quad (2.18)$$

Ahora, ejerciendo la condición de continuidad en  $z = a_2$  tenemos

$$Ae^{H_1 a_1} M(a_2, a_1) \begin{bmatrix} 1 \\ H_1 \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} 1 \\ -H_1 \end{bmatrix} e^{-H_2 a_2}, \quad (2.19)$$

$$Ae^{H_1 a_1} \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ H_1 \end{bmatrix} = D \begin{bmatrix} 1 \\ -H_1 \end{bmatrix} e^{-H_2 a_2}. \quad (2.20)$$

De esta manera al realizar los productos matriciales de la ecuación (2.20), obtenemos el sistema de ecuaciones

$$Ae^{H_1 a_1} (M_{11} + H_1 M_{12}) - De^{-H_2 a_2} = 0, \quad (2.21)$$

$$Ae^{H_1 a_1} (M_{21} + H_1 M_{22}) + DH_2 e^{-H_2 a_2} = 0. \quad (2.22)$$

Recordando algunos conceptos del álgebra lineal, para que el sistema de ecuaciones

formado por (2.21) y (2.22) tenga solución única, el determinante de éste debe ser igual a cero. De esta manera tenemos que

$$\begin{vmatrix} e^{H_1 a_1}(M_{11} + H_1 M_{12}) & -e^{-H_2 a_2} \\ e^{H_1 a_1}(M_{21} + H_1 M_{22}) & H_2 e^{-H_2 a_2} \end{vmatrix} = 0, \quad (2.23)$$

que nos conduce a la ecuación

$$H_2 M_{11} + H_1 H_2 M_{12} + M_{21} + H_1 M_{22} = 0, \quad (2.24)$$

conocida como la ecuación trascendente que determina los niveles de energía para el caso previamente planteado.

### 2.1.1. Potencial simétrico

Consideremos el caso en que el potencial es simétrico, en el cual se quiere transferir la solución de la ecuación de onda del punto  $a_1$  hasta  $a_2$ , con potenciales constantes a los costados de igual tamaño denotados por  $V$ . En este caso, la función envolvente previamente definida como  $F(z)$  tendía la forma

$$F(z) = \begin{cases} A \begin{bmatrix} 1 \\ H \end{bmatrix} e^{Hz} + B \begin{bmatrix} 1 \\ -H \end{bmatrix} e^{-Hz}, & z \leq a_1 \\ M(z, a_1)F(a_1), & a_1 \leq z \leq a_2 \\ C \begin{bmatrix} 1 \\ H \end{bmatrix} e^{Hz} + D \begin{bmatrix} 1 \\ -H \end{bmatrix} e^{-Hz}, & z \geq a_2 \end{cases} \quad (2.25)$$

donde  $H = \sqrt{(2m/\hbar^2)(V - E)}$ . Ahora, exigiendo que  $B = C = 0$ , y tomando la condición de continuidad en  $z = a_1$  tenemos

$$F(z) = \begin{cases} A \begin{bmatrix} 1 \\ H \end{bmatrix} e^{Hz}, & z \leq a_1 \\ Ae^{Ha_1} M(z, a_1) \begin{bmatrix} 1 \\ H \end{bmatrix}, & a_1 \leq z \leq a_2 \\ D \begin{bmatrix} 1 \\ -H \end{bmatrix} e^{-Hz}, & z \geq a_2 \end{cases} \quad (2.26)$$

Ahora utilizamos la simetría del potencial para exigir que para los estados pares de  $\psi'(z = 0) = 0$ , y que los estados impares se cumpla que  $\psi(z = 0) = 0$ . De esta manera, podemos llegar a las ecuaciones

$$M_{21}(0, a_1) + HM_{22}(0, a_1) = 0, \quad (2.27)$$

$$M_{11}(0, a_1) + HM_{12}(0, a_1) = 0, \quad (2.28)$$

que son las ecuaciones trascendentes para determinar los niveles de energía para los estados pares e impares respectivamente.

### Cálculo de la constante de normalización en el caso simétrico

Partiendo de la expresión (2.26) tenemos para el caso simétrico la función de onda tiene la forma

$$\psi(z) = \begin{cases} Ae^{Hz}, & z \leq a_1 \\ Ae^{Ha_1} [M_{11}(z) + HM_{12}(z)], & a_1 \leq z \leq a_2 \\ De^{-Hz}, & z \geq a_2 \end{cases}, \quad (2.29)$$

Con lo que podemos calcular la integral de  $\psi(z)$  en la mitad del espacio

$$\int_{-\infty}^0 |\psi(z)|^2 dz = A^2 \int_{-\infty}^{a_1} e^{2Hz} dz + A^2 e^{2Ha_1} \int_{a_1}^0 [M_{11}(z) + HM_{12}(z)]^2 dz, \quad (2.30)$$

o bien

$$\int_{-\infty}^0 |\psi(z)|^2 dz = \frac{A^2 e^{2Ha_1}}{2H} + A^2 e^{2Ha_1} \int_{a_1}^0 [M_{11}(z) + HM_{12}(z)]^2 dz, \quad (2.31)$$

La expresión (2.31) debe ser igual a 1/2 por la condición de normalización, y a partir de esta expresión es posible determinar el valor de la constante  $A$ .

## 2.2. Método de diagonalización

Partimos de la ecuación de Schrödinger (ES)

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi(z) + V\Psi(z) = E\Psi(z). \quad (2.32)$$

Recordemos que las unidades del radio de Bohr efectivo y el Rydberg efectivo están definidas como:

$$a_0^* = \frac{\varepsilon_r \hbar^2}{e^2 m^*}, \quad Ry^* = \frac{e^2}{2\varepsilon_r a_0^*}, \quad (2.33)$$

si hacemos el producto entre las dos unidades de la ecuación (2.33), tenemos:

$$\begin{aligned} Ry^* a_0^* &= \frac{e^2}{2\varepsilon_r a_0^*} \frac{\varepsilon_r \hbar^2}{e^2 m^*}, \\ Ry^* a_0^{*2} &= \frac{\hbar^2}{2m^*}. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Ahora reescribiremos la ES en (2.32) usando (2.34)

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{a_0^{*2}} \frac{d^2}{dz^{*2}} \Psi^*(z) + Ry^* V^* \Psi^*(z) = Ry^* E^* \Psi^*(z), \quad (2.35)$$

donde hemos omitido el factor para  $\Psi^*(z)$  ya que es un factor común en ambos miembros. Al sustituir  $-\hbar^2/2m^*$  de (2.34) en (2.32), y reduciendo algunos términos,

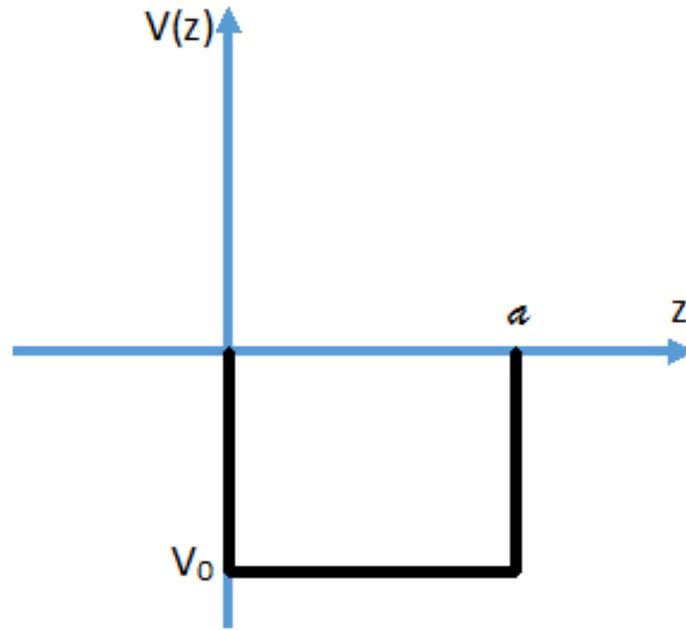


Figura 2.1: Representación esquemática de un pozo cuántico rectangular de ancho  $a$  y fondo  $V_0$ .

obtenemos

$$\begin{aligned}
 -Ry^* a_0^{*2} \frac{1}{a_0^{*2}} \frac{d^2}{dz^{*2}} \Psi^*(z) + Ry^* V^* \Psi^*(z) &= Ry^* E^* \Psi^*(z), \\
 -\frac{d^2}{dz^{*2}} \Psi^*(z) + V^* \Psi^*(z) &= E^* \Psi^*(z).
 \end{aligned} \tag{2.36}$$

Donde (2.36) es la ES escrita en unidades efectivas.

Ahora supongamos que tenemos un pozo de potencial con la forma mostrada en la **figura 2.1**. Usando la ecuación (2.36) determinaremos los autovalores y autofunciones asociadas a un electrón sometido al potencial mostrado en la Figura anterior. Partimos proponiendo como solución a la ES un conjunto de funciones ortonormales, es decir

$$\Psi^*(z) = \sum_n c_n \psi_n, \quad \text{con} \quad \langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{nm}, \tag{2.37}$$

donde  $\delta_{nm}$  es una delta de Kronecker. De esta manera proponemos que

$$\psi_n = A \sin(az). \quad (2.38)$$

Por la forma del potencial rectangular, exigimos que la función cumpla con dos condiciones de contorno  $\psi_n(z=0) = \psi_n(z=L) = 0$ , así pues de la segunda condición, tomando en cuenta que  $A \neq 0$ , obtenemos que

$$\begin{aligned} A \sin(aL) &= 0, \\ aL &= n\pi, \\ a &= \frac{n\pi}{L} \end{aligned}$$

por lo tanto obtenemos  $\psi_n = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right)$ .

Partiendo de la condición del cuadrado integrable  $\int_0^L |\psi_n|^2 dz = 1$ , obtenemos el valor para la constante  $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$ .

De esta manera las autofunciones impares serían

$$\psi_n^* = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}z\right). \quad (2.39)$$

Procediendo análogamente para las funciones pares, podemos escribir la solución completa para las autofunciones como

$$\psi_n^* = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}z - \varphi\right). \quad (2.40)$$

donde

$$\varphi = \begin{cases} 0, & \text{si } n \text{ es impar,} \\ -\frac{\pi}{2}, & \text{si } n \text{ es par.} \end{cases} \quad (2.41)$$

Trabajando con la expresión (2.39) podemos derivar

$$\frac{d^2}{dz^2} \psi_n^* = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \psi_n^* = -k^2 \psi_n^*. \quad (2.42)$$

Ahora, retomando la ecuación (2.36) y sustituyendo la base ortonormalizada

$$\begin{aligned}\Psi^*(z) + V^*\Psi^*(z) &= E^*\Psi^*(z), \\ \sum_n k^2 c_n \psi_n + \sum_n c_n V^*(z) \psi_n &= \sum_n E^* c_n \psi_n.\end{aligned}$$

Escribiendo la ecuación anterior en la notación de Dirac y multiplicando desde la izquierda por el bra  $\langle \psi_m |$  y reduciendo las deltas de Kronecker que aparecen, obtenemos

$$\sum_n k^2 c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle + \sum_n c_n \langle \psi_m | V^*(z) | \psi_n \rangle = E^* \sum_n c_n \langle \psi_m | \psi_n \rangle, \quad (2.43)$$

$$k^2 c_m + \sum_{n=0}^N c_n V_{mn}^* = E^* c_m, \quad (2.44)$$

$$k^2 c_m + \sum_{n=0}^{m-1} c_n V_{mn}^* + c_m V_{mm}^* + \sum_{n=m+1}^N c_n V_{mn}^* = E^* c_m, \quad (2.45)$$

$$\sum_{n=0}^{m-1} c_n V_{mn}^* + (k^2 + V_{mm}^*) c_m + \sum_{n=m+1}^N c_n V_{mn}^* = E^* c_m \quad (2.46)$$

Donde  $V_{mn}^* = \langle \psi_m | V^*(z) | \psi_n \rangle$ . La ecuación (2.46) se puede reescribir de forma matricial como

$$\begin{pmatrix} k_0^2 + V_{00}^* & \cdots & V_{10}^* & \cdots & V_{N0}^* \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ V_{0m} & \cdots & k_m^2 + V_{mm}^* & \cdots & V_{Nm}^* \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{0N} & \cdots & V_{mN} & \cdots & k_N^2 + V_{NN}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = E^* \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_m \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

La ecuación matricial (2.47) puede reescribirse de forma sencilla como  $S\vec{c} = E\vec{c}$ , donde  $S$  es la matriz a diagonalizar para determinar los autovalores  $E$ .

# Capítulo 3

## Sistemas $\delta$ -dopados: modelos previos

### 3.1. Delta dopado simple

Tal y como estudiamos en la **capítulo 1**, en el sistema  $\delta$ -dopado, si la densidad de impurezas ionizadas de donadores representado por ( $N_{2D}$ ) o de aceptores ( $\rho_{2D}$ ) es grande, tal que la orbitas medias de los portadores de carga se solapen, es decir que  $N_{2D}a_0^{*2} > 1$  ( $\rho_{2D}a_0^{*2} > 1$ ), los portadores se moverán en el potencial colectivo creado por las impurezas ionizadas. A raíz de lo anterior, tendremos una nube de portadores cuasi-bidimensional y un plano de impurezas ionizadas. Los portadores estarán localizados al rededor del plano debido a la atracción coulombiana con las impurezas, dando como resultado el típico perfil de potencial de forma-V. Ahora bien, si sustituimos  $N_{2D} = N_{2D}\delta(z - z_0)$  ( $\rho_{2D} = \rho_{2D}\delta(z - z_0)$ ) para los donadores (aceptores) en las siguientes ecuaciones

$$E_i F_i(z) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_H(z) \right] F_i(z), \quad (3.1)$$

$$\frac{d^2 V_H(z)}{dz^2} = -\frac{4e}{\epsilon_r} \sum_i |F_i(z)|^2 n_i + \frac{4\pi e}{\epsilon_r} N_{2D} \delta(z - z_0), \quad (3.2)$$

$$n_i = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right], \quad (3.3)$$

se obtiene el conjunto de ecuaciones necesarias para describir la física del problema de los  $\delta$ -dopados cuando la posición del pozo de impurezas es  $z = z_0$ . Del conjunto

de ecuaciones anteriores  $V_H(z)$ ,  $n_i$  y  $E_i$  representan el potencial de Hartree o electrostático, la densidad de portadores en el  $i$ -ésimo nivel de energía,  $E_i$  la energía de  $i$ -ésimo nivel y por último  $E_F$  es la energía de Fermi.

Una solución al sistema de ecuaciones planteado en (3.1), (3.2), y (3.3) fue presentado por Ioriatti [30] quien determinó autoconsistentemente la solución para un sistema  $\delta$ -dopado simple. La solución al sistema  $\delta$ -dopado tipo  $p$  puede resumirse por la expresiones (1.78) y (1.79), además tomando  $\rho_{2D} = N_{2D}$  y  $m_a = 1$  tenemos la solución para el dopado tipo  $n$ .

## 3.2. Delta dopado doble

El  $\delta$ -dopado doble (DDD) consiste en el dopaje de dos capas bidimensionales en una estructura 3D de forma tal que las capas de impurezas ionizadas estén separadas a una distancia constante que denotaremos con  $d$ .

En estudios previos se ha mostrado que la teoría de Thomas-Fermi es una aproximación excelente para describir la física de los sistemas  $\delta$ -dopados, tal y como fue desarrollado por Gaggero [79] quien compara sus resultados con cálculos autoconsistentes y resultados experimentales. De esa manera existe una gran cantidad de trabajos en cálculo de propiedades ópticas y electrónicas que parten de la teoría TF para determinar la estructura electrónica de un sistema en particular y calcular diversas propiedades [14, 59, 60, 61, 82], en algunos casos, éstos utilizan la superposición de dos pozos delta dopados simples como la solución del problema o la simetría de un pozo simple respecto al origen para representar la solución del DDD.

Por mencionar un caso en particular, Rodríguez-Vargas et al. en [82], nos muestra una expresión matemática para un perfil de potencial en GaAs tipo  $n$ , que es una generalización del trabajo de Ioratti [30], en el cual (para el caso en el que no se toma en cuenta los efectos de intercambio y correlación) el fondo del perfil de potencial se mantiene constante como función de la distancia entre pozos. Resultados similares se encontraron para el caso tipo  $p$ , donde las soluciones mostradas son análogas [61]. La

expresión de tal potencial para el DDD tipo  $n$  es

$$V(z) = \frac{-\alpha^2}{(\alpha |z + (d/2)| + z_0)^4}, \quad \text{con } z \leq 0, \quad (3.4)$$

donde  $d$  representa la distancia entre las capas dopadas,  $\alpha = 2/15\pi$ ,  $z_0 = (\alpha^3/\pi N_{2D})^{1/5}$  y  $N_{2D}$  es la densidad de impurezas en cada uno de los planos dopantes. Cabe aclarar que los planos dopantes se localizan en el plano  $xy$  para  $z = \pm d/2$ . Por la forma en que se ha propuesto la expresión (3.4) en diversos trabajos [60, 61, 82], el perfil de potencial en  $z = 0$ , tiene una derivada diferente de cero. En la **figura 3.1** se muestra el perfil de potencial para un sistema DDD usando la expresión (3.4) del modelo estudiado en [82] sin tomar en cuenta el término de intercambio y correlación con una densidad  $N_{2D} = 4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Es posible observar que el perfil de potencial es simétrico respecto a  $z = 0$ . En esta figura se pueden observar dos perfiles de potencial con  $d = 50, 500 \text{ \AA}$ . Es importante recalcar dos puntos importantes, el primero es que sin importar la distancia de separación entre los planos dopantes, el fondo  $V(z)$  es el mismo, y el segundo es que en ambos casos la derivada de  $V(z)$  presenta una discontinuidad en el origen. En este modelo se considera que el fondo del potencial es constante tal y como ocurre en los pozos cuánticos rectangulares, en los que el fondo del mismo es constante ante la separación de las estructuras dopadas.

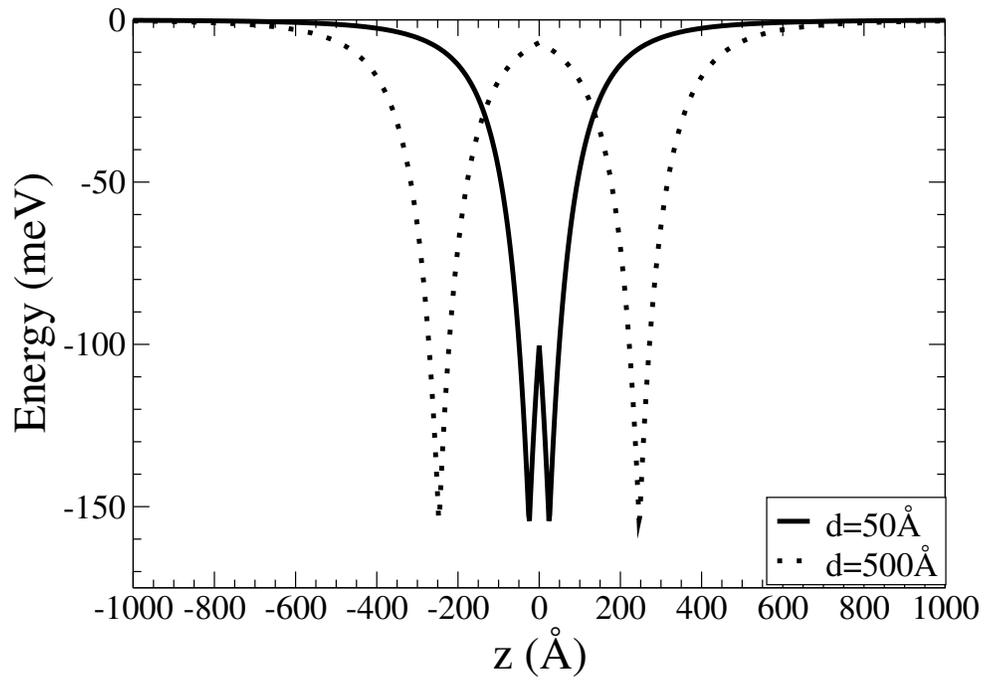


Figura 3.1: Muestra el perfil de potencial para dos diferentes distancias intercapas. En ambos casos el fondo del potencial es el mismo. Se ha usado una densidad bidimensional de impurezas efectiva con un valor  $N_{2D} = 4 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ .

# Capítulo 4

## Nuevos modelos del $\delta$ -dopado

### 4.1. Delta dopado doble

En la expresión (3.4) hemos expuesto la forma del perfil de potencial  $\delta$ -dopado doble, el cuál presenta una discontinuidad en la derivada. Por esta razón el perfil de potencial que propondremos debe cumplir con la continuidad en su campo eléctrico, teniendo discontinuidades únicamente en  $\pm d/2$ , lugares donde se ubican las capas ionizadas. Como hemos mencionado previamente, modelos anteriores no toman en cuenta que la ecuación de Poisson asociada al sistema mostrada en (1.57) y en (1.77) es no lineal [27, 59, 83] y por ende no admite el principio de superposición. En relación a lo anterior añadimos un término a la expresión (3.4) tal que cumpla con condiciones físicas que se explicaran a detalle un poco más adelante. De esta manera escribimos el potencial

$$V(z) = \frac{-\alpha^2}{(\alpha |z + (d/2)| + z_0)^4} - \frac{\beta^2}{(\beta |z| + z_1)^4}, \quad (4.1)$$

donde los parámetros  $\beta$  y  $z_1$  quedan sujetos a las condiciones que impondremos.

En nuestro trabajo usamos los valores de  $\alpha$  y  $z_0$  tal como se muestra en (1.79) para el sistema tipo  $p$ , y podemos usar las mismas soluciones con  $\rho_{2D} = N_{2D}$  y  $m_a = 1$  para el caso tipo  $n$ . La expresión (4.1) representa nuestro perfil de potencial del sistema delta doble dopado tipo  $n$  ( $p$ ) en GaAs. En la presente sección nos concentraremos

en la solución del DDD tipo  $n$ , y en el capítulo de Resultados, haremos la distinción entre los dos diferentes sistemas: el tipo  $p$  y el tipo  $n$ .

Nombraremos al segundo término añadido al potencial, de la ecuación (4.1), *carga imagen*. Además, planteamos que el nuevo parámetro  $z_1$  sea una medida  $z_0$  de la forma

$$z_1 = \zeta \left( \frac{\alpha d}{2z_0} + 1 \right) z_0, \quad (4.2)$$

como se observa, se ha introducido un tercer parámetro  $\zeta$ , que será una constante de proporcionalidad entre  $z_1$  y  $z_0$ , además de que es adimensional.

Para determinar los valores de los parámetros introducidos, imponemos una la primera condición, que consiste en hacer la derivada de (4.1) igual a cero en el origen ( $z = 0$ ). La expresión (4.1) para la región  $-d/2 \leq z \leq 0$  toma la forma:

$$V(z) = \frac{-\alpha^2}{[\alpha(z + d/2) + z_0]^4} - \frac{\beta^2}{(-\beta z + z_1)^4}, \quad (4.3)$$

de tal manera que para con la condición de la primera derivada

$$V'(z = 0) = \frac{4\alpha^3}{[\alpha d/2 + z_0]^5} - \frac{4\beta^3}{(z_1)^5} = 0. \quad (4.4)$$

Sustituyendo (4.1) en (4.4), se obtiene

$$\frac{4\alpha^3}{[\alpha d/2 + z_0]^5} = \frac{4\beta^3}{\gamma^5 (\alpha d/2 + z_0)^5}, \quad (4.5)$$

$$\beta^3 = \alpha^3 \zeta^5. \quad (4.6)$$

La expresión (4.6) será usada posteriormente para determinar el perfil de potencial propuesto.

La segunda condición al perfil de potencial tiene que ver con la densidad de impurezas en el plano dopante. En cálculos a primeros principios recientes [62], se ha reportado que a medida en que dos planos de impurezas se sobreponen (en  $d = 0$ ) el potencial tiene un mínimo más bajo, lo que indica que en el punto  $d = 0$  la concentración de impurezas aumenta. Nosotros proponemos que para el potencial en  $z = 0$

cuando los planos se solapen en  $d = 0$ , la densidad de impurezas sea el doble que para un pozo aislado. Para un pozo delta aislado, que lo representaremos como  $V_{\delta a}$ , el fondo del pozo es

$$\begin{aligned} V_{\delta a} &= \frac{-\alpha^2}{x_0^4}, \quad \text{donde } x_0 = (\alpha^3/\pi N_{2D})^{1/5}, \\ V_{\delta a} &= -\alpha^2 \left( \frac{\pi N_{2D}}{\alpha^3} \right)^{4/5}, \end{aligned}$$

Si tenemos un pozo con el doble de carga, que representaremos con  $V_{2\delta}$ , entonces

$$V_{2\delta} = -\alpha^2 \left( \frac{\pi(2N_{2D})}{\alpha^3} \right)^{4/5} = 2^{4/5} V_{\delta a}, \quad (4.7)$$

por lo que  $x_{02\delta} = x_{0\delta}/2^{4/5}$ . Ahora proponemos que el fondo del pozo en  $d = 0$  y  $z = 0$  sea  $V_{2\delta}$ , es decir  $-2^{4/5}\alpha^2/z_0^4$ , de esta manera usando las ideas anteriores en (4.3) obtenemos

$$V(z = d = 0) = -\frac{\alpha^2}{z_0^4} - \frac{\beta^2}{z_1^4} = -\frac{2^{4/5}\alpha^2}{z_0^4}, \quad (4.8)$$

además, usando el hecho de que  $z_1 = \zeta(\alpha d/2 + z_0)$  se obtiene

$$-\frac{\alpha^2}{z_0^4} - \frac{(\alpha^3 \zeta^5)^{2/3}}{\zeta^4 z_0^4 \left(\frac{\alpha d}{z_0} + 1\right)^4} = -\frac{2^{4/5}\alpha^2}{z_0^4}, \quad (4.9)$$

$$\frac{\zeta^{\frac{10}{3} - \frac{12}{3}}}{\left(\frac{\alpha d}{z_0} + 1\right)^4} = 2^{4/5} - 1, \quad (4.10)$$

$$\zeta = \frac{1}{(2^{4/5} - 1)^{3/2} \left(\frac{\alpha d}{z_0} + 1\right)^6}. \quad (4.11)$$

Las ecuaciones (4.2), (4.6) y (4.11) son las expresiones para las condiciones impuestas en nuestro nuevo potencial (4.1).

Para que el segundo término en (4.1) que hemos añadido tenga sentido físico, esperamos sea una función de la distancia entre los pozos ( $d$ ) ya que para  $d = 0$  se debe cumplir que su derivada sea cero en  $z = 0$  y que la densidad de impurezas sea el doble, además esperamos que a medida en que  $d$  aumente el término de potencial de carga imagen disminuya. En este tenor analizamos el término de potencial carga

imagen

$$\frac{-\beta^2}{(-\beta z + z_1)^4} = \frac{\beta^2}{z_1^4 \left(-\frac{\beta z}{z_1} + 1\right)^4}, \quad (4.12)$$

utilizando (4.2) , (4.6) y (4.11), la expresión anterior se puede reescribir como

$$\frac{\beta^2}{(-\beta z + z_1)^4} = (2^{4/5} - 1) \frac{\alpha^2}{z_0^4}, \quad (4.13)$$

en (4.13) a una  $N_{2D}$  fija, el potencial carga imagen es evidentemente una constante. De esta manera se propone que  $\zeta = 1/(2^{4/5} - 1) \left(\frac{\alpha d}{z_0} + 1\right)^A$ , donde tal y como se analizó en la segunda condición  $A = 6$  cuando  $z = d = 0$ , y  $A$  tome un valor diferente para  $d \neq 0$ , en cuyo caso se determina por la estructura de bandas del problema. Para este sistema se ha tomado  $A = 1/5$ .

En resumen, el valor de los parámetros para determinar la estructura electrónica en (4.1) serán

$$\zeta = \frac{1}{(2^{4/5} - 1)^{3/2} \left(\frac{\alpha d}{z_0} + 1\right)^{1/5}}, \quad \text{con } d \neq 0 \quad (4.14)$$

$$z_1 = \zeta(\alpha d + z_0), \quad (4.15)$$

$$\beta = \zeta^{5/3} \alpha. \quad (4.16)$$

## 4.2. Delta dopado cuádruple

Para un sistema  $\delta$ -dopado cuádruple (DDC) proponemos un potencial similar al caso DDD, tal y como en el caso previo definiremos la función en la región  $-\infty < z \leq 0$ , siendo simétrico respecto al origen. De esta manera en la región mencionada el potencial para  $d > 0$  tiene la forma

$$V(z) = \frac{-\alpha^2}{(\alpha |z + 3d/2| + z_0)^4} - \frac{\alpha^2}{(\alpha |z + d/2| + z_0)^4} - \frac{\alpha^2}{(\alpha |z| + z_1)^4}, \quad (4.17)$$

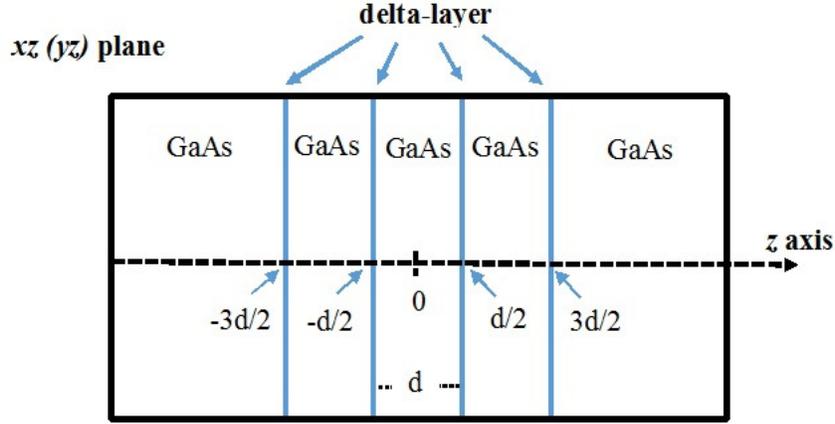


Figura 4.1: Esquema de una estructura  $\delta$ -dopada cuádruple. En esta figura se muestra una sección transversal de la estructura citada relacionada al plano  $xz$  o  $yz$ . En azul los cuatro planos dopantes separados a una distancia  $d$ .

el parámetro  $d$  indica la distancia de separación entre dos planos dopantes adyacentes. La **figura 4.1** muestra una representación esquemática de una sección transversal del  $\delta$ -dopado cuádruple (DDC), en azul se muestran los planos separados una distancia  $d$ . Analizando la expresión (4.17), el primer y segundo término representan a los pozos delta aislados, ubicados en  $z = -3d/2$  y  $z = -d/2$  respectivamente; el tercer término corresponde a un pozo centrado en el origen asociado a una carga imagen.

En este caso el potencial asociado a la carga imagen debe cumplir con que su derivada para  $d > 0$  sea cero.

Por otro lado el potencial en  $d = 0$  debe tender a un potencial delta simple para un plano dopante con el cuádruple de concentración, sabemos que el potencial de un pozo delta aislado  $V_\delta$  tiene la forma

$$V(z) = \frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0^*)^4}, \quad \text{para } d = 0. \quad (4.18)$$

donde  $z_0^* = z_0/4^{4/5}$ .

Entonces el perfil de potencial queda definido en la región  $z \leq 0$  como

$$V(z) = \frac{\alpha^2}{(-\alpha z + z_0^*)^4}, \quad \text{para } d = 0 \quad (4.19)$$

$$V(z) = \frac{-\alpha^2}{[\alpha(z + 3d/2) + z_0]^4} - \frac{\alpha^2}{[\alpha(z + d/2) + z_0]^4} - \frac{\alpha^2}{[-\alpha z + z_1]^4}, \quad (4.20)$$

La última ecuación para  $d > 0$ . Así la derivada del potencial para  $d > 0$  es

$$V'(z) = \frac{4\alpha^3}{[\alpha(z + 3d/2) + z_0]^5} + \frac{4\alpha^3}{[\alpha(z + d/2) + z_0]^5} - \frac{4\alpha^3}{(-\alpha z + z_1)^5}, \quad (4.21)$$

así aplicando la condición  $V'(z = 0) = 0$  se obtiene

$$z_1 = \left[ \frac{(3\alpha d/2 + z_0)^5 (\alpha d/2 + z_0)^5}{(3\alpha d/2 + z_0)^5 + (\alpha d/2 + z_0)^5} \right]^{1/5}. \quad (4.22)$$

Los valores de  $\alpha$  y  $z_0$  son los mismos utilizados en cálculos anteriores. Usando (4.22) en (4.17) se cumple la condición de la continuidad de la derivada tal y como fue propuesto, además se cumple de manera automática la condición asociada al cuádruple de concentración plasmada en (4.18). Por consecuencia al momento solo fue necesario introducir un único nuevo parámetro para cumplir las dos condiciones impuestas.

La expresión (4.17) representa el perfil de potencial de un sistema delta cuádruple dopado, sin embargo será necesario proponer un nuevo modelo proporcional al modelo previo que sea consistente con valores de la energía de Fermi reportado en [75]. Así tenemos

$$V(z) = \gamma \left[ \frac{-\alpha^2}{(\alpha |z + 3d/2| + z_0)^4} - \frac{\alpha^2}{(\alpha |z + d/2| + z_0)^4} - \frac{\alpha^2}{(\alpha |z| + z_1)^4} \right], \quad (4.23)$$

con  $\gamma$  adimensional en el intervalo  $(0, 1]$  y función de  $d$ .

### 4.3. Determinación de la energía de Fermi

Cada impureza ionizada en el sistema aporta un electrón (hueco), de esta manera, el nivel de Fermi se puede determinar por la condición de que la cantidad total de electrones (huecos) en la banda debe ser igual al número de impurezas ionizadas en el sistema, es decir se debe cumplir la electroneutralidad del sistema. Esto implica

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz [\rho_e(z) + \rho_{imp}] = 0, \quad (4.24)$$

donde  $\rho_e(z)$  representa en este caso la densidad de electrones y  $\rho_{imp}$  es la densidad de impurezas. Ahora, la función de distribución Fermi-Dirac está dada como

$$f(\varepsilon_i(\mathbf{k})) = 1 / \exp [(\varepsilon_i(\mathbf{k}) - E_F) / k_B T] + 1, \quad (4.25)$$

donde  $\varepsilon_i$  representa la  $i$ -ésima autoenergía,  $E_F$  el nivel de Fermi,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura. Convirtiendo la suma sobre  $\mathbf{k}$  en una integral, e integrando obtenemos que

$$\rho_e(z) = -\frac{2emk_B T}{2\pi\hbar^2} \sum_{i=1}^{\infty} |F_i(z)|^2 \ln \{ \exp [(E_F - \varepsilon_i) / k_B T] + 1 \}, \quad (4.26)$$

de la cual  $F_i(z)$  representa a la función envolvente, y  $\int_{-\infty}^{\infty} dz F_i(z) = 1$ . Además usando el hecho de que  $\rho_{imp} = N_{2D}$ , la ecuación (4.24) adopta la forma

$$\frac{emk_B T}{\pi\hbar^2} \sum_{i=1}^{\infty} \ln \{ \exp [(E_F - \varepsilon_i) / k_B T] + 1 \} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho_{imp} dz. \quad (4.27)$$

En el límite  $T \rightarrow 0$ , obtenemos que

$$N_{2D} = \frac{em}{\pi\hbar^2} \sum_{i=1}^n (E_F - \varepsilon_i) H_\varepsilon(E_F - \varepsilon_i), \quad (4.28)$$

donde  $H_\varepsilon$  representa a la función de Heaviside (Con  $H_\varepsilon=1$  para  $(E_F - \varepsilon_i) > 0$  y  $H_\varepsilon=0$  para  $(E_F - \varepsilon_i) < 0$ ). De la ecuación (4.28) puede ser expresada en unidades efectivas usando (1.53) y (1.54) de tal forma que obtenemos

$$E_F^* = \frac{1}{n} \left( 4\pi N_{2D}^* + \sum \varepsilon_i^* \right). \quad (4.29)$$

La expresión (4.29) será la ecuación que utilizaremos para determinar el nivel de Fermi de un pozo cuántico a partir de sus niveles de energía y sus autoenergías. Es importante remarcar que la ecuación anterior está escrita en unidades efectivas.

# Capítulo 5

## Resultados

### 5.1. El GaAs $\delta$ -dopado doble tipo $n$

En la presente sección discutiremos los resultados más relevantes del estudio del sistema  $\delta$ -dopado doble y cuádruple. Para el caso del GaAs  $\delta$ -dopado doble tipo  $n$ , los parámetros físicos usados en nuestros cálculos son los siguientes: la densidad de impurezas ionizadas estará determinada en el intervalo  $2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \leq N_{2D} \leq 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , la constante dieléctrica con un valor  $\epsilon_r = 12.5$ , el índice de refracción del medio  $n_r = 3.2$ , la intensidad del láser incidente  $I = 0.1 \text{ MW/cm}^2$  y la masa efectiva de los electrones  $m_e^* = 0.067m_0$ , donde  $m_0$  representa la masa del electrón libre.

Se ha utilizado la ecuación (4.1) con los parámetros  $\beta$ ,  $z_1$  y  $\zeta$  definidos en (4.15) para determinar la estructura electrónica de un sistema  $\delta$ -dopado doble en GaAs tipo  $n$  al resolver la ecuación de Schrödinger del perfil de potencial calculado.

La **figura 5.1** muestra el perfil de potencial de una estructura DDD tipo  $n$  en GaAs, se puede observar la fuerte dependencia de la geometría respecto a la distancia de separación entre capas dopantes. En primer lugar observamos como el fondo del potencial depende de la distancia de separación  $d$ . En esta figura se graficaron cuatro potenciales DDD para las distancias  $d = 25, 100, 200$  y  $750 \text{ \AA}$ , además de que se muestra un potencial delta simple  $V^{2\delta}$  con una concentración  $N_{2D}^{2\delta} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Es posible observar que el sistema DDD representado por la ecuación (4.1) tiende

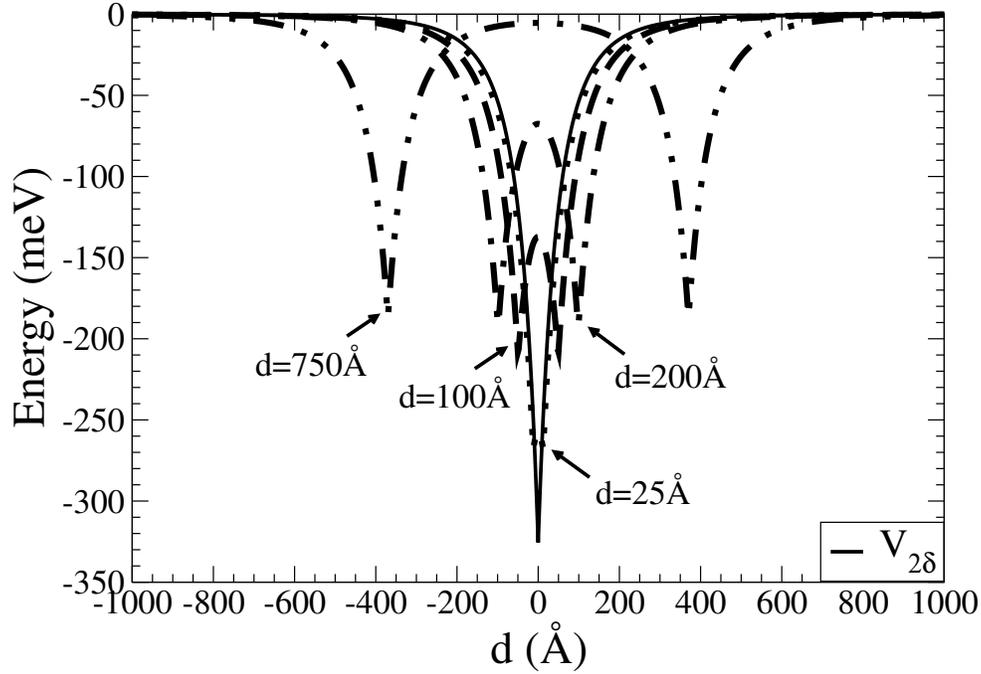


Figura 5.1: Perfil de potencial de una estructura DDD en GaAs tipo  $n$ . Se muestran diferentes perfiles para diferentes valores de distancias entre capas dopantes  $d$ . En este caso se ha considerado la densidad de impurezas bidimensionales  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

al perfil del potencial  $V^{2\delta}$  a medida que  $d \rightarrow 0$ , además notamos que a medida que la distancia entre capas es mayor, el potencial DDD se comporta como dos pozos potencial delta simples aislados.

Es importante recalcar las diferencias entre este modelo y modelos anteriores [60, 61, 82]. Como se puede observar en la **figura 3.3**, el fondo del potencial para modelos previos no depende de la distancia de separación entre capas dopantes, a diferencia de nuestro modelo, donde en distancias de separación intercapas menores a los 100 Å el perfil de potencial es completamente diferente. Esta situación como hemos mencionado previamente se sustenta en los cálculos reportados en la referencia [62]. Una segunda diferencia respecto a estos modelos se observa en la continuidad de la derivada del potencial, ya que en nuestro modelo si se cumple.

### 5.1.1. Estructura electrónica

Se determinó la estructura electrónica del presente modelo al resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger usando el perfil de potencial y los parámetros establecidos en las ecuaciones (4.1) y (4.15). El cálculo de las autoenergías y autofunciones se realizó usando las técnicas de cálculo mostradas en las secciones del **capítulo 2** en los que se utiliza la matriz de transferencia y técnicas de diagonalización de la ES respectivamente. En el presente trabajo se determinó la estructura electrónica con ambos métodos encontrando una diferencia muy pequeña ( $< 2\%$ ) entre los valores de las autoenergías generadas por uno u otro algoritmo.

En las **figuras 5.2 a) y 5.2 b)** se muestran los perfiles de potencial, autoenergías y autofunciones de sistemas DDD con distancias de separación 25 y 50 Å respectivamente. En este trabajo nos hemos concentrado en los cálculos de la estructura electrónica y propiedades del sistema DDD en distancias de separación entre capas cortas  $d < 100$  Å, ya que en diversos trabajos de la literatura se han reportado los cálculos de este mismo sistema a distancias intercapas mayores a 100 Å, tal como en [14, 59].

En la **figura 5.2 a)** se observa como el fondo del pozo tiene un valor aproximado de  $-265$  meV, mientras que un máximo relativo centrado en el origen es de  $-260$  meV. Para este caso, observamos cinco niveles energéticos de los cuales ninguno está degenerado. Por otro lado, la **figura 5.2 b)** muestra el mínimo del potencial cercano a un valor de  $-235$  meV y un máximo relativo en  $-205$  meV. En esta figura se observa como la distancia de separación entre capas  $d$ , es una medida del confinamiento de carga, es decir a medida que la  $d$  aumenta, el confinamiento de portadores disminuye. Es importante mencionar que a medida que la distancia entre capas es mayor, los dos primeros niveles de energía se aproximan, lo que posteriormente propiciaría la degeneración de éstos.

Los niveles de energía versus la distancia de separación entre capas dopantes se muestran en la **figura 5.3** para valores desde 10 Å hasta 480 Å. Se puede observar la dependencia de las energías de los niveles ocupados respecto a la distancia entre

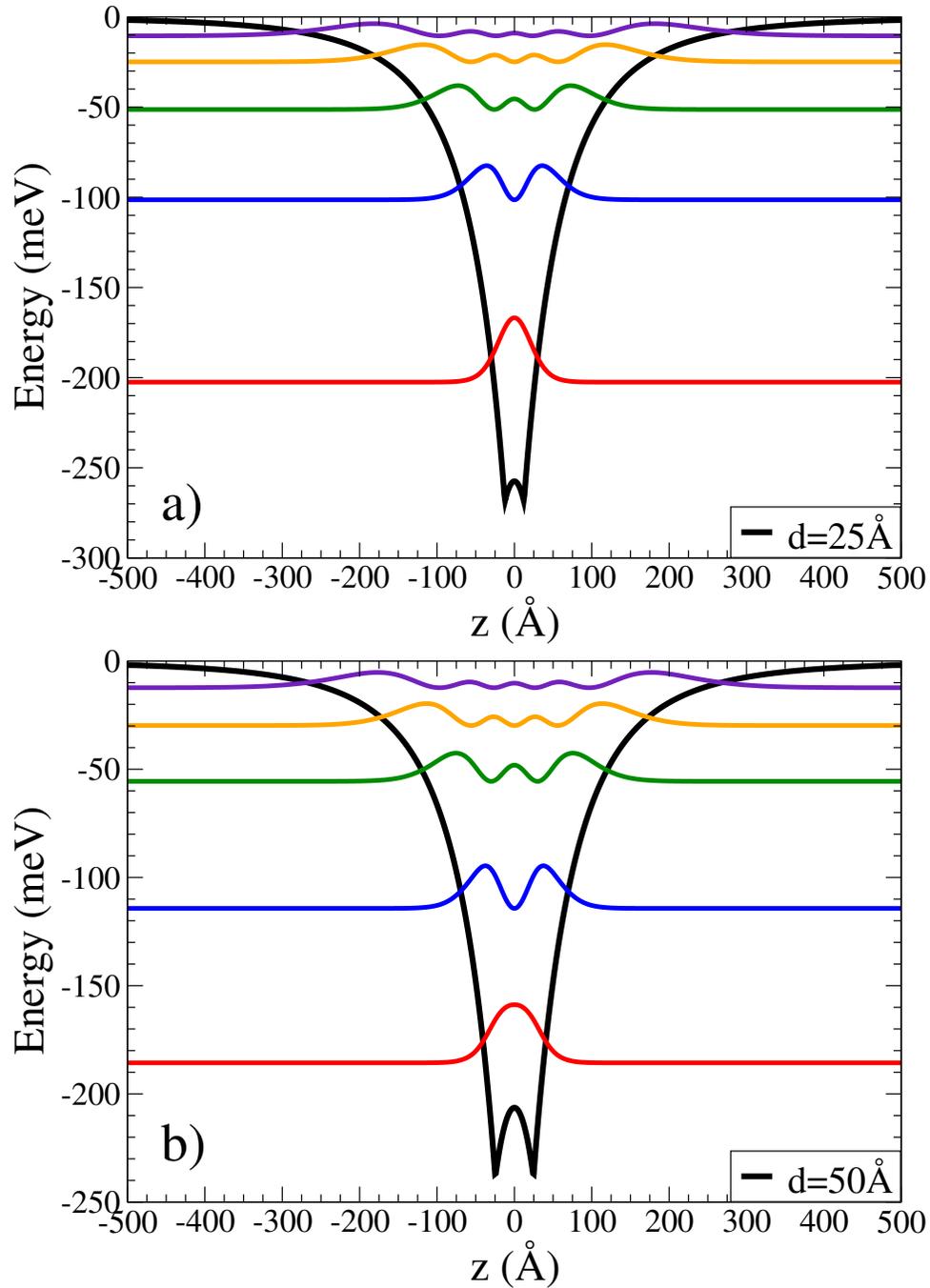


Figura 5.2: Muestra el perfil de potencial, las autoenergías y auto funciones de un sistema DDD con distancias de separación a)  $d = 25 \text{ \AA}$  y b)  $d = 50 \text{ \AA}$ . En ambos casos se ha empleado una densidad de impurezas ionizadas  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

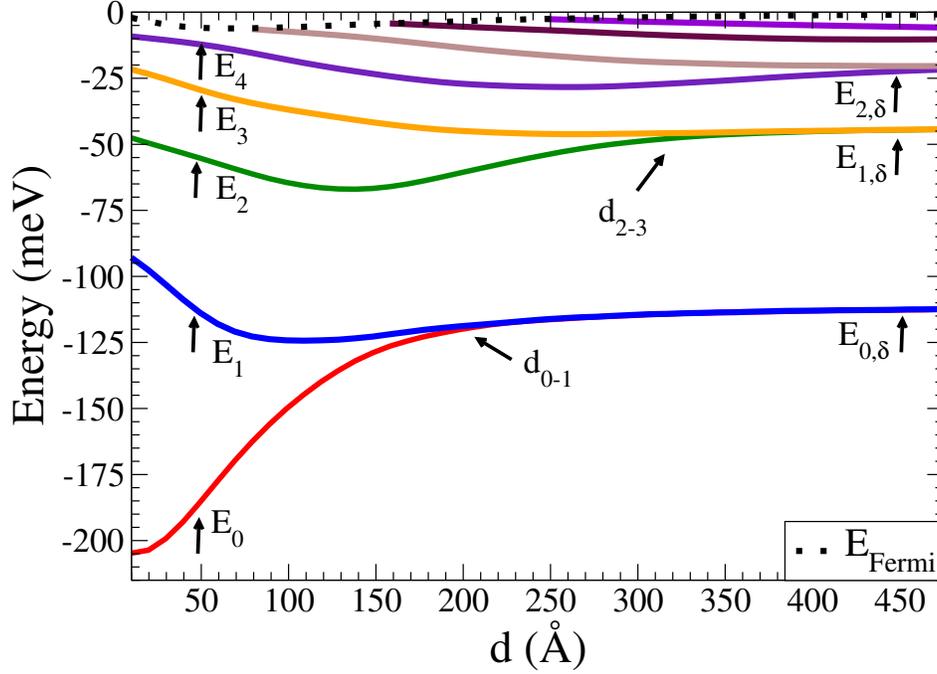


Figura 5.3: Niveles de energía del sistema  $\delta$ -doble dopado en GaAs tipo  $n$  contra la distancia intercapas  $d$ . Se muestran las distancias de degeneración de los niveles energéticos, así como el nivel de Fermi representado por la línea segmentada. Se ha considerado que la densidad de impurezas ionizadas en cada plano dopante sea  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

los planos dopantes, además la línea segmentada muestra el nivel de Fermi  $E_F$ . En un inicio, tenemos 5 niveles ocupados, hasta que aproximadamente  $80 \text{ \AA}$  aparece un nuevo nivel excitado cercano a la energía de Fermi. Alrededor de los  $200 \text{ \AA}$  los dos primeros niveles se degeneran reduciendo nuevamente el número de autovalores, esta distancia se indica en la figura como  $d_{0-1}$ . A medida que  $d$  crece, los niveles representados por  $E_2$  y  $E_3$  se degeneran aproximadamente a los  $325 \text{ \AA}$ , representada por  $d_{2-3}$ . Cuando  $d > 450 \text{ \AA}$ , los primeros niveles se han degenerado, de forma tal que el sistema DDD se comporta como un sistema delta aislado, donde las energías propias se han denotado por  $E_{0,\delta}$ ,  $E_{1,\delta}$ , etc. Cualitativamente, las distancias de degeneración coinciden con cálculos reportados en [61]. Cabe señalar que las distancias de degeneración en estos sistemas juegan un rol muy importantes en la determinación del cálculo de propiedades de transporte electrónico tal y como se muestra en [82].

La energía de Fermi de cada sistema se determinó usando la expresión (4.29), de

tal forma que se suma sobre cada nivel, desde  $n = 1$  para el cual  $E_F > E_0$ , hasta que en el nivel  $l$ -ésimo para el cual el nivel de Fermi sea menor que el valor de energía de este nivel  $l$  calculado, de ésta manera el nivel de Fermi estará entre  $E_{l-1} < E_F < E_l$  y será calculado como  $E_F = (E_l - E_{l-1}) / 2$ . Así pues, el último nivel ocupado será  $n = l - 1$ . Con esta regla (4.29), determinamos simultáneamente el número de niveles ocupados y el valor de la energía de Fermi.

Partiendo de los valores de las autoenergías, las autofunciones y el valor del nivel de Fermi, es posible determinar las propiedades ópticas no lineales del sistema tales como en coeficiente de absorción y el cambio en el índice de refracción.

### 5.1.2. Coeficiente de absorción

La absorción óptica es un fenómeno ampliamente estudiado. Se caracteriza por la excitación de un portador de carga a raíz de la absorción de un fotón cuya energía equivale a la diferencia entre los niveles energéticos accesibles al portador para *saltar* de un nivel a otro.

En el **apéndice B** se muestra el desarrollo del cálculo del coeficiente de absorción lineal y no lineal de tercer orden a partir de la teoría de matriz de densidad mostrada en el **apéndice A**. Para el desarrollo del coeficiente de absorción lineal basta con tomar consideraciones básicas de la óptica lineal, es decir, que la polarización y el campo eléctrico están relacionados como se muestra en la expresión (7.57). Por otro lado, para la contribución no lineal es necesario partir de la expresión (7.69). De esta manera es posible determinar ambas contribuciones. El término lineal del coeficiente de absorción  $\alpha^{(1)}(\omega)$  está determinado por la expresión (7.80), mientras que la contribución no lineal de tercer orden  $\alpha^{(3)}(\omega, I)$  se enmarca por la ecuación (7.86). La suma de las dos expresiones previamente mencionadas nos dará como resultado el coeficiente de absorción total (7.87), el cual denotaremos como  $\alpha(\omega, I)$ , donde  $\omega$  representa la frecuencia del haz incidente e  $I$  su intensidad.

La expresión (7.87) representa el coeficiente de absorción total para un DDD tipo  $n$  en GaAs para cualquier sistema con una densidad de impurezas ionizadas  $N_{2D}$  y con planos separados a una distancia  $d$  arbitrarias. Ahora bien, dividiremos esta última

expresión entre el coeficiente de absorción lineal de la transición entre el estado base y el primer estado excitado de un DDD de un sistema  $\delta$ -dopado aislado con una concentración fija  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  el cual llamaremos coeficiente de absorción de referencia y denotaremos como  $\alpha_{ref}^{(1)}(\omega_0)$ , donde  $\omega_0$  representa la frecuencia a la cual ocurre dicha absorción. De esta manera el coeficiente de absorción total relativo del sistema estará dado por

$$\alpha_{Rel}^{Tot}(\omega, I) = \frac{\alpha^{Tot}(\omega, I)}{\alpha_{ref}^{(1)}(\omega_0)} = \frac{[\alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I)]}{\alpha_{ref}^{(1)}(\omega_0)}. \quad (5.1)$$

Ahora bien, como podemos observar en las ecuaciones (7.80) y (7.86) del **apéndice B**, el coeficiente de absorción está determinado principalmente por dos parámetros: 1) La diferencia entre las energías de los estados final e inicial  $\Delta E$  y 2) Los elementos de matriz dipolar que renombraremos como  $M_{fi}$  asociados a los estados inicial ( $i$ ) y final ( $f$ ).

Comenzamos analizando el cuadrado de los elementos de matriz de dipolo respecto a la distancia de separación entre las capas dopantes  $d$ . La **figura 5.4** muestra el comportamiento de  $|M_{fi}|^2$  contra la distancia intercapas  $d$ . En la figura se observan principalmente tres diferentes comportamientos: 1) los elementos de matriz para las transiciones 3-0 y 4-1 son iguales a cero. 2) los elementos  $|M_{21}|^2$  y  $|M_{32}|^2$  son aproximadamente constantes para  $d$ , mientras que 3)  $|M_{10}|^2$  incrementa con  $d$ . Los elementos de matriz dependen como notamos en su definición, del solapamiento de las funciones de onda en el espacio  $z$ .

En el caso de la transición 3 – 0, el solapamiento entre el estado base y el tercer excitado es pequeño, tal y como lo podemos apreciar al observar las **figuras 5.2 a) y 5.2 b)** por lo que como esperamos el coeficiente de absorción para las transiciones 3 – 0 y 4 – 1 es muy cercano a 0. Por otro lado, para los estados 1 – 0, el solapamiento de las funciones base y el de la asociada al primer estado excitado se conserva mientras incrementa  $d$ , además de un aumento de la deslocalización, así tenemos un aumento del momento dipolar respecto a la distancia entre capas.

Para las transiciones 2 – 0, 3 – 1, 4 – 2 y 5 – 1 los elementos de matriz siempre

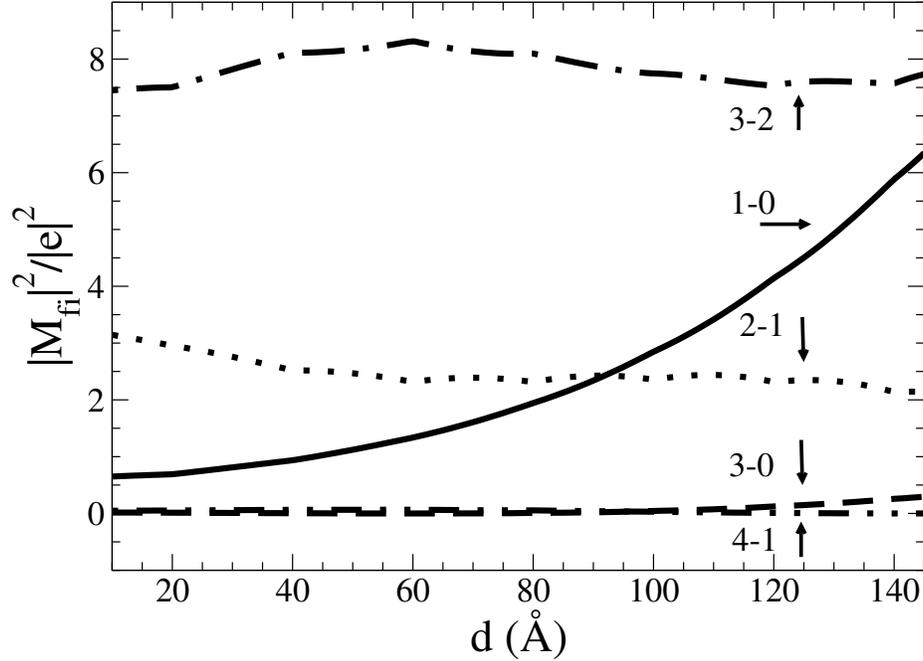


Figura 5.4: Comportamiento del cuadrado de los elementos de matriz de dipolo relativos respecto a la distancia de separación entre capas dopantes  $d$ . Para este cálculo hemos tomado las funciones propias asociadas al DDD con la concentración de  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

serán iguales a cero, esto se cumple debido que las funciones de onda, para nuestro sistema, son siempre pares y la integral expresada en (7.81) está definida en una región simétrica para una función impar.

En la **figura 5.5** podemos observar el coeficiente de absorción intersubbanda relativo a) lineal, b) no lineal y c) total entre el estado base y el primer estado excitado para diferentes distancias de separación  $d$ . La figura muestra el coeficiente de referencia lineal el cual tiene un valor máximo de  $8.013 \times 10^5 \text{ (1/m)}$ , y ha sido normalizado. En estos cálculos hemos empleado un valor de tiempo de relajación constante  $\tau_{in} = 0.14 \text{ ps}$  [84]. Para determinar el coeficiente de absorción no lineal, hemos usado un valor de intensidad de haz luminoso  $I = 0.1 \text{ MW/cm}^2$ . Podemos apreciar que el pico en el coeficiente de absorción se ubica en el valor energético de  $E_1 - E_0$  para diferentes valores de  $d$ . Tal y como observamos en la **figura 5.3**, cuando la distancia entre capas incrementa, la diferencia  $E_1 - E_0$  es cada vez menor, este comportamiento induce un corrimiento al rojo *red shifting* del coeficiente de absorción. Cuando la distancia de

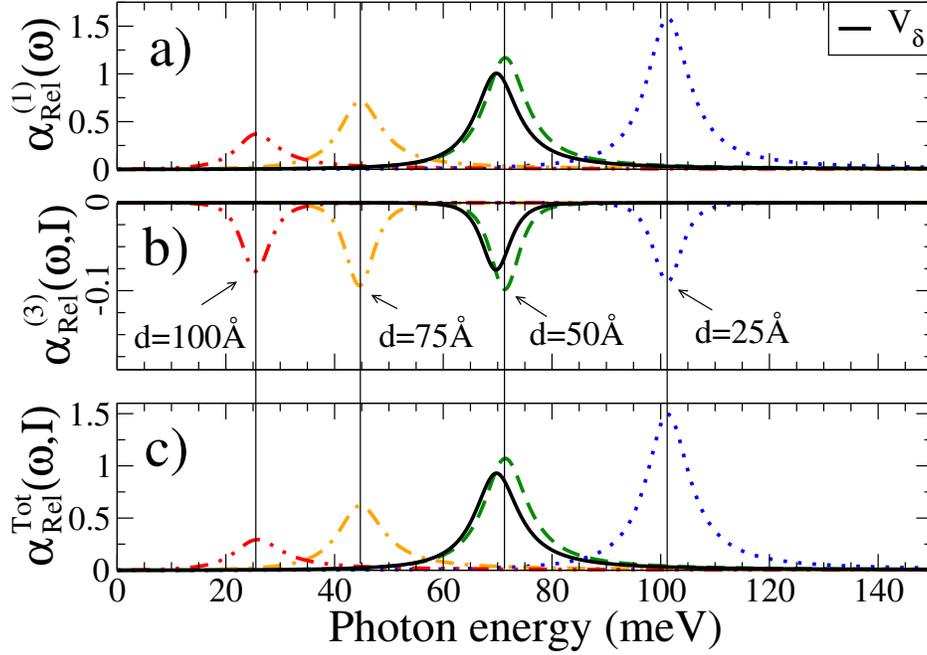


Figura 5.5: Coeficiente de absorción relativo a) lineal b) no lineal y c) total de un sistema DDD para diferentes valores de distancias intercapas. Se ha usado como referencia la transición 1-0 de un sistema delta dopado simple. Se ha usado para este cálculo  $\tau_{in} = 0.14$  ps.

separación entre capas dopadas es relativamente grande ( $d = 100$  Å), el coeficiente de absorción calculado es compatible con resultados publicados en diversos trabajos [27, 59, 83]. En distancias cortas, es posible obtener un mejoramiento en el coeficiente de absorción detectado, tal y como ocurre para  $d = 25$  Å. El mejoramiento detectado, es en realidad parte del incremento de la diferencia entre las energías del estado base y el primer excitado como medida de  $d$  y el fuerte solapamiento entre las funciones de estos estados. Es muy importante recalcar que es posible modular la absorción *a priori* de un sistema  $\delta$ -dopado doble con la distancia de separación entre las capas dopadas.

En la **figura 5.6 a)** y **5.6 b)** se muestra que las transiciones intersubbanda dominantes para las distancias  $d = 25, 50$  Å son las (1-0) y (2-1) respectivamente. Debido a que el incremento en la distancia intercapas modifica significativamente la separación energética entre las subbandas, los picos en las absorción cambian de posición además de generar un cambio en las magnitudes de las intensidades de dichas absorciones.

Es importante mencionar que en la transición intersubbanda 4-3, la contribución no lineal es dominante sobre la lineal, de forma tal que el coeficiente de absorción relativo total, es en parte negativo.

En diversos modelos donde el principio de superposición es usado como solución a la ecuación de Poisson del sistema [27, 59, 83], el coeficiente de absorción calculado es consistente con nuestros resultados, esto para distancias de separación entre planos dopantes al rededor de 200 Å. En distancias grandes ( $d > 200$  Å), los resultados son consistentes debido a que el comportamiento del  $\delta$ -dopado doble es como el de dos pozos cuánticos delta dopados aislados. De esta manera, extrapolando estos resultados, tenemos diferencias muy grandes y marcadas en distancias cortas de separación entre capas. En este trabajo hemos demostrado que el coeficiente de absorción se puede modificar al ajustar la distancia entre capas dopantes.

### 5.1.3. Cambio en el índice de refracción

De manera análoga al cálculo en el coeficiente de absorción, es posible determinar el cambio en el índice de refracción para un sistema  $\delta$ -dopado doble en una estructura de GaAs tipo  $n$ . Comenzamos indicando que en el **apéndice B** se muestra el desarrollo del cálculo del cambio en el índice de refracción a partir de la teoría de matriz de densidad mostrada en el **apéndice A**.

La contribución lineal en el cambio del índice de refracción se detalla en la expresión (7.90), mientras que la contribución no lineal de tercer orden se muestra en (7.94). La suma de ambas contribuciones nos da como resultado el cambio en el índice de refracción total (7.95).

Análogamente como en el caso del coeficiente de absorción, hemos determinado el índice de refracción relativo a la transición 1-0 de un pozo aislado con la concentración de uno de los pozos del sistema DDD.

$$\Delta n_{Rel}^{Tot}(\omega, I) = \frac{\Delta n^{Tot}(\omega, I)}{\Delta n_{ref}^{(1)}(\omega_0)} = \frac{[\Delta n^{(1)}(\omega) + \Delta n^{(3)}(\omega, I)]}{\Delta n_{ref}^{(1)}(\omega_0)}. \quad (5.2)$$

La **figura 5.7** muestra el cambio relativo en el índice de refracción **a)** lineal, **b)**

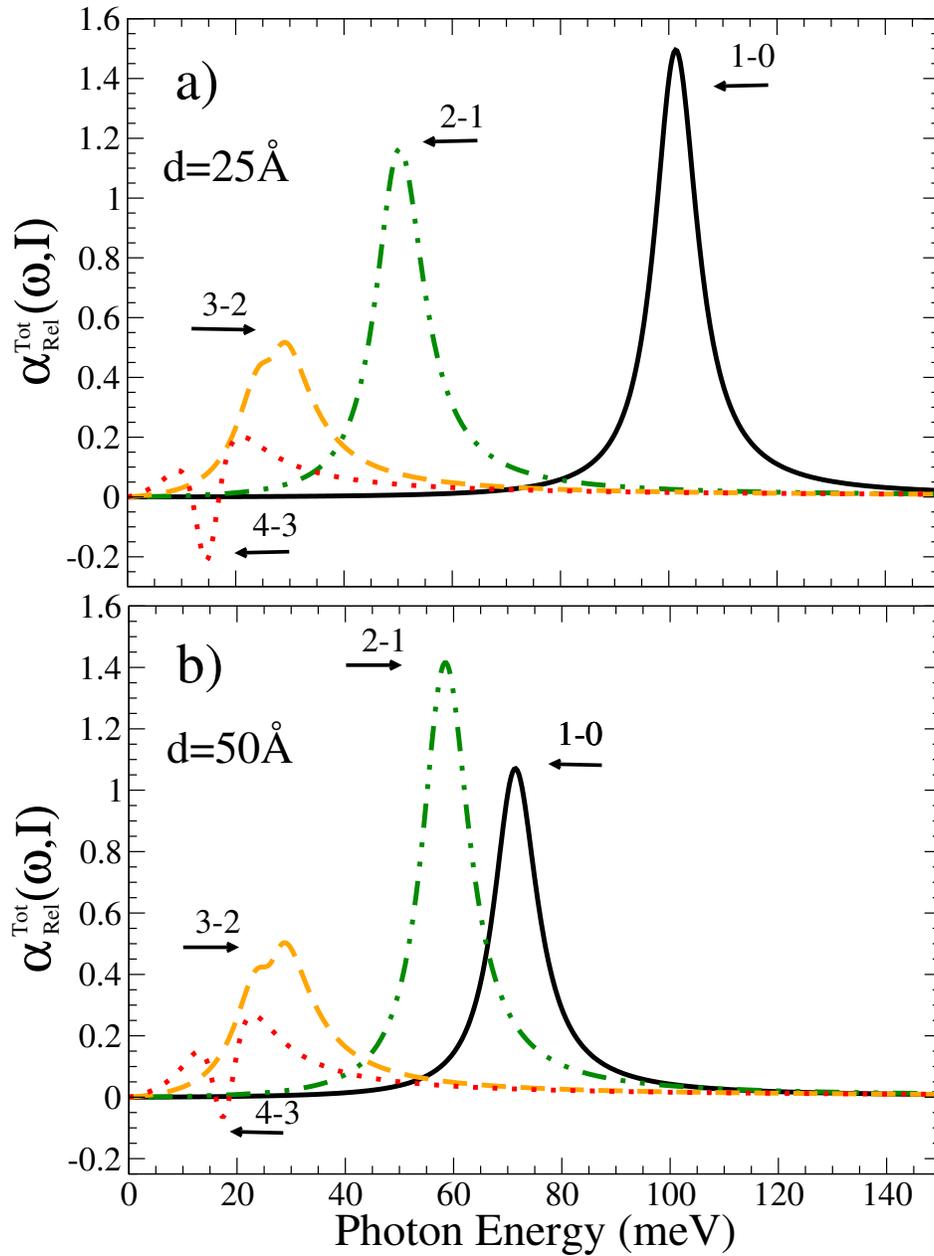


Figura 5.6: Muestra los coeficientes de absorción relativos totales para a)  $d = 25$  y b)  $d = 50 \text{ \AA}$ . En ambos casos se ha usado como referencia el coeficiente de absorción en la transición 1-0 para un pozo delta aislado simple con una concentración fija  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$

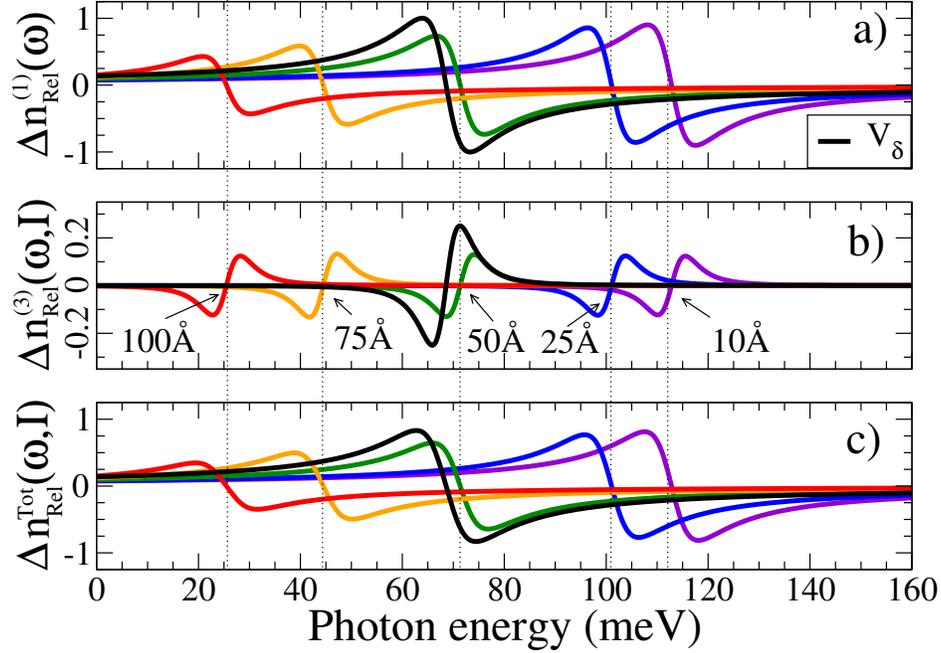


Figura 5.7: Cambio en el índice de refracción relativo para una estructura delta doble dopada tipo  $n$  en GaAs. Para este cálculo se empleó una densidad bidimensional de impurezas ionizadas  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y una intensidad de haz luminoso  $I = 0.1 \text{ MW/cm}^2$ . La gráfica en negro representa el valor de referencia para el cambio en el índice de refracción para un sistema delta aislado.

no lineal y **c)** total, para distancias de separación intercapas  $d = 10, 25, 50, 75$  y  $100 \text{ \AA}$ . Para determinar  $\Delta n_{rel}^{(3)}$ , hemos usado un valor de intensidad de haz luminoso  $I = 0.1 \text{ MW/cm}^2$ . La línea en negro muestra el cambio en el índice de refracción de referencia para la transición 1-0 de un sistema  $\delta$ -dopado simple con la concentración  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , como observamos el nodo de tal valor de referencia se ubica aproximadamente a los  $72 \text{ meV}$ , y tiene una amplitud máxima  $\Delta n_{Ref}^{(1)} = 1.21448 n_r$ . En la figura se indican con líneas punteadas los nodos (o ceros) del cambio en el índice de refracción para los cinco valores de distancias previamente descritas. En el análisis de esta propiedad podemos observar un marcado corrimiento a la zona de bajas energías (red shift) a medida que la distancia de separación intercapas aumenta. Por otro lado, se observa como la amplitud en el cambio de  $n$  depende más fuertemente en los términos lineales respecto a los no-lineales. Cabe señalar como  $\Delta n_{rel}^{Tot}$  tiene una amplitud similar al valor de referencia para distancias  $d = 10$  y  $25 \text{ \AA}$ .

En comparación con modelos donde el principio de superposición es usado como

solución a la ecuación de Poisson del sistema [27, 59], el cambio en el índice de refracción calculado es consistente con nuestros resultados, esto ocurre para distancias intercapas grandes, donde los pozos delta dobles se comportan como pozos aislados.

## 5.2. El GaAs $\delta$ -dopado doble tipo $p$

En el caso de la estructura  $\delta$ -doble dopada tipo  $p$  en GaAs, no podemos considerar únicamente un tipo de portador de carga como los electrones del tipo  $n$ . Como podemos observar en la **figura 1.1**, al realizar un dopado tipo  $p$  en la estructura, tenemos un exceso de vacancias (huecos) en nuestro sistema. Además la **figura 1.3** muestra dos bandas muy cercanas a la brecha prohibida asociadas a huecos. Por esta razón debemos considerar al menos dos portadores de carga, los huecos pesados ( $hh$ ) y los huecos ligeros ( $lh$ ). Los parámetros de inicio para los pozos cuánticos tipo  $p$  en el sistema DDD son:  $m_{hh}=0.52m_0$ ,  $m_{lh}=0.082m_0$ ,  $\epsilon_r=12.5$ , donde  $m_0$  representa la masa del electrón libre. En la **figura 5.8** se muestra el perfil de potencial (4.1) para la estructura  $\delta$ -doble dopada tipo  $p$  en GaAs, para diferentes valores de distancias intercapas. En este cálculo hemos usado un valor constante para la densidad de impurezas ionizadas  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Es importante recalcar, que al igual que en el caso tipo  $n$ , el fondo del perfil de potencial incrementa con la distancia interplanar de impurezas, de forma tal que cuando  $d > 100 \text{ \AA}$  el sistema comienza a comportarse como dos pozos aislados simples. En esta figura, los potenciales DDD son comparados con un pozo  $\delta$ -dopado simple con el doble de concentración  $V_{2\delta}$ , de tal forma (como se planteó en la metodología), el potencial  $V_{2\delta}$  se comporta como el límite de (4.1) cuando  $d \rightarrow 0$ .

En modelos previos [60, 61, 82], el fondo del potencial tiene un comportamiento constante respecto a  $d$ . Además estos modelos no consideraban que el potencial fuera continuo para su primera derivada en el origen, lo cual nuestro modelo si cumple. Ambas consideraciones físicas fueron desarrolladas en el **capítulo 4** cuando se introdujo el segundo miembro de la ecuación (4.1).

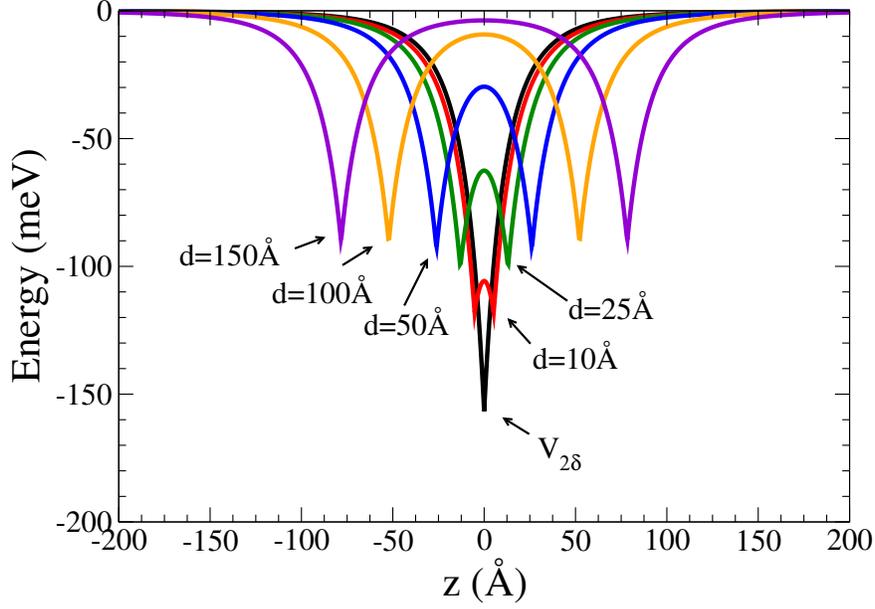


Figura 5.8: Comportamiento del perfil de potencial para una estructura DDD tipo  $p$  en GaAs. Se muestra el cambio de la geometría del potencial con relación a la distancia de separación entre capas dopantes  $d$ . Se ha empleado un valor de densidad de impurezas ionizadas  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ .

### 5.2.1. Estructura electrónica

En el marco de la teoría Thomas-Fermi hemos resuelto la solución de la ecuación de Schrödinger para determinar las energías propias, autofunciones y la distribución de carga del sistema DDD tipo  $p$  en GaAs, esto a partir del perfil de potencial enmarcado en (4.1). Para nuestro sistema, la concentración de impurezas ionizadas estara denotado por  $\rho_{2D}$ , con un valor fijo  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ . Los cálculos correspondientes al perfil de potencial, niveles de energía y funciones propias para nuestro sistema se muestran en la **figura 5.9 a)** para  $d = 10 \text{ Å}$ , **b)**  $d = 25 \text{ Å}$  y **c)**  $d = 50 \text{ Å}$ . Para estas tres diferentes estructuras dopadas, se determinaron los valores energéticos y funciones de onda asociadas a los huecos pesados ( $hh$ ) y a huecos ligeros ( $lh$ ) con la ayuda de la técnica de diagonalización matricial de la ecuación de Schrödinger descrita en el **capítulo 2**. La **figura 5.9 a)** y **b)** muestra que el nivel base en  $hl$  es menor al primer estado excitado para los  $hh$ , es decir se ubica entre el estado base y el primer excitado de los  $hh$ . Sin embargo en la **figura 5.9 c)**, el estado base para los huecos ligeros es mayor que el primer estado excitado de los huecos pesados.

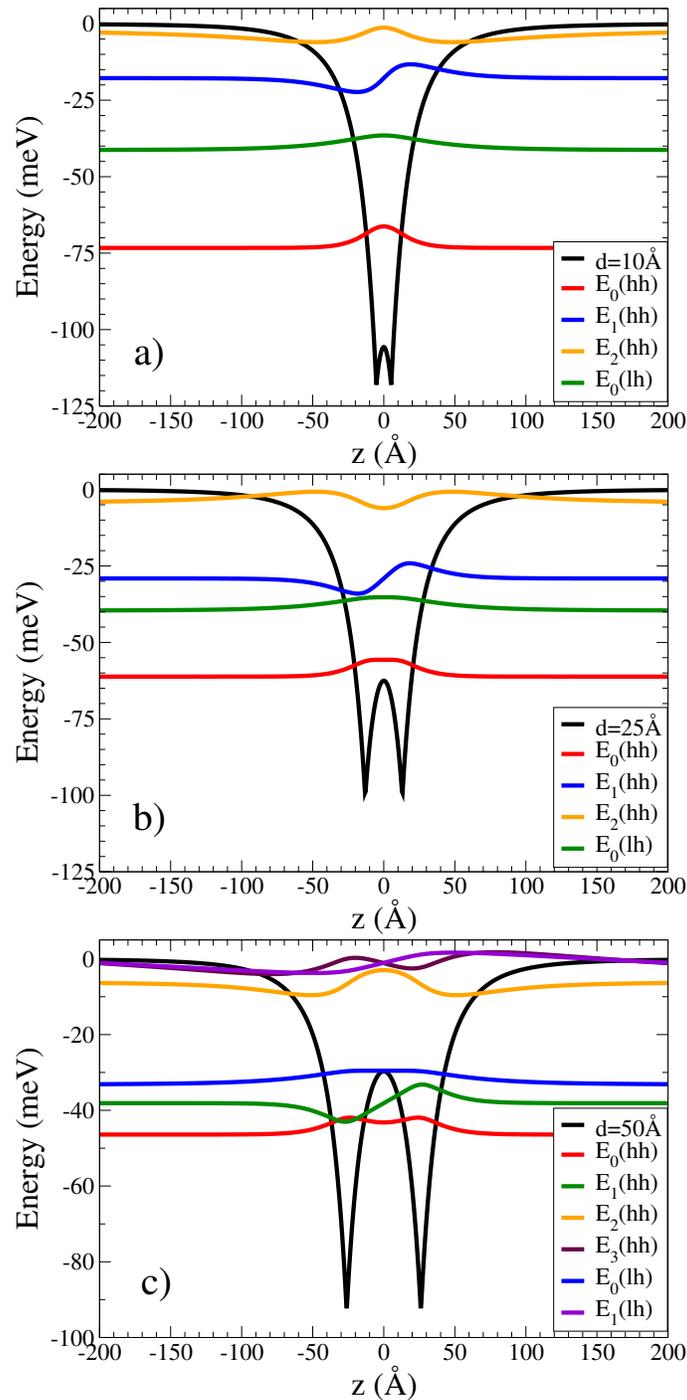


Figura 5.9: Perfil de potencial, niveles de energía y funciones de onda para valores de distancias intercapas a)  $d=10$  Å, b)  $d=25$  Å y c)  $d=50$  Å respectivamente. Para todos los casos, la concentración de impurezas en cada capa dopantes es  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13}$   $\text{cm}^{-2}$ . En cada figura, están indicados los niveles correspondientes a huecos pesados ( $hh$ ) y a huecos ligeros ( $lh$ ).

Como mencionamos en el caso del DDD tipo  $n$ , el presente trabajo se enfoca en la determinación de la estructura electrónica y las propiedades ópticas no lineales del sistema  $\delta$ -dopado doble en distancias menores a 100 Å. De esta manera, como observamos en la **figura 5.9**, son los niveles de huecos pesados los que tienen la mayor contribución en la estructura electrónica del sistema. Estos cálculos son consistentes con los reportados en la literatura por E. Ozturk en la referencia [85].

La estructura electrónica coincide cualitativamente con trabajos previos reportados para distancias mayores a 100 Å [61, 60, 82]. En distancias menores a los 100 Å la estructura electrónica es significativamente diferente a lo reportado en las referencias previamente citadas, esto ocurre a raíz de las condiciones físicas impuestas a la ecuación (4.1).

Por otro lado, podemos observar en la **figura 5.9 a)** y **b)** que únicamente existe un nivel accesible para huecos ligeros por debajo del máximo del perfil de potencial, mientras que en la **figura 5.9 c)** podemos ver que solo hay dos niveles permitidos para los  $lh$ , uno de los cuales está muy cercano a 0 meV. Por esta razón, solo determinaremos las propiedades ópticas no lineales del sistema DDD tipo  $p$  en GaAs asociados a los huecos pesados, enfocándonos en el comportamiento de las mismas en distancias de separación intercapas pequeñas.

### 5.2.2. Coeficiente de absorción

Al igual que en sistema  $\delta$ -doble dopado tipo  $n$  estudiado previamente, en esta sección mostramos los resultados del coeficiente de absorción relativo del sistema  $\delta$ -doble dopado tipo  $p$  en GaAs. Recordemos que en el **apéndice B** se muestra el desarrollo del cálculo del coeficiente de absorción lineal y no lineal de tercer orden a partir de la teoría de matriz de densidad mostrada en el **apéndice A**. De esta manera, el término lineal del coeficiente de absorción  $\alpha^{(1)}(\omega)$  está determinado por la expresión (7.80), y la contribución no lineal de tercer orden  $\alpha^{(3)}(\omega, I)$  se enmarca por la ecuación (7.86).

La ecuación (7.87) representa el coeficiente de absorción total para un DDD tipo  $p$  en GaAs para cualquier sistema con una densidad de impurezas ionizadas  $\rho_{2D}$  y con

planos de impurezas ionizadas separados a una distancia  $d$ . Ahora bien, dividiremos esta última expresión entre el coeficiente de absorción lineal de la transición entre el estado base y el primer estado excitado de un DDD entre el asociado a un sistema  $\delta$ -dopado aislado con una concentración fija  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  el cual llamaremos coeficiente de absorción de referencia y denotaremos como  $\alpha_{ref}^{(1)}(\omega_0)$ , donde  $\omega_0$  representa la frecuencia a la cual ocurre dicha absorción. De esta manera el coeficiente de absorción total relativo del sistema estará dado por

$$\alpha_{Rel}^{Tot}(\omega, I) = \frac{\alpha^{Tot}(\omega, I)}{\alpha_{ref}^{(1)}(\omega_0)} = \frac{[\alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I)]}{\alpha_{ref}^{(1)}(\omega_0)}. \quad (5.3)$$

Las ecuaciones (7.80) y (7.86) del **apéndice B**, muestran como el coeficiente de absorción está determinado principalmente por dos parámetros: 1) La diferencia entre las energías de los estados final e inicial  $\Delta E$  y 2) Los elementos de matriz dipolar que renombraremos como  $M_{fi}$  asociados a los estados inicial ( $i$ ) y final ( $f$ ), tal y como fue discutido en el caso análogo para  $\alpha_{Rel}^{Tot}(\omega, I)$  tipo  $n$ . La **figura 5.10** muestra el comportamiento del cuadrado del momento dipolar (7.81) respecto a la distancia de separación entre capas aisladas para un sistema  $\delta$ -dopado doble tipo  $p$  de huecos pesados en GaAs. El cálculo es relativo al momento dipolar por las funciones base y primer excitada de una estructura tipo delta aislada simple. Podemos observar el mismo comportamiento para la función base y primer estado excitado respecto a lo exhibido en el caso del DDD tipo  $n$  de la **figura 5.4**, donde el cuadrado del elemento de matriz del momento dipolar aumenta exponencialmente respecto a la distancia de separación intercapas. Este comportamiento, como mencionamos para el caso tipo  $n$ , se debe al solapamiento de las funciones de onda asociadas a los  $hh$ . También notamos los comportamientos opuestos entre los elementos de matriz asociados a las funciones segunda y primera excitada respecto a la tercera y segunda excitada. Finalmente el asociado al tercer estado excitado con la función base se mantiene constante cerca del cero.

La **figura 5.11** muestra el coeficiente de absorción relativo **a)** lineal, **b)** no lineal y **c)** total como función de la energía incidente para tres diferentes valores de distancias

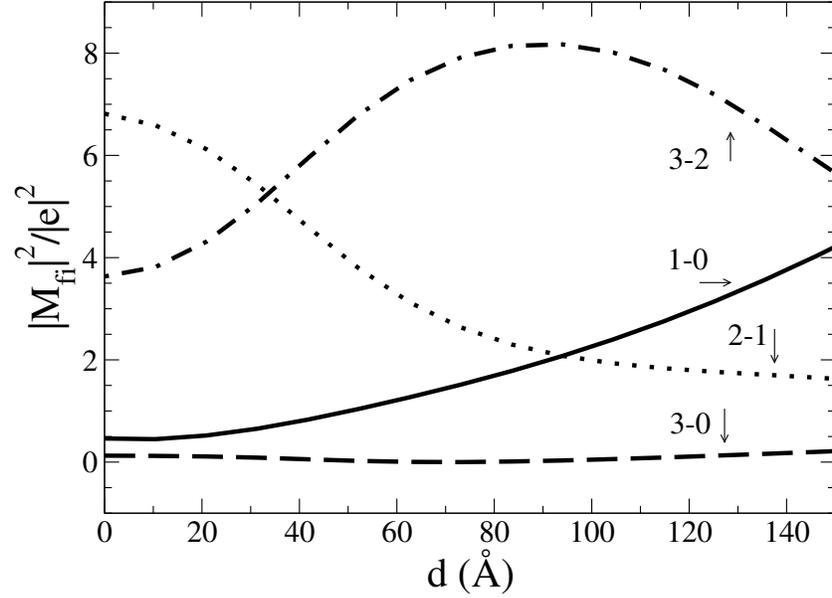


Figura 5.10: Muestra el cuadrado del momento dipolar relativo entre el cuadrado de la carga eléctrica versus la distancia de separación entre capas dopantes en una estructura DDD tipo  $p$  en GaAs. Se ha usado una concentración constante de  $\rho_{2D} = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$  por capa, además de que el valor de referencia se ha calculado para la transición 1-0 de un sistema de capa aislada.

intercapas en una estructura DDD tipo  $p$  para huecos pesados. En esta figura se representa el coeficiente de absorción de referencia asociado a una capa  $\delta$ -simple aislada, con un valor  $\alpha_{ref}^{(1)}(\omega_0) = 55.228 \times 10^5 \text{ (1/m)}$ . Los cálculos mostrados están asociados a la transición 1-0 para huecos pesados, además, se ha usado un valor de  $0.1 \text{ MWcm}^{-2}$  para la intensidad del haz luminoso, así mismo un valor de tiempo de relajación  $\tau = 0.28 \text{ ps}$  a sido empleado [86, 87].

El efecto del aumento de la distancia intercapas refleja, como esperamos, un corrimiento a la zona de bajas energías (red shift) en la posición del pico del coeficiente de absorción respecto al asociado a una capa aislada. Particularmente, en la **figura 5.10 b)** observamos que conforme las capas están más separadas, en el coeficiente de absorción, hay un mayor grado de contribución del orden no lineal, que alcanza casi el 50% de la magnitud del orden lineal cuando  $d = 25 \text{ Å}$ . Por último podemos afirmar que la amplitud decrece a la medida que la distancia aumenta, esto debido principalmente al estrechamiento entre el nivel base y el primer excitado, que a la postre se degeneran.

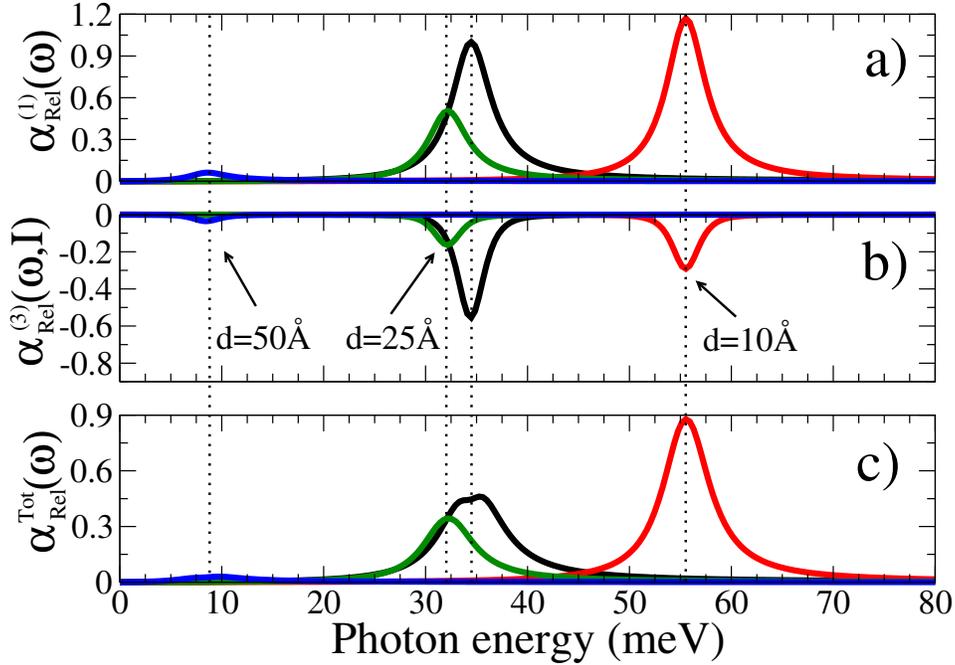


Figura 5.11: Coeficiente de absorción relativo a) lineal, b) no lineal y c) total; para una estructura DDD tipo  $p$ . El cálculo es relativo respecto al coeficiente de un delta dopado simple en la transición 1-0.

Nuestros resultados son consistentes con la absorción reportada por otros autores, donde ellos realizan cálculos para el coeficiente de absorción en una estructura DDD tipo  $n$  para GaAs bajo efectos externos como la presión hidrostática, campo eléctrico y campo magnético [14, 25, 26, 59], en los cuales los cálculos realizados para la absorción el sistema dopado doble las distancias de separación entre capas dopantes es mayor a los 100 Å, distancias en que los pozos se comportan como potenciales aislados.

### 5.2.3. Cambio en el índice de refracción

Con los mismos parámetros usados en el coeficiente de absorción, hemos determinado el cambio en el índice de refracción. La **figura 5.12** muestra el cambio en el índice de refracción relativo a) lineal, b) no lineal y c) total respecto a la energía de fotón incidente, el cálculo fue realizado para diferentes valores de distancias intercapas. En este sistema máximo del valor de referencia mostrado con la línea continua

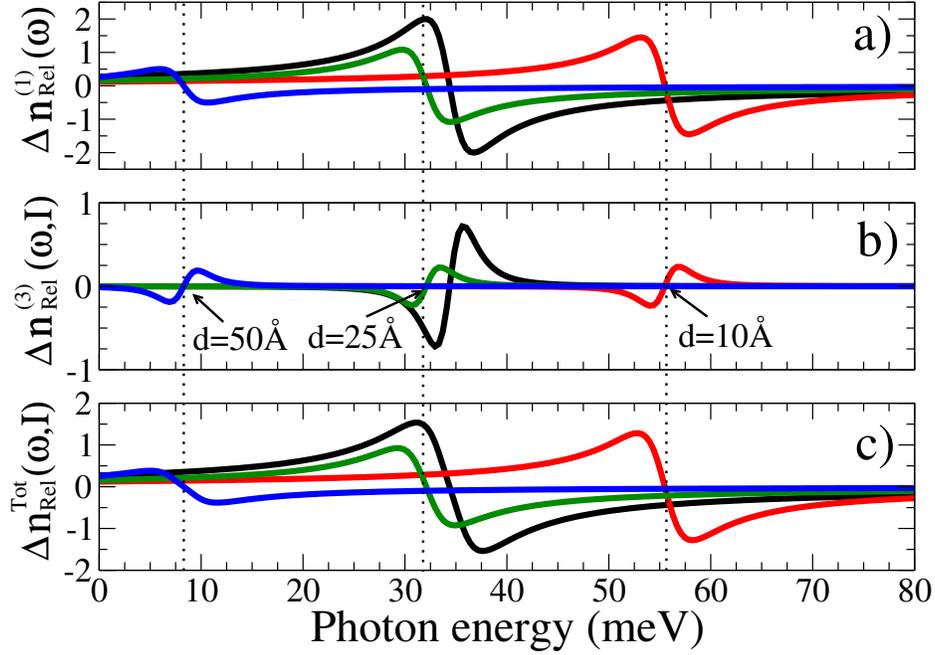


Figura 5.12: Cambio en el índice de refracción relativo de un DDD tipo  $p$ , respecto a una capa aislada simple. Se muestra a) el caso lineal, b) no lineal y c) total.

en negro, tiene un valor de  $\Delta n_{Ref}^{(1)} = 18.07n_r$ . El cambio máximo de esta propiedad óptica se detecta al rededor del valor  $d = 10 \text{ \AA}$  para el sistema DDD. En la presente figura se refleja que, cuando la distancia intercapas aumenta, el nodo (o cero) en el cambio del índice de refracción presenta un corrimiento hacia el rojo o zona de bajas energías (red-shift). En particular, se observa que cuando la distancia incrementa, el término lineal del  $n_{rel}$  decrece, mientras que la contribución no lineal permanece constante. Esta figura muestra el valor de referencia de esta cantidad para una capa  $\delta$  aislada, para la cual el nodo se localiza en 35 meV aproximadamente.

Particularmente, podemos observar en la **figura 5.12 a)** que la distancia intercapas tiene una gran influencia en los términos lineales de  $n_{rel}$  respecto a los términos no lineales mostrados en **figura 5.12 b)**.

### 5.3. El $\delta$ -dopado cuádruple

En la presente sub-sección presentaremos únicamente el modelo y estructura electrónica relacionada a un sistema  $\delta$ -dopado cuádruple (DDC) tipo  $n$  en GaAs. El

caso asociado al tipo  $p$  no será analizado por su gran similitud al caso con dopaje  $n$ . Los parámetros físicos al DDC tipo  $n$  son los siguientes: la densidad de impurezas ionizadas por plano dopante es  $2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \leq N_{2D} \leq 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , la constante dieléctrica  $\epsilon_r = 12.5$ , y la masa efectiva de los electrones estará dada como  $m_e^* = 0.067m_0$ , donde  $m_0$  es la masa del electrón libre.

La expresión (4.17) en el **capítulo 4** representa el perfil de potencial de una estructura  $\delta$ -dopada cuádruple en GaAs, como función de la distancia de separación entre planos dopantes  $d$  y la concentración de impurezas ionizadas  $N_{2D}$ . En el **capítulo 4** se muestra un esquema de esta estructura en la **figura 4.1**. Para construir el perfil de potencial mostrado en (4.17), hemos tomado consideraciones físicas análogas al caso DDD. Estas consideraciones físicas son 1) La derivada del perfil de potencial en el origen debe ser continua y 2) cuando la distancia intercapas tiende a cero, el potencial debe tender al potencial asociado a una capa  $\delta$ -dopada aislada con el cuádruple de concentración.

La **figura 5.13** ilustra, para diferentes valores de distancias intercapas  $d$ , el perfil de potencial del DDC en GaAs tipo  $n$ . En esta figura  $d$  representa la distancia entre dos capas dopadas vecinas. Al igual que en casos estudiados previamente, el dopaje crea un potencial atractivo para los portadores de carga que cambia con la distancia intercapas. En la **figura 5.13** cuando la distancia de separación entre capas es mayor a  $200 \text{ \AA}$ , el perfil de potencial se comporta aproximadamente como cuatro pozos cuánticos  $\delta$ -dopados simples, lo que implica la conocida forma en  $V$  del potencial. Por otro lado, el fondo del potencial decrece cuando la distancia  $d$  es pequeña, adicionalmente, la geometría del perfil del potencial cambia con la distancia intercapas. Los potenciales en la figura se comparan con un potencial asociado a una capa  $\delta$ -dopada simple centrada en el origen con el cuádruple de concentración de una de las capas consideradas, este sistema se representa en la figura mediante  $V_{4\delta}$ . En  $d = 0$  el potencial tiene completamente la forma en  $V$  previamente citada y representa el límite en  $d \rightarrow 0$  para nuestro sistema. Estos resultados son similares a los reportados en [62]. Este perfil de potencial es diferente para casos donde se ha usado el principio de superposición como solución a la ecuación de Poisson reportados en [14, 59, 82, 88].

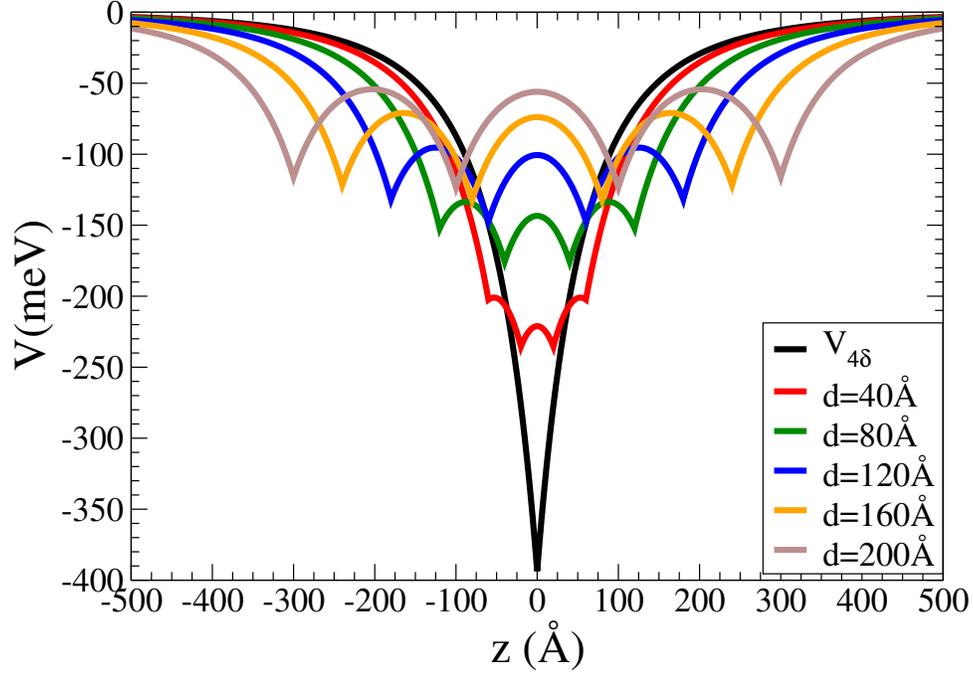


Figura 5.13: Perfil de potencial del delta-dopado cuádruple tipo  $n$  en GaAs para diferentes distancias de separación  $d$ . Cálculos realizados con una concentración de impurezas ionizadas  $N_{2D} = 2.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

### 5.3.1. Estructura electrónica

Para determinar los valores de las energías propias y funciones de onda hemos resuelto la ecuación de Schrödinger usando las técnicas de cálculo mostradas en el **capítulo 2** mediante con Matriz de Transferencia y Diagonalización Matricial. En ambos casos hemos encontrado resultado prácticamente iguales, por lo cual usaremos indistintamente los resultados mostrados por ambas técnicas.

La solución al perfil de potencial del DDC mostrado en la ecuación (4.17) acompañado por la solución del parámetro  $z_1$  en (4.22), nos permite determinar la estructura electrónica de nuestro sistema. Además hemos calculado la energía de Fermi con la ayuda de la expresión (4.29).

Para un mejor entendimiento del perfil de potencial inducido por las cuatro capas  $\delta$ -dopadas en GaAs, la **figura 5.14** muestra el potencial asociado para dos valores diferentes de  $d$ . La **figura 5.14 a)** muestra el perfil de potencial, los niveles energéticos y las funciones de onda y la energía de Fermi ( $E_F$ ) de un sistema de cuatro capas

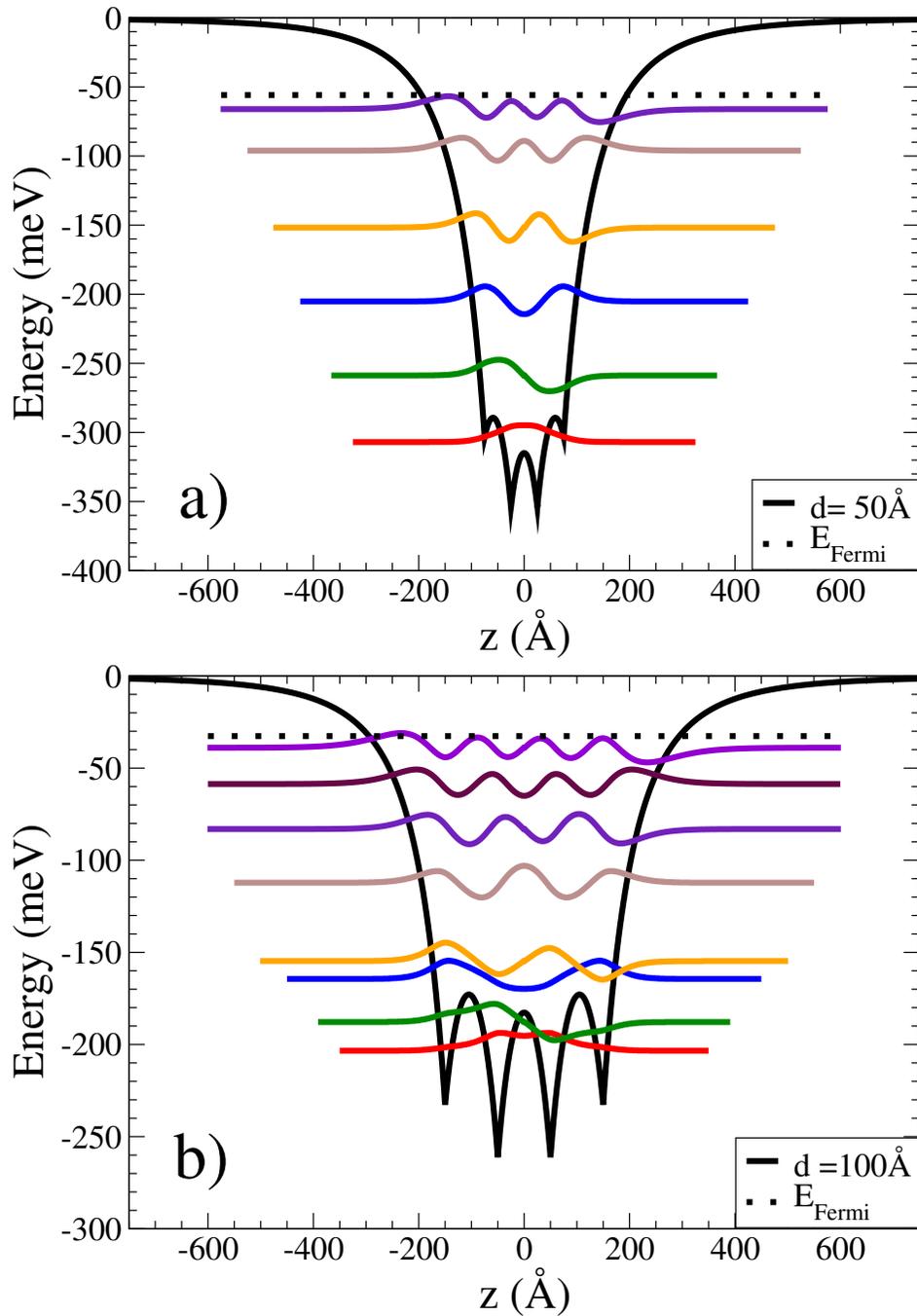


Figura 5.14: Perfil de potencial, niveles de energía, funciones de onda y nivel de Fermi de una estructura DDC tipo  $n$  en GaAs con a)  $d = 50 \text{ \AA}$  y b)  $d = 100 \text{ \AA}$ . En ambos casos la concentración de impurezas ionizadas en cada una de las cuatro capas es  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

$\delta$ -dopadas separadas una distancia  $d = 50 \text{ \AA}$ . En esta figura observamos que el fondo del pozo está localizado en  $\pm 50 \text{ \AA}$ , teniendo un valor aproximado de  $-350 \text{ meV}$ . Por otro lado el mismo sistema se muestra en la **figura 5.14 b)** para una distancia  $d = 100 \text{ \AA}$ , el valor mínimo de este pozo cuántico es aproximadamente de  $-250 \text{ meV}$ . En las **figuras 5.14 a) y b)** se pueden observar valores de una reducción en la energía de Fermi en  $-55 \text{ meV}$  y  $-30 \text{ meV}$  respectivamente.

La posición del nivel de Fermi en la banda de conducción determinado en el presente trabajo está muy por debajo de lo reportado en la referencia [75]. Además, en el marco de la teoría Thomas-Fermi este valor de energía debe ser muy cercano al cero negativo. Además, en distancias cortas entre capas dopantes, observamos que  $E_F$  es menor. Entonces, como las capas de dopaje están más separadas, el nivel de Fermi observado tiende a cero.

Debido al hecho de que el nivel de Fermi calculado es mucho más bajo de lo esperado para distancias pequeñas ( $d < 200 \text{ \AA}$ ), proponemos una corrección al modelo inicial. El nuevo perfil potencial que consideramos se indica en la ecuación (4.23), a la que se agregó el parámetro  $\gamma$ . El parámetro  $\gamma$ , que tendrá un valor entre 0 y 1, es adimensional por razones obvias. En el análisis del intervalo de valores propuestos, podemos decir que: 1) el potencial será atractivo cuando el parámetro  $\gamma$  tiene un valor positivo (mayor que 0) y 2) además, debe ser menor que 1 para no obtener un valor de energía Fermi más negativo.

El nuevo parámetro  $\gamma$  multiplica al perfil de potencial original, así el potencial se reduce proporcionalmente, generando que la energía de Fermi tienda inmediatamente a  $0 \text{ meV}$ . Cuando aplicamos la condición previamente mencionada, la condición física asociada a la derivada en el origen se conserva, mientras que la condición asociada al cuádruple de concentración en el origen es modificada ya que el fondo del potencial cambia.

Al principio del análisis para proponer nuestro modelo, pensamos que al colocar más capas de impurezas ionizadas, el fondo del pozo sería más profundo en relación con la densidad de cada capa. Sin embargo, esto no sucede y puede explicarse mediante el siguiente análisis: si aumentamos el número de capas  $\delta$ -dopadas infinitamente,

físicamente no sería posible que el fondo potencial tenga un valor infinito negativo. De esta forma, el perfil potencial que proponemos tiene un comportamiento límite.

Distancia intercapas (Å)	$\gamma (N_{2D} = 2.5 \times 10^{12} cm^{-2})$	$\gamma (N_{2D} = 5 \times 10^{12} cm^{-2})$
20	0.7179	0.7194
60	0.7498	0.7576
100	0.7958	0.8042
140	0.8265	0.8389
180	0.8611	0.8783

**Tabla 1** Valores de gamma  $\gamma$  versus la distancia de separación entre dos capas vecinas.

En la **tabla 1** se observa la variación del parámetro  $\gamma$  respecto a la distancia intercapas  $d$ , para dos diferentes valores de la densidad de impurezas ionizadas  $N_{2D}$ . El valor de  $\gamma$  fue determinado mediante el siguiente análisis: los valores calculados para  $\gamma$  mostrados, son para los cuales el valor de la energía de Fermi tiende a  $-1$  meV. La tendencia del valor de gamma en la **tabla 1** refleja el cambio del nivel de Fermi. Podemos observar que el comportamiento de  $\gamma$  es lineal respecto a la distancia intercapas independientemente del valor de la concentración de impurezas ionizadas. Por estas razones, pensamos que el parámetro gamma representa un límite físico de la medida del fondo del perfil de potencial. Una relación empírica entre  $\gamma$  y  $d$  se muestra en la expresión:

$$\gamma(d) = 0.70 + [2d \times 10^{-3}], \quad (5.4)$$

donde la distancia intercapas  $d$  está expresada en Å.

Con los valores de  $\gamma$  calculados, hemos determinado la nueva estructura electrónica del sistema DDC. La **figura 5.15** ilustra los efectos de introducir el valor del parámetro gamma en el perfil del potencial, además de los cambios en las energías del sistema y por supuesto del nivel de Fermi para el sistema DDC en GaAs tipo  $n$ . Siguiendo el mismo camino de la **figura 5.15**, determinamos la estructura electrónica del sistema en los valores **a)**  $d = 50$  Å y **b)**  $d = 100$  Å. Observamos en ambos casos, que el número de niveles incrementa, adicionalmente el fondo del pozo cuántico es

más alto.

Por otro lado, el nivel de Fermi ahora es constante debido a los cambios de la estructura introducido por  $\gamma$  en el perfil del potencial. Nuestro modelo ahora es consistente con resultados experimentales reportados en [75], cálculos *self-consistent* reportados en [30] y además de ser congruente con los resultados de la aproximación de Thomas-Fermi.

Nuestro modelo matemático es el primero en su clase para un sistema  $\delta$ -dopado cuádruple. Además, esta aproximación puede ser usada para determinar el transporte electrónica y propiedades ópticas en sistemas dopados delta. El sistema DDC que hemos determinado tiene un gran número de portadores de carga debido a que se han introducido más de una capa delta-dopada, cumpliendo con la restricción de impurezas ionizadas por cada una de las capas [89]. Por otro lado, respecto a las propiedades ópticas, es posible determinar un mayor número de transiciones para el cálculo de absorción óptica, debido a un mayor número de niveles accesibles al sistema.

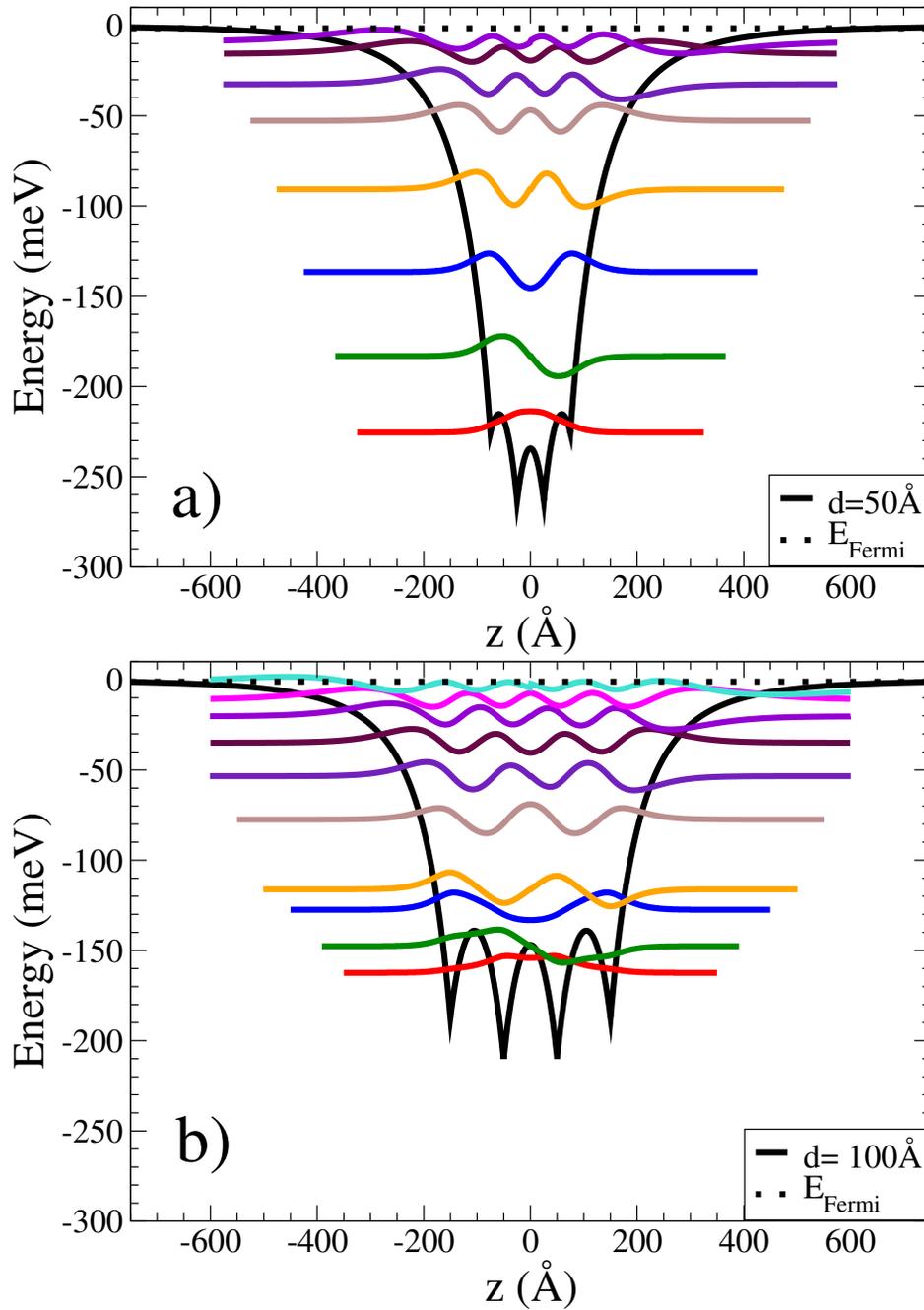


Figura 5.15: Perfil de potencial, niveles de energía, funciones de onda y nivel de Fermi de una estructura con el nuevo modelo para el DDC tipo  $n$  en GaAs con a)  $d = 50 \text{ \AA}$  y b)  $d = 100 \text{ \AA}$ . En ambos casos la concentración de impurezas ionizadas en cada una de las cuatro capas es  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

# Capítulo 6

## Conclusiones

En la presente tesis hemos propuesto un modelo matemático que determina la estructura electrónica de un sistema  $\delta$ -dopado doble tipo  $n$  en GaAs. Particularmente, hemos determinado el perfil de potencial, los niveles de energía, y las funciones de onda. En relación a lo anterior, la estructura electrónica coincide cualitativamente con resultados reportados en la literatura. Además hemos determinado dos propiedades ópticas no lineales con la ayuda de la teoría de Matriz de Densidad: el coeficiente de absorción y el cambio en el índice de refracción. Encontramos que el estado base y el primer estado excitado para la estructura citada, están altamente ocupados para distancias pequeñas entre los planos dopantes. En contraste, para distancias intercapas grandes, los niveles de energía se degeneran. Por otro lado, hemos encontrado un corrimiento a la zona de bajas energías (*red shifting*) y un mejoramiento en el coeficiente de absorción cuando modificamos la distancia de separación entre las capas dopadas del sistema  $\delta$ -dopado doble. Resultados similares ocurren en el cambio del índice de refracción, para el cual también ocurre un *red shifting* en su nodo a medida que aumentamos la distancia intercapas. Nuestro modelo está soportado por cálculos a primeros principios (*ab initio*) y diferentes modelos que usan el principio de superposición para la ecuación de Poisson en distancias de separación de capas dopantes grandes. Estos resultados son importantes para un mejor entendimiento de las propiedades de transporte electrónico y propiedades ópticas en dispositivos basados en el sistemas  $\delta$ -dopado doble en GaAs.

Simultáneamente en este trabajo de tesis, fue reportado un estudio teórico de la influencia de la distancia intercapas sobre el coeficiente de absorción lineal, no lineal y total, el cambio en el índice de refracción y la estructura electrónica en un pozo cuántico  $\delta$ -dopado doble tipo  $p$  para el GaAs. En el marco de la aproximación TF, fue calculada la estructura electrónica para huecos pesados ( $hh$ ) y huecos ligeros ( $lh$ ). La estructura electrónica muestra que para distancias intercapas menores a 50 Å, la mayor contribución a los niveles accesibles son para  $hh$ , teniendo muy pocos para  $lh$ . En este sistema, el principio de superposición al igual que el caso  $n$ , no es válido, debido a que la ecuación de Poisson asociada al sistema es no lineal. El coeficiente de absorción en  $hh$  tiene un *red-shift* en la posición de su pico y decrece en amplitud a medida que la distancia intercapas aumenta. Por otro lado, el comportamiento en el cambio del índice de refracción indica también un corrimiento a la zona de bajas energías cuando  $d$  aumenta para los  $hh$ . Estos resultados revelan que la distancia intercapas tiene una gran influencia sobre los términos lineales. Además, un mejoramiento en las propiedades ópticas puede encontrarse cuando modificamos la distancias de separación entre las capas dopantes. Estos resultados son muy importantes para la ingeniería de dispositivos optoelectrónicos.

Por último, hemos propuesto un modelo físico-matemático que representa a un sistema  $\delta$ -dopado cuádruple (DDC) en GaAs tipo  $n$ . Nuestro modelo es el primero en la literatura para un sistema DDC. El perfil de potencial, niveles de energía, funciones de onda y nivel de Fermi fueron calculados respecto a la separación entre capas dopantes y a la concentración de impurezas ionizadas. Encontramos que hay un límite físico para el fondo del perfil de potencial respecto al número de capas  $\delta$ -dopadas. Nuestro modelo es consistente con valores reportados en trabajos experimentales y auto-consistentes, en relación al nivel de Fermi. Los sistemas con múltiples capas  $\delta$ -dopadas muestran un gran cambio en sus propiedades comparadas con sistemas a capas simples. Estos resultados nos conducen a decir que existe un límite físico en el fondo del perfil del potencial como medida de la cantidad de capas dopantes. Finalmente, nuestros resultados pueden ser usados en cálculos basados en propiedades optoelectrónicas y de transporte basados en múltiples capas  $\delta$ -dopadas en GaAs.

# Capítulo 7

## Apéndices

Los presentes apéndices nos muestran a detalle el desarrollo del coeficiente de absorción lineal y no lineal así como como el cambio en el índice de refracción. Ambas propiedades se determinan a partir de la óptica no lineal (Apéndice B) y son de suma importancia para nuestros resultados. Los cálculos de las propiedades ópticas no lineales citadas se sustentan en la teoría de la matriz densidad (Apéndice A). Cabe aclarar que **en los presentes apéndices el símbolo \* indica el complejo conjugado** de un número o una función en cuestión, a diferencia de los capítulos anteriores que se usó para indicar unidades efectivas.

### 7.1. Apéndice A: Matriz densidad

El método de la matriz densidad permite describir las propiedades cuantitativas de la polarización no lineal en cualquier medio. Basados en esta teoría, es posible investigar las propiedades macroscópicas del material. Partiendo de la ecuación matricial de Heisenberg [90, 91], podemos determinar la ecuación de la matriz densidad. Así tenemos que

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi, \quad (7.1)$$

donde  $\widehat{H}$  representa el Hamiltoniano de todo el sistema. Si la ecuación (7.1) la multiplicamos desde la derecha por  $\Psi^*$

$$\widehat{H}\Psi\Psi^* = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\Psi^*, \quad (7.2)$$

y recordando que el Hamiltoniano representado por  $\widehat{H}$  es una matriz que opera únicamente sobre la función de onda del sistema  $\Psi$  y no sobre  $\Psi^*$ , podemos determinar la adjunta de la ecuación (7.1) como

$$\Psi^*\widehat{H} = -i\hbar\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}. \quad (7.3)$$

Si ahora multiplicamos desde la izquierda la expresión (7.3) por la función  $\Psi$  obtenemos

$$\Psi\Psi^*\widehat{H} = -i\hbar\Psi\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}. \quad (7.4)$$

Restando las ecuaciones (7.2) y (7.4) obtenemos

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\Psi^* + i\hbar\Psi\Psi^*\frac{\partial}{\partial t} = \widehat{H}\Psi\Psi^* - \Psi\Psi^*\widehat{H}, \quad (7.5)$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\widehat{\rho} = [\widehat{H}, \widehat{\rho}], \quad (7.6)$$

donde  $\widehat{\rho} = \Psi\Psi^*$  es el operador matriz de densidad [92] y la expresión (7.6) se le conoce como la ecuación de la matriz densidad.

Si llamamos  $\widehat{H}_0$  al hamiltoniano *no perturbado* de un sistema bajo estudio, el operador que corresponde a la energía cuando hay un campo eléctrico irradiante  $E(t)$  será:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 - \widehat{M}E(t). \quad (7.7)$$

En la expresión anterior,  $\widehat{M}$  representa el operador de momento dipolar del sistema. En la referencia [84], la ecuación de matriz densidad está dada de la forma:

$$\frac{\partial\widehat{\rho}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[\widehat{H}_0 - \widehat{M}E(t), \widehat{\rho}] - \frac{1}{2}[\widehat{\Gamma}(\widehat{\rho} - \widehat{\rho}^{(0)}) + (\widehat{\rho} - \widehat{\rho}^{(0)})\widehat{\Gamma}]. \quad (7.8)$$

Lo que se ha propuesto en [93] (7.8), es suponer que la respuesta dieléctrica del sistema ante  $E(t)$  tiene alguna clase de *amortiguamiento* (damping) producido por mecanismos de dispersión que afectan la polarización a nivel microscópico. De tal manera que se representa a dichos mecanismos de dispersión (electrón-fonón) por el operador fenomenológico  $\hat{\Gamma}$ . Suponemos que  $\hat{\Gamma}$  es diagonal y que su elemento matricial  $\Gamma_{mm}$  no es otra cosa que el inverso del tiempo de relajación de un estado  $|m\rangle$  representado por  $\tau_m$  [94]. Además, en la ecuación (7.8),  $\hat{\rho}^{(0)}$  representa a la matriz densidad no perturbada.

Por simplicidad, únicamente consideraremos la situación en la que el efecto de la radiación incidente repercute en transiciones de un sistema cuántico de dos niveles de energía  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$ . De forma tal que tenemos

$$\langle 1 | \hat{\Gamma} | 1 \rangle = \gamma_{11} = 1/\tau_1, \quad \langle 2 | \hat{\Gamma} | 2 \rangle = \gamma_{22} = 1/\tau_2. \quad (7.9)$$

La solución de la ecuación (7.8) se puede llevar a cabo de forma perturbativa expandiendo el operador de matriz densidad en una serie de potencias

$$\hat{\rho}(t) = \sum_{n=0} \hat{\rho}^{(n)}(t) = \hat{\rho}^{(0)} + \hat{\rho}^{(1)}(t) + \dots + \hat{\rho}^{(n)}(t) \dots \quad (7.10)$$

donde el elemento de matriz no perturbado  $\hat{\rho}^{(0)}$  solo tiene elementos diagonales [94]. Por otra parte, denotaremos a los elementos  $n$ -ésimos como:  $\hat{\rho}_{11}^{(n)} = \langle 1 | \hat{\rho}^{(n)} | 1 \rangle$ ,  $\hat{\rho}_{12}^{(n)} = \langle 1 | \hat{\rho}^{(n)} | 2 \rangle$ ,  $\hat{\rho}_{21}^{(n)} = \langle 2 | \hat{\rho}^{(n)} | 1 \rangle$  y  $\hat{\rho}_{22}^{(n)} = \langle 2 | \hat{\rho}^{(n)} | 2 \rangle$ . Sustituyendo (A7.10) en la ecuación (A7.8), y tomando a  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$ , es decir  $\hat{H}' = -\hat{M}E(t)$ , obtenemos

$$\frac{1}{i\hbar} \frac{\partial \rho^{(1)}}{\partial t} = [H_0, \rho^{(1)}] + [H', \rho^{(0)}] + i\hbar\Gamma\rho^{(0)}, \quad (7.11)$$

...

$$\frac{1}{i\hbar} \frac{\partial \rho^{(r)}}{\partial t} = [H_0, \rho^{(r)}] + [H', \rho^{(r-1)}] + i\hbar\Gamma\rho^{(r)}, \quad (7.12)$$

tal y como se expresa en [97]. En la referencia [84] utilizan las expresiones de deri-

vación con los índices

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho^{(n+1)}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} [H_0, \rho^{(n+1)}] + \frac{1}{i\hbar} [-ME(t), \rho^{(n)}] \\ &\quad - \frac{1}{2} [\Gamma \hat{\rho}^{(n+1)} + \hat{\rho}^{(n+1)} \Gamma]. \end{aligned} \quad (7.13)$$

la ecuación (7.13) será la expresión que utilizaremos en la derivación del coeficiente de absorción lineal y no lineal. Comenzaremos el elemento  $[H_0, \rho^{(n+1)}]_{21}$  de la forma

$$\begin{aligned} [H_0, \rho^{(n+1)}]_{21} &= \langle 2 | [H_0, \rho^{(n+1)}] | 1 \rangle, \\ &= \langle 2 | [H_0 \rho^{(n+1)}] | 1 \rangle - \langle 2 | [\rho^{(n+1)} H_0] | 1 \rangle, \end{aligned} \quad (7.14)$$

recordemos que de la ecuación de completud

$$\sum_m |m\rangle \langle m| = \hat{1}. \quad (7.15)$$

Introduciendo convenientemente (7.15) en (7.14) obtenemos

$$\begin{aligned} [H_0, \rho^{(n+1)}]_{21} &= \langle 2 | [H_0 (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) \rho^{(n+1)}] | 1 \rangle - \langle 2 | [\rho^{(n+1)} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) H_0] | 1 \rangle, \\ &= \varepsilon_2 \rho_{21}^{(n+1)} - \rho_{21}^{(n+1)} \varepsilon_1, \\ [H_0, \rho^{(n+1)}]_{21} &= (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \rho_{21}^{(n+1)}, \end{aligned} \quad (7.16)$$

donde hemos hecho  $\langle m | H_0 | m \rangle = \varepsilon_m$ , así (7.16) es el primer término del elemento de matriz 2-1 del segundo miembro de (7.13). Calculando el segundo término  $[-ME(t), \rho^{(n)}]_{21}$ :

$$\begin{aligned} [-ME(t), \rho^{(n)}]_{21} &= \langle 2 | \rho^{(n)} ME(t) | 2 \rangle - \langle 1 | ME(t) \rho^{(n)} | 1 \rangle, \\ &= \left\{ \langle 2 | \rho^{(n)} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) M | 1 \rangle - \langle 2 | M (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) \rho^{(n)} | 1 \rangle \right\} E(t), \\ [-ME(t), \rho^{(n)}]_{21} &= \left\{ \rho_{21}^{(n)} M_{11} + \rho_{22}^{(n)} M_{21} - M_{21} \rho_{11}^{(n)} - M_{22} \rho_{21}^{(n)} \right\} E(t), \end{aligned} \quad (7.17)$$

donde hemos usado la notación  $\langle a | M | b \rangle = M_{ab}$ . Por último el término asociado al

operador fenomenológico

$$\begin{aligned}
-\frac{1}{2} [\Gamma \rho^{(n+1)} + \rho^{(n+1)} \Gamma]_{21} &= -\frac{1}{2} \langle 2 | \Gamma \rho^{(n+1)} + \rho^{(n+1)} \Gamma | 1 \rangle, \\
&= -\frac{1}{2} \langle 2 | \Gamma (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) \rho^{(n+1)} | 1 \rangle + \langle 2 | \rho^{(n+1)} (|1\rangle \langle 1| + |2\rangle \langle 2|) \Gamma | 1 \rangle, \\
&= -\frac{1}{2} \left\{ \gamma_{22} \rho_{21}^{(n+1)} + \rho_{21}^{(n+1)} \gamma_{11} \right\} = -\frac{1}{2} (\gamma_{11} + \gamma_{22}) \rho_{21}^{(n+1)}, \\
-\frac{1}{2} [\Gamma \rho^{(n+1)} + \rho^{(n+1)} \Gamma]_{21} &= -\gamma_{12} \rho_{21}^{(n+1)}. \tag{7.18}
\end{aligned}$$

en (7.18) recordemos que  $\Gamma$  es diagonal y  $\langle a | \Gamma | a \rangle = \gamma_{aa} = 1/\tau_a$ , además hemos definido  $\gamma_{12} = \gamma_{21} = (1/2) (\gamma_{11} + \gamma_{22})$ . De esta manera sustituyendo (7.16), (7.17) y (7.18) en (7.13) obtenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_{21}^{(n+1)}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) \rho_{21}^{(n+1)} + \frac{1}{i\hbar} \{ \rho_{21}^{(n)} M_{11} + \rho_{22}^{(n)} M_{21} \\
&\quad - M_{21} \rho_{11}^{(n)} - M_{22} \rho_{21}^{(n)} \} E(t) - \gamma_{12} \rho_{21}^{(n+1)}, \tag{7.19}
\end{aligned}$$

que se puede reescribir de la forma

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_{21}^{(n+1)}}{\partial t} &= \left\{ \frac{1}{i\hbar} (\varepsilon_2 - \varepsilon_1) - \gamma_{12} \right\} \rho_{21}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar} \left( \rho_{11}^{(n)} - \rho_{22}^{(n)} \right) M_{21} E(t) \\
&\quad - \frac{1}{i\hbar} (M_{22} - M_{11}) E(t) \rho_{21}^{(n)}. \tag{7.20}
\end{aligned}$$

Procediendo de manera análoga (o simplemente haciendo un cambio de índices) obtenemos

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho_{12}^{(n+1)}}{\partial t} &= \left\{ \frac{1}{i\hbar} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2) - \gamma_{21} \right\} \rho_{12}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar} \left( \rho_{22}^{(n)} - \rho_{11}^{(n)} \right) M_{12} E(t) \\
&\quad - \frac{1}{i\hbar} (M_{11} - M_{22}) E(t) \rho_{12}^{(n)}. \tag{7.21}
\end{aligned}$$

Los elementos  $\rho_{22}^{(n+1)}$  y  $\rho_{11}^{(n+1)}$  se determinan de la misma forma que en los casos

anteriores. Para nuestro trabajo únicamente calcularemos  $\partial\rho_{22}^{(n+1)}/\partial t$ , es decir

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho_{22}^{(n+1)}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar}[H_0, \rho^{(n+1)}]_{22} + \frac{1}{i\hbar}[-ME(t), \rho^{(n)}]_{22} \\ &\quad - \frac{1}{2} [\Gamma\hat{\rho}^{(n+1)} + \hat{\rho}^{(n+1)}\Gamma]_{22}. \end{aligned} \quad (7.22)$$

Comenzamos con

$$\begin{aligned} [H_0, \rho^{(n+1)}]_{22} &= \langle 2| [H_0 (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) \rho^{(n+1)}] |2\rangle - \langle 2| [\rho^{(n+1)} (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) H_0] |2\rangle, \\ &= \varepsilon_2\rho_{22}^{(n+1)} - \rho_{21}^{(n+1)}\varepsilon_2 = 0. \end{aligned} \quad (7.23)$$

Ahora calculamos el elemento

$$\begin{aligned} [-ME(t), \rho^{(n)}]_{22} &= \langle 2| \rho^{(n)} ME(t) |2\rangle - \langle 2| ME(t) \rho^{(n)} |2\rangle, \\ &= \{ \langle 2| \rho^{(n)} (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) M |2\rangle - \langle 2| M (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) \rho^{(n)} |2\rangle \} E(t), \\ &= \left\{ \rho_{21}^{(n)} M_{12} + \rho_{22}^{(n)} M_{22} - M_{21} \rho_{12}^{(n)} - M_{22} \rho_{22}^{(n)} \right\} E(t), \\ [-ME(t), \rho^{(n)}]_{21} &= \left\{ \rho_{21}^{(n)} M_{12} - M_{21} \rho_{12}^{(n)} \right\} E(t). \end{aligned} \quad (7.24)$$

Y para el último término

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} [\Gamma\rho^{(n+1)} + \rho^{(n+1)}\Gamma]_{22} &= -\frac{1}{2} \langle 2| \Gamma\rho^{(n+1)} + \rho^{(n+1)}\Gamma |2\rangle, \\ &= -\frac{1}{2} \langle 2| \Gamma (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) \rho^{(n+1)} |2\rangle + \langle 2| \rho^{(n+1)} (|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) \Gamma |2\rangle, \\ &= -\frac{1}{2} \left\{ \gamma_{22}\rho_{22}^{(n+1)} + \rho_{22}^{(n+1)}\gamma_{22} \right\} = -\gamma_{22}\rho_{22}^{(n+1)}. \end{aligned} \quad (7.25)$$

De esta manera usando (7.23), (7.24) y (7.25) la ecuación (7.22) toma la forma

$$\frac{\partial\rho_{22}^{(n+1)}}{\partial t} = -\gamma_{22}\rho_{22}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar} \left\{ M_{21}\rho_{12}^{(n)} - M_{12}\rho_{21}^{(n)} \right\} E(t), \quad (7.26)$$

que procediendo análogamente para el elemento 1 – 1 (o simplemente cambiando los

índices) tenemos

$$\frac{\partial \rho_{11}^{(n+1)}}{\partial t} = -\gamma_{11} \rho_{11}^{(n+1)} - \frac{1}{i\hbar} \left\{ M_{12} \rho_{21}^{(n)} - M_{21} \rho_{12}^{(n)} \right\} E(t). \quad (7.27)$$

Las ecuaciones (7.20), (7.21), (7.26) y (7.27) son la solución de expandir la matriz densidad, y se pueden resolver si encontramos los elementos matriciales del operador estadístico en términos de sumas proporcionales a  $\exp(\pm i\omega t)$ . Para ello debemos igualar términos con la misma dependencia de  $t$  para los dos miembros. Iniciamos separando los términos que corresponden a emisiones y absorciones sucesivas de fotones, es decir, términos asociados a armónicos de orden  $n$  en el desarrollo de perturbaciones  $\widehat{\rho}^{(n)}$ ,

$$\widehat{\rho}^{(n)}(t) = \widehat{\rho}^{(n)}(\omega) e^{-i\omega t} + \widehat{\rho}^{(n)}(-\omega) e^{i\omega t}, \quad (7.28)$$

válido para cuando  $n$  es impar. Cuando  $n$  es par solamente serán dominantes los términos DC, que conducen a términos de frecuencia cero. Los términos DC serán descritos con mayor detalle en la subsección "óptica no lineal".

Si hacemos  $n = 1$  en la ecuación (7.28) tenemos:

$$\widehat{\rho}^{(1)}(t) = \widehat{\rho}^{(1)}(\omega) e^{-i\omega t} + \widehat{\rho}^{(1)}(-\omega) e^{i\omega t}, \quad (7.29)$$

y usando  $n = 0$  en (7.20), además de definir  $E_{21} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ , generamos  $\rho_{21}^{(1)}(t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{21}^{(1)}}{\partial t} &= \left( \frac{1}{i\hbar} E_{21} - \gamma_{12} \right) \rho_{21}^{(1)} - \frac{1}{i\hbar} \left( \rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)} \right) M_{21} E(t) \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar} (M_{22} - M_{11}) E(t) \rho_{21}^{(0)}. \end{aligned} \quad (7.30)$$

Recordando que  $\rho_{21}^{(0)} = 0$  ya que supusimos que  $\rho^{(0)}$  es diagonal, obtenemos

$$\frac{\partial \rho_{21}^{(1)}}{\partial t} = \left( \frac{1}{i\hbar} E_{21} - \gamma_{12} \right) \rho_{21}^{(1)} - \frac{1}{i\hbar} \left( \rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)} \right) M_{21} E(t). \quad (7.31)$$

Si tomamos la parte dependiente de  $e^{-i\omega t}$  en (7.29), al derivar e igualar los coefi-

cientes en cada miembro, obtenemos

$$-i\omega\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) = \left(\frac{1}{i\hbar}E_{21} - \gamma_{12}\right)\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) - \frac{1}{i\hbar}\left(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)}\right)M_{21}\tilde{E}, \quad (7.32)$$

$$\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) = \frac{\left(\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)}\right)M_{21}}{E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12}}\tilde{E}. \quad (7.33)$$

Ahora nos concentraremos en el cálculo de  $\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega)$ , comenzamos haciendo  $n = 3$  en (7.28) tenemos

$$\tilde{\rho}^{(3)}(t) = \tilde{\rho}^{(3)}(\omega)e^{-i\omega t} + \tilde{\rho}^{(3)}(-\omega)e^{i\omega t}, \quad (7.34)$$

además, al tomar  $n = 2$  en (7.20)

$$\begin{aligned} \frac{\partial\rho_{21}^{(3)}}{\partial t} &= \left(\frac{1}{i\hbar}E_{21} - \gamma_{12}\right)\rho_{21}^{(3)} - \frac{1}{i\hbar}\left(\rho_{11}^{(2)} - \rho_{22}^{(2)}\right)M_{21}E(t) \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}(M_{22} - M_{11})E(t)\rho_{21}^{(2)}, \end{aligned} \quad (7.35)$$

y procediendo de forma análoga a  $\rho_{21}^{(1)}$  al igualar los términos de la forma  $e^{-i\omega t}$  tenemos

$$\begin{aligned} -i\omega\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega) &= \left[\frac{1}{i\hbar}E_{21} - \gamma_{12}\right]\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega) - \frac{1}{i\hbar}\left[\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0)\right]M_{21}\tilde{E} \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar}(M_{22} - M_{11})\tilde{E}\tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0), \end{aligned} \quad (7.36)$$

que se puede reescribir como

$$\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega) = \frac{1}{E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12}} \left[ \left(\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0)\right)M_{21} + (M_{22} - M_{11})\tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0) \right] \tilde{E}. \quad (7.37)$$

Es importante notar que en la ecuación (7.37) es necesario determinar el valor de  $\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0)$ . Para calcular éstos elementos de orden 2, partiremos de las ecuaciones (7.26) y (7.27), de forma tal que tenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{22}^{(2)} = -\gamma_{22}\rho_{22}^{(2)} - \frac{1}{i\hbar}\left(M_{21}\rho_{12}^{(1)} - M_{12}\rho_{21}^{(1)}\right)E(t), \quad (7.38)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_{11}^{(2)} = -\gamma_{11}\rho_{11}^{(2)} - \frac{1}{i\hbar}\left(M_{12}\rho_{21}^{(1)} - M_{21}\rho_{12}^{(1)}\right)E(t). \quad (7.39)$$

Nos podemos concentrar únicamente en una de las ecuaciones anteriores. Si consideramos que  $\rho_{11}^{(2)}$  es un término de rectificación ( $\partial\rho_{11}^{(2)}/\partial t \equiv 0$ ) y sustituimos  $\rho_{21}^{(1)}$  y  $\rho_{12}^{(1)}$  por sus componentes estacionarias (haciendo  $t = 0$  en (7.28)), además de conservar la parte DC en  $E(t)$ ,  $\tilde{E}$ , tenemos:

$$-\gamma_{11}\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar} \left[ M_{12} \left( \tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) - \tilde{\rho}_{21}^{(1)}(-\omega) \right) - M_{21} \left( \tilde{\rho}_{12}^{(1)}(\omega) - \tilde{\rho}_{12}^{(1)}(-\omega) \right) \right] \tilde{E} = 0. \quad (7.40)$$

Los términos  $\tilde{\rho}_{12}^{(1)}(\omega)$  y  $\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(-\omega)$  se conocen como términos no resonantes y pueden calcularse de la misma forma que como llegamos a la ecuación (7.33):

$$\rho_{12}^{(1)}(\omega) = \frac{M_{12} \left( \rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)} \right)}{E_{21} + \hbar\omega + i\hbar\gamma_{12}} \tilde{E}, \quad (7.41)$$

$$\rho_{21}^{(1)}(-\omega) = \frac{M_{21} \left( \rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)} \right)}{E_{21} + \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12}} \tilde{E}. \quad (7.42)$$

En las ecuaciones (7.41) y (7.42) podemos observar, en ambos denominadores, la presencia de  $E_{21} + \hbar\omega$ . Este valor imposibilita resonancias, por lo cual, despreciaremos las contribuciones de las expresiones previamente mencionadas en el resto de los cálculos. De esta manera la ecuación (7.40) se puede reescribir y despejar el término  $\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0)$  como

$$0 = -\gamma_{11}\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar} \left[ M_{12}\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) - M_{21}\tilde{\rho}_{12}^{(1)}(-\omega) \right] \tilde{E}, \quad (7.43)$$

$$\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) = \frac{i}{\hbar\gamma_{11}} \left[ M_{12}\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) - M_{21}\tilde{\rho}_{12}^{(1)}(-\omega) \right] \tilde{E}. \quad (7.44)$$

Para determinar el valor de  $\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0)$ , primero necesitamos sustituir  $\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega)$  expresado en (7.33), además de sustituir  $\tilde{\rho}_{12}^{(1)}(-\omega)$  que se puede obtener al realizar el cambio  $\omega \rightarrow -\omega$  en (7.41). De esta manera, obtenemos

$$\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) = -\frac{2|M_{21}|^2 \left( \rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)} \right) \gamma_{12}}{\gamma_{11} \left[ (E_{21} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{12})^2 \right]} \tilde{E}^2. \quad (7.45)$$

Teniendo en cuenta que  $|M_{21}|^2 = |M_{12}|^2$  y  $\gamma_{12} = \gamma_{21}$ , podemos asegurar que

$$\tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0) = \frac{2 |M_{21}|^2 (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)}) \gamma_{12}}{\gamma_{22} [(E_{21} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{12})^2]} \tilde{E}^2, \quad (7.46)$$

donde  $|M_{21}|^2 = M_{21}M_{12}$ .

Recordemos que para determinar el valor de  $\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega)$  en (7.37), necesitamos la diferencia entre las expresiones (7.45) y (7.46)

$$\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0) = -2 \left( \frac{1}{\gamma_{11}} + \frac{1}{\gamma_{22}} \right) \frac{|M_{21}|^2 \gamma_{12} (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{[(E_{21} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{12})^2]} \tilde{E}^2. \quad (7.47)$$

Ahora, para calcular  $\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega)$ , además de tener  $\tilde{\rho}_{11}^{(2)}(0) - \tilde{\rho}_{22}^{(2)}(0)$ , es necesario obtener  $\tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0)$ . Partiendo de tomar  $n = 1$  en la ecuación (7.20) y recordar que nos interesan solo los términos estacionarios,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho_{21}^{(2)}(0) &= 0 = \left[ \frac{1}{i\hbar} E_{21} - \gamma_{12} \right] \rho_{21}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar} \left[ \rho_{11}^{(1)}(0) - \rho_{22}^{(1)}(0) \right] M_{21} \tilde{E} \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar} (M_{22} - M_{11}) \tilde{E} \tilde{\rho}_{21}^{(1)}(0), \end{aligned} \quad (7.48)$$

usando (7.29) con  $t = 0$  obtenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \left[ \frac{1}{i\hbar} E_{21} - \gamma_{12} \right] \tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar} \left[ \tilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega) + \tilde{\rho}_{11}^{(1)}(-\omega) - \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(\omega) - \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(-\omega) \right] M_{21} \tilde{E} \\ &\quad - \frac{1}{i\hbar} (M_{22} - M_{11}) \left( \tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) + \tilde{\rho}_{21}^{(1)}(-\omega) \right) \tilde{E}. \end{aligned} \quad (7.49)$$

Para la expresión anterior calculamos  $\rho_{11}^{(1)}(\omega)$  a partir de (7.27), con  $n = 0$  tenemos:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{11}^{(1)} = -\gamma_{11} \rho_{11}^{(1)} - \frac{1}{i\hbar} \left[ M_{12} \rho_{21}^{(0)}(0) - M_{21} \rho_{12}^{(0)} \right] \tilde{E}(t),$$

y teniendo en mente que la matriz densidad de orden cero es diagonal,  $\rho_{21}^{(0)} = \rho_{12}^{(0)} = 0$ ,

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\rho}_{11}^{(1)} = -\gamma_{11} \tilde{\rho}_{11}^{(1)}. \quad (7.50)$$

Usando la expresión de la matriz densidad (7.29) e igualando términos de  $\exp(-i\omega t)$ , obtenemos que

$$\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega) [\gamma_{11} - \omega] = 0, \quad (7.51)$$

observando la expresión (7.51) notamos que forzosamente  $\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega) = 0$ . Procediendo de manera análoga se cumple que  $\tilde{\rho}_{11}^{(1)}(-\omega) = \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(\omega) = \tilde{\rho}_{22}^{(1)}(-\omega) = 0$ .

Con estos últimos resultados y despreciando el término no resonante  $\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(-\omega)$ , la ecuación (7.49) adquiere la forma

$$0 = \left[ \frac{1}{i\hbar} E_{21} - \gamma_{12} \right] \tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0) - \frac{1}{i\hbar} (M_{22} - M_{11}) \tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) \tilde{E}. \quad (7.52)$$

Despejando  $\rho_{21}^{(2)}(0)$  de la expresión anterior, y sustituyendo  $\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega)$  de (7.33) tenemos

$$\tilde{\rho}_{21}^{(2)}(0) = \frac{M_{21} (M_{22} - M_{11}) (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(E_{21} - i\hbar\gamma_{12}) (E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12})} \tilde{E}^2. \quad (7.53)$$

Finalmente para determinar la contribución de tercer orden al elemento de matriz  $2 - 1$ , usamos (7.47) y (7.53) en la ecuación (7.37) llegando a

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega) = & - \frac{M_{21} (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12})} \left[ 2 \frac{(1/\gamma_{11} + 1/\gamma_{22}) \gamma_{12} |M_{21}|^2}{(E_{21} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{12})^2} \right. \\ & \left. - \frac{(M_{22} - M_{11})^2}{(E_{21} - i\hbar\gamma_{12}) (E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12})} \right] \tilde{E}^2 \tilde{E}. \end{aligned} \quad (7.54)$$

Procediendo de forma análoga al cálculo completo de  $\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega)$  podemos determinar los valores para  $\tilde{\rho}_{22}^{(3)}(\omega)$  y  $\tilde{\rho}_{11}^{(3)}(\omega)$ .

$$\tilde{\rho}_{22}^{(3)}(\omega) = \frac{2i |M_{12}|^2}{(\hbar\omega - i\hbar\gamma_{22})} \text{Im} \left[ \frac{(M_{22} - M_{11}) (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(E_{21} - i\hbar\gamma_{12}) (E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12})} \right] \tilde{E}^2 \tilde{E}, \quad (7.55)$$

$$\tilde{\rho}_{11}^{(3)}(\omega) = \frac{2i |M_{12}|^2}{(\hbar\omega - i\hbar\gamma_{11})} \text{Im} \left[ \frac{(M_{22} - M_{11}) (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})}{(E_{21} - i\hbar\gamma_{12}) (E_{21} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{12})} \right] \tilde{E}^2 \tilde{E}, \quad (7.56)$$

donde  $\text{Im}$  denota la parte imaginaria. Es importante mencionar que las contribuciones de los dos elementos descritos en las ecuaciones (7.55) y (7.56) tienen mucho

menor peso en el cálculo de las propiedades ópticas que el elemento  $\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega)$ .

## 7.2. Apéndice B: Definiciones previas: Óptica lineal y no lineal

### 7.2.1. Óptica lineal

En el marco de la óptica física convencional (óptica lineal) [95], la polarización  $\vec{P}$  y el campo eléctrico  $\vec{E}$  en un material, están relacionadas de la forma

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}, \quad (7.57)$$

además, tenemos que el llamado campo de desplazamiento,  $\vec{D}$ , en el medio material es

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}, \quad (7.58)$$

de esta manera podemos encontrar que la permitividad eléctrica está relacionada de la forma

$$\epsilon = \epsilon_0 (1 + \chi). \quad (7.59)$$

En la expresión anterior,  $\chi$  denota a la susceptibilidad que es, comúnmente, una función con fuerte dependencia de la frecuencia  $\omega$  cerca de las resonancias. Además,  $\chi$  es una cantidad compleja con una parte real dispersiva  $\chi'$  y una parte imaginaria absorbente  $\chi''$ :

$$\chi = \chi' + i\chi''. \quad (7.60)$$

Por otro lado, para un medio dieléctrico, la relación entre el coeficiente de extinción  $\kappa$  y la susceptibilidad está dada por

$$\left(\frac{\kappa c}{\omega}\right)^2 = 1 + \chi, \quad (7.61)$$

es decir, en un medio dieléctrico la cantidad  $\kappa c/\omega$  se convierte en compleja, donde  $c$

denota la velocidad de la luz en el vacío, que se expresa convencionalmente como

$$\frac{\kappa c}{\omega} = \eta + i\kappa, \quad (7.62)$$

donde  $\eta$  representa al índice de refracción del material.

Las relaciones entre el índice de refracción, el coeficiente de extinción y las dos componentes de la susceptibilidad son:

$$\begin{aligned} \eta^2 - \kappa^2 &= 1 + \chi', \\ 2\eta\kappa &= \chi''. \end{aligned} \quad (7.63)$$

Nótese que, en un medio dieléctrico transparente, esto implica que

$$\eta^2 = 1 + \chi' = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}, \quad (7.64)$$

con  $\epsilon$  designando a la constante dieléctrica del medio.

Por otro lado, partiendo de la solución de onda viajera de las ecuaciones de Maxwell es posible calcular la densidad promedio de energía para un haz de luz de frecuencia  $\omega$ , y de esta manera determinar la intensidad en el punto donde el haz de luz entra al medio. Así, consecuentemente se puede definir el coeficiente de absorción del medio como:

$$\alpha = \frac{2\omega\kappa}{c} = \frac{\omega}{\eta c} \chi''. \quad (7.65)$$

Ahora bien, utilizando la expresión (7.60), tenemos

$$\alpha = \frac{\omega}{\eta c} \chi'' = \frac{\omega}{\eta c} \text{Im} \{ \chi \},$$

y suponiendo que  $\chi$  es una función de la frecuencia, por el carácter dispersivo del medio

$$\alpha(\omega) = \frac{\omega}{\sqrt{\epsilon/\epsilon_0} 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}} \text{Im} \{ \chi \} = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon}} \text{Im} \{ \epsilon_0 \chi(\omega) \}.$$

De esta manera llegamos a la relación que usaremos para expresar al coeficiente

de absorción función de la frecuencia en relación con la susceptibilidad **[96]**:

$$\alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon}} \operatorname{Im} \{ \epsilon_0 \chi(\omega) \}. \quad (7.66)$$

Procediendo de una manera totalmente análoga a las relaciones del coeficiente de absorción, podemos determinar el cambio en el índice de refracción como una medida de la susceptibilidad con la ecuación **[96]**

$$\frac{\Delta\eta(\omega)}{\eta_r} = \frac{\eta(\omega) - \eta_r}{\eta_r} = \operatorname{Re} \left\{ \frac{\chi(\omega)}{2\eta_r^2} \right\}. \quad (7.67)$$

Las expresiones (7.66) y (7.67) serán empleadas posteriormente para nuestros cálculos.

### 7.2.2. Óptica no lineal

Como mencionamos previamente, en el caso de la óptica lineal, la propagación inducida depende linealmente de la intensidad del campo eléctrico, es decir:

$$\tilde{P}(t) = \epsilon_0 \chi^{(1)} \tilde{E}(t) \quad (7.68)$$

donde la constante de proporcionalidad  $\chi^{(1)}$  se conoce como susceptibilidad lineal.

Por otra parte, en la óptica no lineal **[97, 98]**, la respuesta óptica se puede describir al generalizar la expresión (7.68), es decir, escribiendo la polarización  $\vec{P}(t)$  como una serie de potencias en función de la intensidad de campo:

$$\begin{aligned} \tilde{P}(t) &= \epsilon_0 \left[ \chi^{(1)} \tilde{E}(t) + \chi^{(2)} \tilde{E}^2(t) + \chi^{(3)} \tilde{E}^3(t) + \dots \right] \\ &= \tilde{P}^{(1)}(t) + \tilde{P}^{(2)}(t) + \tilde{P}^{(3)}(t) + \dots \end{aligned} \quad (7.69)$$

De la expresión anterior, los factores  $\chi^{(2)}$  y  $\chi^{(3)}$  se conocen como susceptibilidad óptica no lineales de segundo y tercer orden, respectivamente. Cabe mencionar que se ha tomado los campos  $\tilde{E}$  y  $\tilde{P}$  como magnitudes escalares por simplicidad. Además, se ha supuesto que la polarización en un instante  $t$  depende solamente del valor instan-

táneo del campo eléctrico. Esto implica que el medio es no dispersivo y sin pérdidas; aunque las susceptibilidades no lineales son también funciones de las frecuencias de los campos aplicados.

De la ecuación (7.69) denotaremos a  $\tilde{P}^{(2)}(t)$  como la polarización no lineal de segundo orden y a  $\tilde{P}^{(3)}(t)$  como la polarización no lineal de tercer orden. Es importante mencionar que los procesos físicos que ocurren como resultado de la polarización de segundo orden  $\tilde{P}^{(2)}(t)$  tienden a ser distintos de aquellos que ocurren como resultado de la polarización de tercer orden  $\tilde{P}^{(3)}(t)$ .

En relación a las interacciones ópticas no lineales de segundo orden, estas pueden rescindir únicamente en cristales no centrosimétricos, es decir, en cristales que no tienen simetría de inversión. Por otra parte, las interacciones ópticas no lineales de tercer orden (descrita por la susceptibilidad  $\chi^{(3)}$ ) pueden ocurrir tanto en medios centrosimétricos como no centrosimétricos.

En cuanto a orden de magnitud, se tiene que, para la materia condensada  $\chi^{(1)}$  es del orden de la unidad. Por otra parte, se encuentra que  $\chi^{(2)} \approx (4\pi\epsilon_0)^3 \hbar^4/m^2 e^5$  y  $\chi^{(3)} \approx (4\pi\epsilon_0)^6 \hbar^8/m^4 e^{10}$  [99].

En nuestro sistema, si planteamos que el campo eléctrico, por ejemplo un haz laser, que incide sobre nuestro sistema se representa como

$$\tilde{E}(t) = \tilde{E}e^{-i\omega t} + c.c., \quad (7.70)$$

para la polarización de segundo orden  $\tilde{P}^{(2)}(t) = \epsilon_0\chi^{(2)}\tilde{E}^2(t)$  tenemos que

$$\tilde{P}^{(2)}(t) = 2\epsilon_0\chi^{(2)}EE^* + (\epsilon_0\chi^{(2)}(\omega)e^{-2i\omega t} + c.c.). \quad (7.71)$$

En la expresión (7.71) podemos observar que la polarización de segundo orden consiste, en su primer término, de una contribución de frecuencia cero o **DC** y de una contribución a frecuencia  $2\omega$  en su segundo término. La primera contribución lleva a un proceso en el que no se genera radiación electromagnética conocido como *rectificación óptica*, en el cual se crea un campo eléctrico estático a través del cristal no lineal. En tanto que, el segundo término no conduce a la generación de radiación

con una frecuencia doble a la incidente  $\omega$ , como también se le llama, de segundo armónico.

En nuestros cálculos únicamente tomaremos en cuenta la contribución de tercer orden  $\chi^{(3)}$  a las propiedades ópticas no lineales como el coeficiente de absorción y el cambio en el índice de refracción descritos en las ecuaciones (7.66) y (7.67) en los que usaremos a  $\chi = \chi^{(1)} + \chi^{(3)}$ . No se tomarán en cuenta las contribuciones de segundo orden por las razones previamente descritas.

### Coefficiente de absorción

Partimos de la expresión del coeficiente de absorción descrita (7.66)

$$\alpha(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon}} \text{Im} \{ \epsilon_0 \chi(\omega) \}. \quad (7.72)$$

Por otro lado  $\vec{P}(t)$  y la susceptibilidad dieléctrica  $\chi(t)$  que están relacionadas con el campo óptico  $\vec{E}(t)$  se pueden expresar a partir del operador del momento dipolar  $\widehat{M}$  de la forma

$$P(t) = \epsilon_0 \chi(\omega) \widetilde{E} e^{-i\omega t} + \epsilon_0 \chi(-\omega) \widetilde{E} e^{i\omega t} = \frac{1}{V} \text{Tr} \left( \widehat{\rho} \widehat{M} \right), \quad (7.73)$$

que se puede reescribir de la forma usando (7.15)

$$P(t) = \frac{1}{V} \left[ \langle 1 | \widehat{\rho} \widehat{M} | 1 \rangle + \langle 2 | \widehat{\rho} \widehat{M} | 2 \rangle \right], \quad (7.74)$$

$$= \frac{1}{V} \sum_n \left[ \rho_{11}^{(n)} M_{11} + \rho_{12}^{(n)} M_{21} + \rho_{21}^{(n)} M_{12} + \rho_{22}^{(n)} M_{22} \right], \quad (7.75)$$

y con la ayuda de (7.28)

$$P(t) = \frac{1}{V} \sum_n \left[ \widetilde{\rho}_{11}^{(n)}(\omega) M_{11} + \widetilde{\rho}_{12}^{(n)}(\omega) M_{21} + \widetilde{\rho}_{21}^{(n)}(\omega) M_{12} + \widetilde{\rho}_{22}^{(n)}(\omega) M_{22} \right] e^{-i\omega t} + \sim(-\omega). \quad (7.76)$$

En la expresión anterior usamos  $n = 1$ , igualamos coeficientes de la forma  $e^{-i\omega t}$ , eliminamos términos no resonantes, y teniendo en cuenta que  $\widetilde{\rho}_{11}^{(1)}(\omega) = \widetilde{\rho}_{22}^{(1)}(\omega) = 0$ ,

podemos escribir con la ayuda de (7.73)

$$\epsilon_0 \chi^{(1)}(\omega) \tilde{E} = \frac{1}{V} \tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega) M_{12}. \quad (7.77)$$

Si ahora sustituimos  $\tilde{\rho}_{21}^{(1)}(\omega)$  a través de (7.33), tomamos la parte imaginaria y calculamos  $\tilde{E}$ , obtenemos a través de (7.72), sin pérdida de generalidad renombramos a los estados  $1 = i$  como estado inicial y  $2 = f$  como el estado final en la transición

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon}} \frac{|M_{if}|^2}{V} \frac{(\rho_{ii}^{(0)} - \rho_{ff}^{(0)}) \hbar \gamma_{if}}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar \gamma_{if})^2}. \quad (7.78)$$

Definiendola densidad volumétrica de portadores del sistema como  $\sigma_\nu = (\rho_{11}^{(0)} - \rho_{22}^{(0)})/V$ , obtenemos

$$\alpha^{(1)}(\omega) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon}} \frac{|M_{if}|^2 \sigma_\nu \hbar \gamma_{if}}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar \gamma_{if})^2}, \quad (7.79)$$

la expresión (7.79) representa la contribución de primer orden al coeficiente de absorción óptica. Finalmente, es posible representar a los términos  $\rho_{ii}^{(0)}$  y  $\rho_{ff}^{(0)}$  como funciones de distribución Fermi-Dirac  $f_1$  y  $f_2$  respectivamente, como

$$\begin{aligned} \rho_{ii}^{(0)} &= f_1 = \frac{1}{1 + \exp[(E_i - E_F)/k_B T]}, \\ \rho_{ff}^{(0)} &= f_2 = \frac{1}{1 + \exp[(E_f - E_F)/k_B T]}, \end{aligned}$$

de tal forma que la expresión (7.79) puede ser reescrita de la forma

$$\begin{aligned} \alpha^{(1)}(\omega) &= \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_R}} \left( \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \right) \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_f)/k_B T]} \right\} \\ &\quad \times \frac{|M_{fi}|^2 (\hbar/\tau_{in})}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2}, \end{aligned} \quad (7.80)$$

donde  $\mu_0$  es la permeabilidad en el vacío,  $\epsilon_R$  la parte real de la permitividad,  $m^*$  la masa efectiva,  $L_{eff}$  el tamaño efectivo del dispositivo,  $E_1 = E_i$  el estado inicial,  $E_2 = E_f$  el nivel final de energía,  $\Delta E = E_f - E_i$ ,  $\tau_{in}$  el tiempo de relajación intersubbanda, y

finalmente  $M_{12}$  [100, 101] representa los elementos de dipol asociados con los estados

$$M_{fi} = \int_{-L_{eff}/2}^{L_{eff}/2} \psi_i^*(z) |ez| \psi_f^*(z) dz. \quad (7.81)$$

Con un proceso análogo a la contribución de primer orden al coeficiente de absorción, es posible determinar la asociada al tercer orden. Iniciamos con la relación entre la susceptibilidad y la traza de la matriz densidad por el momento dipolar

$$\epsilon_0 \chi^{(3)}(\omega) \tilde{E} = \frac{1}{V} \left[ \tilde{\rho}_{ii}^{(3)}(\omega) M_{ii} + \tilde{\rho}_{if}^{(3)}(\omega) M_{fi} + \tilde{\rho}_{fi}^{(3)}(\omega) M_{if} + \tilde{\rho}_{ff}^{(3)}(\omega) M_{ff} \right], \quad (7.82)$$

recordando que los términos  $\tilde{\rho}_{ii}^{(3)}(\omega)$  y  $\tilde{\rho}_{ff}^{(3)}(\omega)$  dados por (7.55) y (7.56) serán despreciados, y que el término  $\tilde{\rho}_{if}^{(3)}(\omega)$  al igual que su correspondiente de primer orden es de tipo no-resonante, entonces en la expresión (7.79) conservamos únicamente el término  $\tilde{\rho}_{21}^{(3)}(\omega)$  dado por (7.54). Al tomar la parte imaginaria es posible llegar a:

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = \omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon}} \tilde{E}^2 |M_{if}|^2 \sigma_\nu \text{Im} \left\{ \frac{1}{E_{fi} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{if}} \left[ \frac{2\gamma_{if}(\gamma_{ii} + \gamma_{ff}) |M_{if}|^2}{\gamma_{ii}\gamma_{ff} [(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{if})^2]} - \frac{(M_{22} - M_{11})^2}{(E_{fi} - i\hbar\omega)^2 (E_{fi} - \hbar\omega - i\hbar\gamma_{if})} \right] \right\}. \quad (7.83)$$

La intensidad del campo electromagnético incidente  $I$  puede definirse con la relación

$$\tilde{E}^2 = \frac{I}{2\epsilon_0 n c}, \quad (7.84)$$

además de simplificar usando los inversos del tiempo de relajación  $\gamma_{ii} = \gamma_{ff}$ , lo cual implica que  $\gamma_{if} = \gamma_{ii} = \gamma_{ff}$  y  $[\gamma_{if}(\gamma_{ii} + \gamma_{ff}) / \gamma_{ii}\gamma_{ff}] = 2$ , y realizando varias operaciones algebraicas, se puede simplificar la expresión (7.83) a la forma:

$$\alpha^{(3)}(\omega, I) = -\omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon}} \left( \frac{I}{2\epsilon_0 n c} \right) \frac{|M_{if}|^2 \sigma_\nu \hbar \gamma_{if}}{[(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{if})^2]} \left\{ 4 |M_{if}|^2 - \frac{(M_{ff} - M_{ii})^2 [3E_{fi}^2 - 4\hbar\omega E_{fi} + \hbar^2(\omega^2 - \gamma_{if}^2)]}{E_{fi}^2 + (\hbar\gamma_{if})^2} \right\}, \quad (7.85)$$

de forma análoga a (7.80) podemos reescribir (B7.85) a la forma

$$\begin{aligned}
\alpha^{(3)}(\omega, I) = & -\omega \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_R}} \left( \frac{I}{2\epsilon_0 n_r c} \right) \left( \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \right) \\
& \times \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_f)/k_B T]} \right\} \frac{|M_{fi}|^2 \hbar/\tau_{in}}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2]^2} \\
& \times \left\{ 4|M_{fi}|^2 - \frac{(M_{ff} - M_{ii})^2 [(\Delta E - \hbar\omega)^2 - (\hbar/\tau_{in})^2 + 2\Delta E (\Delta E - \hbar\omega)]}{(\Delta E)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2} \right\},
\end{aligned} \tag{7.86}$$

finalmente, el coeficiente de absorción óptica total estará dado por

$$\alpha(\omega, I) = \alpha^{(1)}(\omega) + \alpha^{(3)}(\omega, I), \tag{7.87}$$

que se logra de sumar las contribuciones lineal en (7.80) y la no lineal de tercer orden (7.86) como en [84].

### Cambio en el índice de refracción

Partiendo de la expresión descrita en (7.67) de la forma

$$\frac{\Delta n(\omega)}{n_r} = Re \left[ \frac{\chi(\omega)}{2n_r^2} \right], \tag{7.88}$$

y usando (7.77), podemos determinar la contribución lineal de  $\Delta n(\omega)/n_r$  como:

$$\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = \frac{\sigma_\nu |M_{if}|^2}{2n_r^2 \epsilon_0} \frac{E_{fi} - \hbar\omega}{(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{if})^2}. \tag{7.89}$$

Análogamente al cálculo del coeficiente de absorción mostrado en (7.80), podemos reescribir (7.89) a la forma

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} = & \frac{1}{2n_r^2 \epsilon_0} |M_{fi}|^2 \left( \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \right) \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_f)/k_B T]} \right\} \\
& \times \frac{\Delta E - \hbar\omega}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2},
\end{aligned} \tag{7.90}$$

Por otro lado, para la contribución de tercer orden recordamos que

$$\chi^{(3)}(\omega) = \frac{1}{V\tilde{E}\epsilon_0} \tilde{\rho}_{fi}^{(3)}(\omega) M_{if}. \quad (7.91)$$

Entonces, usando (7.54), además de las definiciones de  $\sigma_\nu$  e  $I$ , logramos obtener

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega)}{n_r} = & -\frac{I|M_{if}|^2\sigma_\nu}{4n_r^3\epsilon_0c} \operatorname{Re}\left\{ \frac{E_{fi} - \hbar\omega + i\hbar\gamma_{if}}{[(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{if})^2]^2} [4|M_{if}|^2 \right. \\ & \left. - \frac{(M_{ff} - M_{ii})^2 (E_{fi} - i\hbar\gamma_{if})(E_{fi} - \hbar\omega + i\hbar\gamma_{if})}{E_{fi}^2 + (\hbar\gamma_{if})^2}] \right\} \end{aligned} \quad (7.92)$$

Si usamos  $c^2 = 1/\epsilon_0\mu$  además de realizar operaciones algebraicas, es posible reescribir la expresión (7.92) de la forma

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} = & -\frac{|M_{if}|^2\sigma_\nu}{4n_r^3\epsilon_0} \frac{\mu c I}{[(E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar\gamma_{if})^2]^2} [4(E_{fi} - \hbar\omega)|M_{if}|^2 \\ & + \frac{(M_{ff} - M_{ii})^2}{E_{fi}^2 + (\hbar\gamma_{if})^2} \{ (E_{fi} - \hbar\omega) [E_{fi}(E_{fi} - \hbar\omega) - (\hbar\gamma_{if})^2] \\ & - (\hbar\gamma_{if})^2 (2E_{fi} - \hbar\omega) \}]. \end{aligned} \quad (7.93)$$

La ecuación (7.93) puede ser rescrita de forma análoga a (7.80) y considerando en este caso la paridad de las funciones de onda, es decir  $M_{ii} = M_{ff} = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r} = & -\frac{1}{2n_r^2\epsilon_0} \left( \frac{I}{2\epsilon_0 n_r c} \right) \left( \frac{m^* k_B T}{L_{eff} \pi \hbar^2} \right) \\ & \times \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_f)/k_B T]} \right\} \\ & \times \frac{|M_{fi}|^2}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2]^2} \end{aligned} \quad (7.94)$$

De esta manera el cambio total en el índice de refracción en el marco de la óptica no lineal puede escribirse como

$$\frac{\Delta n(\omega, I)}{n_r} = \frac{\Delta n^{(1)}(\omega)}{n_r} + \frac{\Delta n^{(3)}(\omega, I)}{n_r}, \quad (7.95)$$

que será dado por la contribución lineal expresado en (7.89) y por su respectiva contribución no lineal de tercer orden (con  $M_{ii} = M_{ff} = 0$ ) en (7.94) ambas contribuciones se detallan en [102].

# Bibliografía

- [1] Ruan X, Fang H, Zhang F, Zhang W. Effects of strain on electronic properties of Delta nitrogen-doped graphene nanoribbons. *Ferroelectrics* 2018; **530**: 1-10.
- [2] de Wergifosse M, Grimme S. Nonlinear-response properties in a simplified time-dependent density functional theory (sTD-DFT) framework: Evaluation of excited-state absorption spectra. *J. Chem. Phys.* 2019; **150**: 094112-23.
- [3] Mattana R, George JM, Jaffrès H, Van Dau FN, Fert A, Lépine B, Guivarc'h A, Jézéquel G. Electrical Detection of Spin Accumulation in a *p*-Type GaAs Quantum Well. *Phys. Rev. Lett.* 2003; **90**: 166601-4.
- [4] Jingxiu Y, Su-Huai W. First-principles study of the band gap tuning and doping control in CdSe<sub>x</sub>Te<sub>1-x</sub> alloy for high efficiency solar cell. *Chinese Phys. B* 2019; **28**: 086106-11.
- [5] Seifert G, Porezag D, Frauenheim TH. Calculations of Molecules, Clusters, and Solids with a Simplified LCAO-DFT-LDA Scheme. *Int. J. Quantum Chem.* 1996; **58**: 185-92.
- [6] Lundqvist S, March NH. Theory of Inhomogeneous Electron Gas. Plenum Press, New York: 1983.
- [7] Boland JL, Casadei A, Tütüncüoğlu G, Matteini F, Davies CL, Jabeen F, Joyce HJ, Herz LM, Morral LF, Johnston MB. Increased Photoconductivity Lifetime in GaAs Nanowires by Controlled *n*-Type and *p*-Type Doping. *ACS Nano* 2016; **10**: 4219-27.

- [8] Rodríguez-Magdaleno KA, Mora-Ramos ME, Pérez-Álvarez R, Martínez-Orozco JC. Effect of the hydrostatic pressure and shell's Al composition in the intraband absorption coefficient for core/shell spherical GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum dots. *Mat Sci Semicon Proc.* 2020; **108**: 104906.
- [9] Joyce HJ, Baig SA, Parkinson P, Davies CL, Boland JL, Tan HH, Jagadish C, Herz LM, Johnston MB. The influence of surfaces on the transient terahertz conductivity and electron mobility of GaAs nanowires. *J.Phys. D Appl. Phys.* 2017; **50**: 224001-8.
- [10] Sahoo N, Sahu T. Mobility modulation in inverted delta doped coupled double quantum well structure. *Physica B* 2016; **498**: 49-54.
- [11] Krishnamoorthy S, Xia Z, Bajaj S, Brenner M, Rajan S. Delta-doped  $\beta$ -gallium oxide field-effect transistor. *Appl. Phys. Express* 2017; **10**: 051102-5.
- [12] Tang C, Lan Y, Dutta M, Stroschio MA, Shi J. AlGaAs/GaAs Triple Quantum Well Photodetector at 5 $\mu$ m Wavelength-A Simulation Study. *IEEE J Quantum Elect.* 2016; **52**: 4400108-16.
- [13] Yesilgul U, Urgan F, Al EB, Kasapoglu E, Sari H, Sökmen I. Effects of magnetic field, hydrostatic pressure and temperature on the nonlinear optical properties in symmetric double semi-V-shaped quantum well. *Opt. Quant. Electron* 2016; **48**: 560-70.
- [14] Martínez-Orozco JC, Rodríguez-Magdaleno KA, Suárez-López JR, Duque CA, Restrepo RL. Absorption coefficient and relative refractive index change for a double delta-doped GaAs MIGFET-like structure: Electric and magnetic field effects. *Superlattice Microst.* 2016; **92**: 166-73.
- [15] Wójcik P, Adamowski J. Effect of inter- and intra-subband spin-orbit interactions on the operation of a spin transistor with a double quantum well structure. *Semicond. Sci. Tech.* 2016; **31**: 115012-24.

- [16] Das S, Nayak RK, Sahu T, Panda AK. Enhancement of Multisubband Electron Mobility in Barrier Delta-Doped Asymmetric GaAs/AlGaAs Double Quantum Well Structure. *IETE Tech. Rev.* 2016; **33**: 17-22.
- [17] Cao XA, Li XM, Li S. Conductivity Enhancement in Organic Electronics by Delta Doping. *IEEE Electr. Device L.* 2016; **37**: 1628 - 31.
- [18] Ungan F, Martínez-Orozco JC, Restrepo RL, Mora-Ramos ME. The nonlinear optical properties of GaAs-based quantum wells with Kratzer-Fues confining potential: Role of applied static fields and non-resonant laser radiation. *Optik* 2019; **185**: 881-7.
- [19] Ungan F, Pal S, Bahar MK, Mora-Ramos ME. Computation of the nonlinear optical properties of n-type asymmetric triple  $\delta$  -doped GaAs quantum well. *Superlattice Microst.* 2019; **130**: 76-86.
- [20] Rojas-Briseño JG, Del Rio S., Mora-Ramos ME, Martínez-Orozco JC. Nonlinear intersubband absorption coefficient in an  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$  quantum cascade laser-like profile. *Optik* 2020; **201**: 163431.
- [21] Martínez-Orozco JC, Ungan F, Rodríguez-Magdaleno KA. Studies on the nonlinear optical properties of two-step GaAs/ $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  quantum well. *Phys Scripta* 2019; ACCEPTED MANUSCRIPT.
- [22] Ungan F, Mora-Ramos ME, Martínez-Orozco JC. The electron-related optical responses for the square tangent quantum well: Role of applied external fields. *Optik* 2019; **188**: 12-18.
- [23] Slupinski T, Wasik D, Przybytek J. Donor-deactivating defects above the equilibrium doping limit in GaAs:Te, Ge and GaAs:Te studied by annealing and Hall effect under pressure. *J. Cryst. Growth.* 2017; **568**: 433-38.
- [24] Ozturk E. Nonlinear intersubband transitions in asymmetric double quantum wells as dependent on intense laser field. *Opt. Quant. Electron* 2016; **48**: 269-82.

- [25] Oubram O, Navarro O, Gaggero-Sager LM, Martínez-Orozco JC, Rodríguez-Vargas I. The hydrostatic pressure effects on intersubband optical absorption of  $n$ -type delta-doped quantum well in GaAs. *Solid State Sci.* 2012; **14**: 440-44.
- [26] Oubram O, Navarro O, Rodríguez-Vargas I, Gaggero LM, Noverola-Gamas H. Controlling the optical absorption properties of delta-FETs by means of contact voltage and hydrostatic pressure effects. *Superlattice Microst.* 2017; **127**: 157-64.
- [27] Kasapoglu E, Yesilgul U, Ungan F, Sökmen I, Sari H. The effect of the intense laser field on the electronic states and optical properties of  $n$ -type double delta-doped GaAs quantum wells. *Opt. Mater.* 2017; **64**: 82- 7.
- [28] Oubram O, Rodríguez-Vargas I, Gaggero-Sager LM, Cisneros-Villalobos L, Basam A, Velásquez-Aguilar JG, Limón M. Electron transport in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$   $\delta$ -MIGFETs: Conductivity enhancement induced by magnetic field effects. *Superlattice Microst.* 2016; **100**: 867-75.
- [29] Nava-Maldonado FM, Rojas-Briseño JG, Martínez-Orozco JC, Mora-Ramos ME. Strain effects in the absorption coefficient and relative refractive index change in double asymmetric  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$  quantum wells. *Physica E* 2019; **111**: 134-140.
- [30] Ioriatti L. Thomas-Fermi theory of delta-doped semiconductor structures: Exact analytical results in the high-density limit. *Phys. Rev. B* 1990; **41**: 8340-44.
- [31] Ozturk E, Ergun Y, Sari H, Sokmen I. The self-consistent calculation of Si delta-doped GaAs structures. *Appl. Phys. A-Mater.* 2001; **73**: 749-54.
- [32] Lee S, Ryu H, Campbell H, Hollenberg LCL, Simmons MY, Klimeck G. Electronic structure of realistically extended atomistically resolved disordered Si:P delta-doped layers. *Phys. Rev. B* 2011; **84**: 205309-17.
- [33] Carter DJ, Warschkow O, Marks NA, McKenzie DR. Electronic structure models of phosphorus  $\delta$ -doped silicon. *Phy. Rev. B* 2009; **79**: 033204-7.

- [34] Carter DJ, Marks NA, Warschkow O, McKenzie DR. Phosphorus  $\delta$ -doped silicon: mixed-atom pseudopotentials and dopant disorder effects. *Nanotechnology* 2011; **22**: 065701-10.
- [35] Chico L, Garcia-Moliner F, Velasco VR. Electronic structure of periodically  $\delta$ -doped GaAs:Si. *Phys. Rev. B* 1993; **48**: 11427-30.
- [36] Gaggero-Sager LM, Naumis GG, Muñoz-Hernandez MA, Montiel-Palma V. Self-consistent calculation of transport properties in Si  $\delta$ -doped GaAs quantum wells as a function of the temperature. *Physica B* 2010; **405**: 4267-70.
- [37] Noverola-Gamas H, Gaggero-Sager LM, Oubram O. Optical absorption coefficient in n-type double  $\delta$ -doped layers GaAs quantum wells. *Int J Mod Phys B* 2019; **33**: 1950215-25.
- [38] Noverola-Gamas H, Gaggero-Sager LM, Oubram O. Interlayer distance effects on absorption coefficient and refraction index change in p-type double  $\delta$ -doped GaAs quantum wells. *Chinese Phys. B* 2019; **29**: 124207-11.
- [39] Noverola-Gamas H, Gaggero-Sager LM, Oubram O. Model of n-type quadruple  $\delta$ -doped GaAs quantum wells. *Eur. Phys. J. B* 2020; Manuscript accepted.
- [40] Köhler K, Ganser P, Maier M. Comparison of Si  $\delta$ -doping with homogeneous doping in GaAs. *J. Cryst. Growth* 1993; **127**: 720-3.
- [41] Wood C, Metze G, Eastman L. Complex free-carrier profile synthesis by “atomic-plane” doping of MBE. *J. Appl. Phys.* 1980; **51**: 383-7.
- [42] Ploog K. Delta- ( $\delta$ -) Doping in MBE-Grown GaAs: Concept and device application. *J. Cryst. Growth* 1987; **81**: 304-13.
- [43] Fuhrer A, Fuchsle M, Reusch TCG, Weber B, Simmons MY. Atomic-Scale, All Epitaxial In-Plane Gated Donor Quantum Dot in Silicon. *Nano Lett.* 2009; **9**: 707-10.

- [44] Cheng TM, Chang CY, Chin A, Huang MF, Huang JH. Two-dimensional arsenic precipitation by In delta doping during low temperature molecular beam epitaxy growth of GaAs or AlGaAs. *Appl. Phys. Lett.* 1994; **64**: 2517-9
- [45] Cho AY, Arthur JR. Molecular Beam Epitaxy. *Prog. Solid State Ch.* 1975; **10**: 157-91.
- [46] Hirai M, Ohnishi H, Fujita K, Vaccaro P, Watanabe T. Diffusion of Si-acceptor in  $\delta$ -doped GaAs grown on GaAs (111) A by molecular beam epitaxy. *J. Cryst. Growth* 1995; **150**: 209-13.
- [47] Gurtovoi VL, Valyaev VV, Shapoval S, Pustovit AN. Electron transport properties of double delta-doped GaAs structures grown by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition. *Appl. Phys. Lett.* 1998; **10**: 1202-4.
- [48] Kao MJ, Hsu WC, Hsu RT, Wu YH, Lin TY, Chang CY. Characteristics of graded-like multiple-delta-doped GaAs field effect transistors. *Appl. Phys. Lett.* 1995; **66**: 2505-6.
- [49] Ozturk E, Sokmen I. Intersubband optical absorption of double Si  $\delta$ -doped GaAs layers. *Superlattice Microst.* 2004; textbf35: 95-104.
- [50] Duque CA, Akimov V, Demediuk R, Belykh V, Tiutiunnyk A, Morales AL, Restrepo RL, Mora-Ramos ME, Fomina O, Tulupenko V. Intersubband linear and nonlinear optical response of the delta-doped SiGe quantum well. *Superlattice Micrist.* 2015; **87**: 125-30.
- [51] Perenzoni M, Paul DJ (Eds.). *Physics and Applications of Terahertz Radiation*. Springer 2014.
- [52] Vigneau F, Mizokuchi R, Zanuz D, Huang X, Tan S, Maurand R, Frolov S, Sammak A, Scappucci G, Lefloch F, De Franceschi S. Germanium Quantum-Well Josephson Field-Effect Transistors and Interferometers. *Nano Lett.* 2019; **19**: 1023-7.

- [53] Canedy C, Bewley W, Merritt C, Kim C, Kim M, Warren M, Jackson E, Nolde J, Affouda C, Aifer E, Vurgaftman I, Meyer J. Resonant-cavity infrared detector with five-quantum-well absorber and 34% external quantum efficiency at  $4\mu\text{m}$ . *Opt. Express*. 2019; **27**: 3771-8.
- [54] Muhammad U, Urooj M, Dong-Guang Z, Dong-Pyo H, Muhammad R, Nazeer M. Enhanced Internal Quantum Efficiency of Bandgap-Engineered Green W-Shaped Quantum Well Light-Emitting Diode. *Appl. Sci*. 2019; **9**: 1-10.
- [55] Cong H, Yang F, Xue C, Yu K, Zhou L, Wang N, Cheng B, Wang Q. Multilayer Graphene-GeSn Quantum Well Heterostructure SWIR Light Source. *Small*. 2018; **14**: 1704414-18.
- [56] Nag BR. Physics of Quantum Well Devices. KLUWER ACADEMIC PUBLISHERS 2000.
- [57] Razeghi M, Esake L, von Klitzing K (Eds). The Wonder Nanotechnology: Quantum Optoelectronic Devices and Applications. SPIE Press 2013.
- [58] Patil PK, Luna E, Matsuda T, Yamada K, Kamiya K, Ishikawa F, Shimomura S. GaAsBi/GaAs multi-quantum well LED grown by molecular beam epitaxy using a two-substrate-temperature technique. *Nanotechnology* 2017; **28**: 105702-7.
- [59] Rojas-Briseño JG, Martínez-Orozco JC, Rodríguez-Vargas I, Mora-Ramos ME, Duque CA. Nonlinear optical properties in an asymmetric double  $\delta$ -doped quantum well with a Schottky barrier: Electric field effects. *Phys. Status Solidi B* 2013; **251**: 415-22.
- [60] Rodríguez-Vargas I, Gaggero-Sager LM, Velasco VR. Thomas-Fermi-Dirac theory of the hole gas of a double  $p$ -type doped GaAs quantum wells. *Surf. Sci*. 2003; **537**: 75-83.
- [61] Rodríguez-Vargas I, Gaggero-Sager LM. Subband structure comparison between  $n$ - and  $p$ -type double delta-doped GaAs quantum wells. *Rev. Mex. Fis.* 2004; **50**: 614-19.

- [62] Carter DJ, Warschkow O, Marks NA, McKenzie DR. Electronic structure of two interacting phosphorus delta-doped layers in silicon. *Phy. Rev. B* 2013; **87**: 045204-11.
- [63] Zheng X, Carns TK, Wang KL, Wu B. Electron mobility enhancement from coupled wells in delta doped GaAs. *Appl. Phys. Lett.* 1993; **62**: 504-6.
- [64] Schubert E. Chapter 1 Delta-Doping of Semiconductors: Electronic, Optical, and Structural Properties of Materials and Devices. *Semiconduct Semiment* 1994; **40**: 1-151.
- [65] Bolívar G. (27-05-2020). *Sulfuro de zinc (ZnS): estructura, propiedades y usos*. lifeder. <https://www.lifeder.com/sulfuro-de-zinc/>
- [66] Rodríguez-Magdaleno KA. Tesis: Propiedades ópticas lineales y no lineales en pozos  $\delta$ -dopados dobles asimétricos tipo  $n$  en GaAs. Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas: 2013.
- [67] Rodríguez-Vargas I. Tesis: Estructura electrónica en pozos delta-dopados dobles. Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos: 2006.
- [68] Oubram O. Tesis: Análisis de las propiedades electrónicas en sistemas de baja dimensión. Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos: 2009.
- [69] Mailto. (27-05-2020). *Physical properties of Gallium Arsenide (GaAs)*. matprop. <http://www.matprop.ru/GaAs>
- [70] Varshni YP. Temperature dependence of the energy gap in semiconductors. *Physica* 1967. **34**, 149-54.
- [71] Chire H. (27-05-2020). *Semiconductores intrínsecos y dopados*. slideshare. <https://es.slideshare.net/HctorChireRamrez/semiconductores-intrinsecos-y-dopados-25767431>

- [72] Bassani F, Parravicini GP. Electronic states and optical transitions in solids. Pergamon Press, New York: 1975.
- [73] Facundo Lautaro Villavicencio. Tesis: Estudio de un modelo teórico para el doblamiento de bandas en un semiconductor. Universidad Nacional de Tucumán 2018.
- [74] Döhler GH. Ultrathin doping layer as a model for 2D systems. *Surf. Sci.* 1978; **73**: 97-105.
- [75] Schubert EF, Fischer, Ploog K. The delta-doped field-effect transistor ( $\delta$ FET). *IEEE T Electron Dev.* 1986; **33**, 625-32
- [76] R. A. Smit. Wave Mechanics of Crystalline Solids. Chapman and Hall Ed. 1969).
- [77] Thomas LH. On the capture of electrons by moving electrified particles. *Proc. Cam. Phil. Soc.* 1927; . **542**: 561-76.
- [78] Fermi E. Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *ZPhys* 1927; **48**: 73-79.
- [79] Gaggero-Sager LM, Mora-Ramos ME, Contreras-Solorio Da. Thomas-Fermi approximation in  $p$ -type  $\delta$ -doped quantum wells of GaAs and Si. *Phys. Rev. B* 1998; **57**:6286-9.
- [80] R. Pérez- Alvarez y F. García-Moliner. Transfer Matrix, Green Functions and related Techniques, Universidad Jaume I (2004).
- [81] Markoš P, Soukoulis CM. Wave propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials. New Jersey: Princeton university press (2008).
- [82] Rodríguez-Vargas I, Gaggero-Sager LM. Thomas-Fermi approximation of double  $n$ -type delta-doped GaAs quantum wells: sub-band and transport calculations. *Microelectron. J.* 2005; **36**, 404-6.

- [83] Ozturk E. Optical intersubband transitions in double Si  $\delta$ -doped GaAs under an applied magnetic field. *Superlattice Microst.* 2009; **46**,752-9.
- [84] D. Ahn, S Chuang. Calculation of Linear and Nonlinear Intersubband Optical Absorptions in a Quantum well with an Applied Electric Field. *IEEE J Quantum Elect.* 1987; **23**, 2196-204.
- [85] Ozturk E. Effect of Magnetic Field on a  $p$ -Type  $\delta$ -Doped GaAs Layer. *Chin. Phys. Lett.* 2010; **27**: 077302-5.
- [86] West L C, Eglash S J. First observation of an extremely large-dipole infrared transition within the conduction band of a GaAs quantum well. *Appl. Phys. Lett.* 1985; **46**: 1156-8.
- [87] Erskine D J, Taylor A J, Tang C L. Femtosecond studies of intraband relaxation in GaAs, AlGaAs, and GaAs/AlGaAs multiple quantum well structures. *Appl. Phys. Lett.* 1984; **45**: 54-6.
- [88] Restrepo R L, Castaño-Vanegas L F, Martínez-Orozco J C. Mid-Infrared linear optical transitions in  $\delta$ -doped AlGaAs/GaAs triple-quantum well. *Appl. Phys. A.* 2019; **125**: 31-5.
- [89] Gillman G, Vinter B, Barbier E, Tardella A. Experimental and theoretical mobility of electrons in  $\delta$ -doped GaAs. *Appl. Phys. Lett.* 1988; **52**, 972-4.
- [90] Gasiorowicz S, Quantum Physics. Hoboken: Wiley International Ed., 2003, ch. 6.
- [91] White RM, Quantum Theory of Magnetism. Berlin: Springer-Verlag, 2007, ch. 2.
- [92] Ballentine LE, Quantum Mechanics: A Modern Development. New Jersey: World Scientific Publishing, 1998, ch. 2.

- [93] Duque-Jiménez CM. Tesis: Quantum disc plus inverse square potential. An analytical model for two-dimensional quantum rings: Study of nonlinear optical properties. Universidad de Antioquía: Medellín 2012.
- [94] Bloembergen N, Nonlinear Optics. New York: Benjamin, 1965, ch. 2.
- [95] Hecht G. Optics. Fifth edition. Pearson ed. 2016.
- [96] Chuang SL. Physics of optoelectronic devices. J Wiley Interscience ed. 1995.
- [97] Guang S. He, Song H. Liu. Advanced Nonlinear Optics. Word Scientific Ed. 2018.
- [98] Grynberg G, Aspect A, Fabre C. Introduction to Quantum Optics. Cambridge University Press Ed 2012.
- [99] Boyd R. Nonlinear Optics: third edition. AP ed. New York 2007.
- [100] Ahn D, Chuang SL. Intersubband optical absorption in a quantum well with an applied electric field. *Phys. Rev. B* 1987; **35**: 4149-51.
- [101] Coon DD, Karunasiri PG. New mode of IR detection using quantum wells. *Appl. Phys. Lett.* 1984; **45**: 649-51
- [102] Kuhn KJ, GU Iyengar, Yee S. Free carrier induced changes in the absorption and refractive index for intersubband optical transitions in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  quantum wells. *J. Appl. Phys.* 1991; **70**: 5010-7.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS



INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS

Coordinación de Programas Educativos

Posgrado en Ciencias



**DR. VICTOR BARBA LÓPEZ  
COORDINADOR DEL POSGRADO EN CIENCIAS  
PRESENTE**

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada "Estructura electrónica de sistemas con pozos cuánticos delta-dopados múltiples" que presenta el alumno Humberto Noverola Gamas (5920160308) para obtener el título de **Doctor en Ciencias**.

Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
Dr. Rolando Pérez Álvarez CInC-UAEM		
Dr. Raúl Salgado García CInC-UAEM		
Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos CInC-UAEM		
Dr. Isaac Rodríguez Vargas LUMAT-UAZ		
Dr. Juan Carlos Martínez Orozco UAF-UAZ		
Dr. Outmane Oubram FCQeI-UAEM		
Dr. Luis Manuel Gaggero Sager CIICAP-UAEM		



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL  
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

### Sello electrónico

**OUTMANE OUBRAM | Fecha:2020-06-10 14:49:10 | Firmante**

K9s7WGL0Y1p6TP56Xxkri7aAA0rnCamjmrU7+U6RgGDWI23QjftgHUqqrl+bsYfM5Az9r/XAwB+20OC7wDpLggk1FC/h0MIAD966AmG4JHHw7SQzvYf6OOVk5JtVky9Q0r9  
ijlr6VHT11yMPpJNEW9u9UBc75qcTjNSXIH1sJBZsDySYzLZ5OfCoGLCoAmdPOyxJVbFxFUMxEIhW3UQ9c3Xflf2IASb9LISdAQ3Tcu338xgnMQANUwmHOEdEX3E2h7/h  
B1QJnnOe/0G96v25euvsU04Y2B2+RKqBWK55FYXLozlpBKVTwiZBYa3aldYDkbpOpFWXdnqOPGA1a91A==

**ROLANDO PEREZ ALVAREZ | Fecha:2020-06-10 14:59:55 | Firmante**

WWmHx2c61V8Jw5s674BMZMjDwHS4IVJtPZN9xbVg7sAogagZfHOf2zS/BzMIhwt7VCGMHXlw9FzjCJBNyIPeX8ws+QffEBR/zNMD2brGrkillzAM0YGNikgrAHFryp+P0/XY  
DHJLnNltvHRWR/hXmFd0SHp/ovQIH2/IAkcl1FjrCym7mkpFmgFfaXMRpFO2b7KQII1SSP11CWQI017cuPTWjgixZv+qfBm+qFN0dXsP+31LSn8T+gMOV9oCPLeZ11rxuBI7h  
sGTGESd5BeC0GyIU8HawiNOe/0ew7uNqzP8nm0kiVgKLn8cR4RKJXeifOuyHimGo6VUDH3yg==

**LUIS MANUEL GAGGERO SAGER | Fecha:2020-06-10 15:26:58 | Firmante**

q8DAXCpjp0ZJLuX6Qh0eCX0ScQTpdNyd69I0i4h5ippV6TCjKn4FZ/zSlxbMuOpjkz8LOpldqilncuTbGKmWtAPKGw7z3c7/P9iX5NZv7cd9FQ32fAeo+wEwQWgUlVqCHwm3  
WDDCEnAGe6QTcWcSd56HdEzkgAdRCgAtYwlg83bAddAzmpmxOCvBwZj1O6/pFAOaTAI14daxTE1MYeHGXdGxK9TBMnDMk2XZ9JJK6u0kRCR22dASr3Vd4eYTMFdw  
cgtZcX1MQkaxFU4fgD6cbE4ZKNl4/RzXGH9BBiC5gaDkhLp+FOM4OGajjg1fjJDI2hSoYk6VTmtkENKZZ+nQ==

**MIGUEL EDUARDO MORA RAMOS | Fecha:2020-06-10 16:05:02 | Firmante**

iizOSaaqshhWqf175O8MjiWgruqeBEwIZTLrQK3bKEQF0vHu6bawuwGugGm2Nvtp7VIOkn77Kp3OFsaLFQCdcbSBRGLO90BLE7n6dF+1Qxydrn2jznsnnotyxbWiqek3UC98  
7yaj2+YuTuBr+nNI4TULNZKLGQ+J9SRP9gzKMJaxzZCb6FgzXeOOgCXuEolalZRLZ+k6iYekGMehWk8kgfqcrcdaY8Z+ZjAWOG/k3NuJ56bCnAZAdrPanDxv+6PUGEgl7f  
GVFP6Hrz5d3MTbT3EvHm+98PIAhPaBpPp4zrC+A78GXNAQMvLSXPAVh75IM36jEUS/eLk3rkKDr49A==

**RAUL SALGADO GARCIA | Fecha:2020-06-10 16:12:29 | Firmante**

xbKkl+vcpJPbGMW802S4M+DqLANIs70ak6gE0Zt2BnapJaP3vjP4UBWN6VhDhnmHum5gbi0TBXCoueKcdh5FAa3txbNVK8CpkJ+8k2o1MlaZdjVylU4tAInfpTfN0r/Fhl+ome  
+l6Vgv7nZrVWO/oCfy079mqFj06D0Q9Re9hPzmqjJt46NhWvG3SV6fj9Cvel9LTirTOPdHb9T59E4zlwBtmoTi2j9sUPruj87hpdYeggX+PqqqnMNvNjTBnOP9VsPkf2hQII6325  
YZzDcZn2DMZz9QzW7zln13JRyQ4OTU3szZ8BQgRI6Dxww4qnjA796+yl8Oj+9taUshNAanA==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o  
escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



8ykW15

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/9aFHAuy1Ddoy5d2kqv74oZNIpolYgDpY>



**DR. VICTOR BARBA LÓPEZ**  
**COORDINADOR DEL POSGRADO EN CIENCIAS**  
**PRESENTE**

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada "Estructura electrónica de sistemas con pozos cuánticos delta-dopados múltiples" que presenta el alumno Humberto Noverola Gamas (5920160308) para obtener el título de Doctor en Ciencias.

Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
Dr. Rolando Pérez Álvarez CInC-UAEM		
Dr. Raúl Salgado García CInC-UAEM		
Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos CInC-UAEM		
Dr. Isaac Rodríguez Vargas LUMAT-UAZ	Aprobado	<i>[Firma]</i>
Dr. Juan Carlos Martínez Orozco UAF-UAZ	Aprobado	<i>[Firma]</i>
Dr. Outmane Oubram FCQel-UAEM		
Dr. Luis Manuel Gaggero Sager CIICAP-UAEM		