



BIBLIOTECA DEL D.I.F.U.S



UNIVERSIDAD DE SONORA

División de Ciencias Exactas y
Naturales

Departamento de Investigación
en Física

*Oscilaciones ópticas polares en
Heteroestructuras*

Tesis

para obtener el título de

Doctor en Ciencias (Física)

Presenta

José Manuel Nieto Jalil

Directores:

Dr Raul Riera Aroche.

Dr Rodrigo A. Rosas Burgos

Mayo del 2008

Hermosillo, Sonora

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

A la memoria de mi padre

No se puede enseñar nada a un hombre;

Sólo se puede ayudarlo a encontrar la respuesta dentro de sí mismo.

Galileo Galilei

Agradecimientos

Hace cinco años me encontraba esperando con ilusión en Cuba un avión que me traería a tierras mexicanas, y con él, el principio de una nueva aventura. Desde entonces, la primera clase, nuevos compañeros de trabajo, el inicio de una nueva línea de investigación, el primer examen, el primer seminario, mi primera cerveza en este país y por supuesto mi primera carne asada, eso sólo era el principio. El inicio de un camino que ha conducido hasta esta tesis, camino que no ha sido llano, pero afortunadamente he encontrado unos magníficos compañeros de viaje, sin su ayuda, no hubiera podido remontar las cuestas que han ido apareciendo. Tantos compañeros y tanto que agradecerles, a todos muchas gracias.

En primer lugar quiero agradecer a Raúl Riera Aroche, que dirigiera esta tesis, el enorme trabajo que ha invertido, la ilusión con la que lo ha hecho y ha sabido transmitir, pero sobre todo quiero agradecer su amistad; trabajar con un amigo, con un hermano, es un lujo que no está al alcance de todos. Yo he tenido esa suerte. Muchísimas gracias Raúl.

Pero aunque parezca mentira mi suerte no se ha acabado aquí, sin mi cotutor Arturo Rosas Burgos y colaborador Fernando Comas este trabajo hubiera sido imposible, como imposible enumerar todos los favores y ayuda que me han ofrecido y todas las conversaciones que han ayudado a configurar esta memoria. También quiero agradecer al resto de miembros del grupo del DIFUS, que han ido pasando a lo largo de este viaje, su ayuda abnegada, José Luis Marín Flores (QEPD) y Germán Campoy Güereña, siempre dispuestos a ayudar y que me guiaron en mis primeros pasos en el tema; a Ricardo Betancourt, que puso orden en el caos, Marcelino Barboza, Rodrigo Meléndrez y Felipe Ramos, su ayuda fue fundamental para

concretar mi formación inicial. Trabajar en este grupo no ha sido trabajar, ha sido disfrutar.

De igual modo quiero hacer extensivo este agradecimiento a todos los miembros del Departamento de Física Teórica de la Universidad de la Habana por haberme enseñado tantas cosas. Gracias a los profesores Rolando Pérez, Carlos Trallero, Fernando Comas, Carlos Rodríguez, José Marín, David Quesada, Melquiades de Dios por estar siempre dispuestos a aclararme múltiples dudas y por darme la oportunidad de compartir aspectos de la vida científica y personal en mis primeros años de investigador.

Quiero recordar especialmente a los estudiantes de maestría y doctorado del departamento, y los buenos momentos que hemos pasado. Gracias Susana, Iván, Carlos, Sandra, César, Lamberto, Rene, colectivo que se va ampliando y con el que da gusto trabajar.

Gracias al personal técnico, casi siempre tan poco valorado, en especial a Sandra, Maricruz y Martha.

Desde hace cinco años he compartido la investigación para la realización de la tesis doctoral con la actividad docente en el Tecnológico de Monterrey Campus Sonora Norte donde trabajo actualmente, quiero agradecer a mis compañeros, Diego, Enrique, Jesus, Javier, Luis, Abraham, y sobre todo a Norma Tapia, su comprensión y apoyo en mi “doble vida” docente-investigadora.

Por último quiero hacer una mención especial a mi familia, mi mamá, mi hija, mi hijo, a ti papá, ellos han aguantado mis broncas con buen carácter y sin ellos no estaría aquí. Y a ti, Saylin, que me has apoyado en tantos y tantos momentos, y con quien tengo la suerte de compartir mi vida, has estado conmigo todos y cada uno de

los días que he dedicado a esta tesis y siempre me has brindado tu apoyo con la mejor de las sonrisas, gracias.

Finalmente quiero agradecer a todas las personas que no he mencionado explícitamente, pero que han estado ahí, serían imposibles de enumerar, así como a los miembros del tribunal de tesis doctoral que han aceptado amablemente juzgar mi trabajo. A todos muchas gracias.

Resumen

Hacia finales de los años sesenta se desarrollaron técnicas de crecimiento cristalino epitaxial que permiten controlar las sucesivas deposiciones de capas atómicas una a una, lo que permite obtener sistemas con un carácter marcadamente cuántico en cuanto a sus propiedades se refiere. Con ello se puede fabricar nuevos materiales compuestos, diseñados a voluntad, cuyas propiedades físicas dependen acusadamente de los parámetros de diseño (naturaleza química de los materiales que se combinan, espesores de las distintas capas de éstos, cuán abruptos resultan la intercaras, etc.). Esto conlleva una fenomenología muy variada y, por tanto, un vasto campo de aplicación tecnológico, ejemplo de ello es el diseño de emisores luminosos de alta potencia, transistores de alta velocidad, amplificadores con bajo nivel de ruido, fotodetectores ultrarrápidos, láseres de alta eficacia y otros dispositivos electrónicos.

El elemento de interés en todo esto está en la disponibilidad de diseñar a la heteroestructura con el propósito de obtener ciertas propiedades que no pueden alcanzarse a partir de homoeestructuras. Un ejemplo de esta situación es el láser semiconductor basado en una heteroestructura doble, con la cual se consigue aumentar tanto el confinamiento de los portadores como el de la onda luminosa. La nueva nanoelectrónica, que está cambiando el mundo sale de ahí. Este ejemplo, típico del progreso en ciencia y tecnología de semiconductores, ilustra lo que es frecuentemente el proceso de constante expansión del conocimiento en el que la ciencia básica y los desarrollos tecnológicos se retroalimentan en una mutua relación más interesante y compleja de lo que a veces se piensa. Un desarrollo del tipo técnico permite grandes avances en conocimientos básicos y en el descubrimiento de nuevos fenómenos y éstos a su vez abren nuevas posibilidades de aplicaciones prácticas. En el caso de la nueva nanoelectrónica este panorama es sumamente fascinante.

En la física del estado sólido un aspecto muy importante es el estudio de los fonones; específicamente los fonones ópticos. Para el caso del estudio de los fonones en superredes (SL) y pozos cuánticos (QW), generalmente se recurre al modelo microscópico continuo, en el límite de longitud de onda larga para las oscilaciones.

Con este enfoque se dedujo un Hamiltoniano de interacción de electrón-fonón que constituye el elemento básico para calcular muchas propiedades físicas de estos sistemas. El cálculo numérico microscópico, basado o no en primeros principios, demostró que los modos ópticos de oscilación en este tipo de estructura pueden diferenciarse. Por ejemplo, en las SL se identifican fonones confinados en uno de los materiales constituyentes y fonones localizados en las intercaras.

Al mismo tiempo, en la literatura han aparecido muchos trabajos en los que se proponen diversos enfoques macroscópicos para describir los modos de oscilación correspondientes a las ramas ópticas así como la interacción de los mismos con los electrones. De todos estos enfoques Trallero-Giner, Pérez-Alvarez, Comas y colaboradores han desarrollado una teoría fenomenológica de longitud de onda larga para los fonones ópticos polares en las heteroestructuras que salva las controversias existentes en los modelos anteriores, centrada en las condiciones de contorno mecánicas y electrostáticas para el empalme de las soluciones en las intercaras.

Por otra parte, deseamos mencionar que en los últimos tiempos también se han publicado trabajos sobre los modos fonónicos ópticos en estructuras cuasi-unidimensionales del tipo alambre cuántico (Quantum Wire). El modelo macroscópico continuo unificado, que ya mencionamos en el párrafo anterior, ha sido aplicado a estructuras tales como el alambre cuántico de geometría cilíndrica y a la gota cuántica (Quantum Dots).

En los últimos años ha cobrado gran interés teórico, experimental y aplicado el estudio de los modos de oscilación de la red cristalina en sistemas de baja dimensionalidades a semiconductores del tipo Pozo Cuántico y Superred. El énfasis ha estado en los sistemas elaborado a base de materiales III-V (GaAs, AlAs, etc.). Más recientemente han cobrado importancia los sistemas construidos en base a materiales II-VI (CdTe, ZnTe, etc.). Es importante señalar que los materiales no polares tales como el Germanio (Ge) y el Silicio (Si) siguen siendo de gran interés.

En la presente tesis nos proponemos estudiar las relaciones de dispersión de los fonones ópticos en pozos cuánticos sin tensionar y tensionados de materiales polares y no polares utilizando el modelo fenomenológico de ondas desarrollado por Trallero-Giner, Pérez-Alvarez, Comas teniendo en cuenta el empalme completo, el cual nos permitirá calcular los modos de fonones ópticos en los materiales propuesto en la tesis.

En el capítulo 1 se da una breve descripción de los aspectos más sobresalientes que dieron origen a la creación del modelo fenomenológico desarrollado por Trallero-Giner, Pérez-Alvarez, Comas.

El capítulo 2 contiene el modelo fenomenológico de ondas largas desarrollado por Trallero-Giner y colaboradores y resultados obtenidos por nosotros en el cálculo de los modos fonónicos en sistemas no tensionados en pozos cuánticos de materiales II-VI, usando las relaciones de dispersión obtenidas y discutidas por ellos.

El capítulo 3 incluye una introducción acerca de algunas características de los fonones en los materiales II-VI, así como los parámetros más importantes utilizados a lo largo de la tesis. En esta parte se presentan de igual forma cálculos propios basados en el modelo propuesto de empalme completo para materiales polares. De igual importancia es la presentación de los resultados del cálculo de los modos fonónicos

en los sistemas tensionados usando las mismas relaciones de dispersión obtenidas, pero para este caso teniendo en cuenta el corrimiento de las frecuencias ω_L y ω_T en el masivo producto del tensionamiento. Precisamente, la obtención de estos resultados, es decir, modos fononónicos en sistemas tensionados y sin tensionar, constituye uno de los objetivos más importante de esta tesis y por tanto el núcleo de la misma.

El capítulo 4 incluye algunas características del Germanio y Silicio y se presentan cálculos propios para el caso del modelo fenomenológico propuesto por nosotros para materiales no polares. Este modelo puede ser considerado como un caso particular del modelo fenomenológico propuesto por nosotros en el capítulo anterior para el caso de materiales polares.

Finalmente presentamos las conclusiones de la presente tesis.

Contenido

Agradecimientos	IV
Resumen	VII
Capítulo 1 Introducción	1
1.1 Ecuación de movimiento y los modos propios de fonones ópticos.	5
1.2 Modelo Hidrodinámico.	8
1.3 Modelo continuo con constantes ad hoc.	9
1.4 Aplicaciones del modelo DC en las heteroestructuras.	9
1.5 Modelo DC: tensiones y aleaciones.	11
1.6 Tensión en el modelo DC: modelo hidrodinámico o fenomenológico.	12
1.7 Fonones ópticos en las aleaciones: modelo MREI.	17
1.8 Teoría de la función envolvente de Akera y Ando.	23
1.9 Teoría de la Función Envolvente de Foreman.	24
1.10 Métodos Ab Initio.	25
Capítulo 2 Modelo fenomenológico de ondas largas.	26
2.1 Ecuación de movimiento.	26
2.2 Condiciones de empalme de las intercaras.	31
2.3 Modelo con interfaces rígidas.	33
2.4 Pozo cuántico de CdTe no tensionado.	40
2.5 Pozo cuántico de ZnTe no tensionado.	43
2.6 Pozo cuántico de ZnSe no tensionado.	46
Capítulo 3 Modelo fenomenológico de onda largas para materiales polares.	49
3.1 Generalidades. Materiales II-VI.	49
3.2 Parámetros del masivo y empalme completo.	59
3.3 Efecto de la tensión en las relaciones de dispersión de los fonones ópticos.	67

3.4 Espesor crítico.	68
3.5 Deformaciones en superredes y pozos cuánticos tensados.	70
3.6 Efecto de la deformación sobre la estructura de bandas.	73
3.7 Efecto de la tensión en el cambio de la frecuencia de los fonones.	74
Capítulo 4 Modelo fenomenológico de ondas largas para materiales no polares.	84
4.1 Germanio.	84
4.2 Silicio.	85
4.3 Ecuación fundamental.	87
4.4 Solución de la ecuación diferencial para materiales no polares.	89
4.5 Relaciones de dispersión de pozos Ge/Si/Ge.	95
Conclusiones y Perspectivas.	99
Bibliografía.	101

Capítulo 1

Introducción

En estos primeros años del siglo XXI y con el fin del XX, siglo que aún sentimos tan cercano que nos cuesta reconocerlo como pasado, no es mal momento para la reflexión. En este mundo globalizado se hace necesario saber de dónde venimos, dónde estamos y a dónde queremos ir.

Me pregunto: ¿Una reflexión como ésta estaría de más en una tesis científica? Pues creo que no, pues uno de los principales motivos de los cambios, de la forma y del camino del futuro actual se debe, sin lugar a dudas, a la revolución científica y tecnológica del siglo XIX y sobretodo del XX. Pese a que en las llanuras africanas homínidos anteriores al Homo Sapiens ya conocían la tecnología del fuego, no fue hasta miles de años después que la ciencia logró explicar ese fenómeno.

A partir de la revolución industrial, la necesidad de una nueva y más potente tecnología, así como la existencia de una base científica cada vez más sólida hicieron que los papeles de la ciencia y de la tecnología se invirtieran. Así, la tecnología actual requiere de la ciencia aplicada para su avance, pero también requiere de la ciencia básica, ya que la ciencia básica de hoy será la base de la tecnología del mañana.

Nuestro México ha tardado en subirse al carro de este proceso, con una revolución industrial prácticamente inexistente. Afortunadamente el desarrollo económico ha permitido un mayor acceso a la universidad y ha demostrado en los primeros años, que la escasa producción científica de nuestro país comparada con la de los Estados Unidos de América, tenía su origen en los obsoletos planteamientos económicos y sociales, además de una inadecuada política científica, y no en la falta

de una alta capacidad del personal investigador. Cada vez son más los investigadores mexicanos reconocidos internacionalmente y los grupos de investigación que trabajan mano a mano con grupos punteros de todo el mundo. Pero con mucha más frecuencia de la deseable, gran parte de este trabajo se realiza en el extranjero. La ciencia de vanguardia requiere, cada vez más, de costosos equipos para no detener su avance, equipos que eran de difícil acceso en nuestro país. Pero, más lentamente de lo que desearíamos, estas carencias se van parcialmente subsanando, y creo que se debería apostar sin miedo por la ciencia hecha desde aquí. Esto plantea, sin dudas, un costo económico que yo no sabría valorar, pero también unos beneficios que sí me son mucho más imaginables. El desarrollo de tecnologías y ciencia propia producirá un doble beneficio económico, el propio de su rentabilización y el correspondiente al ahorro en tecnología foránea, además de un mayor grado de formación del personal investigador, siempre recomendable en este mundo cada vez más globalizado, y cabe esperar un beneficio social intrínseco a los avances tecnológicos y científicos.

Este panorama general sigue siendo aplicable, en grandes líneas, cuando nos abrimos camino entre las ramas del árbol de la ciencia, y en concreto, desde el punto de vista del trabajo científico que supone esta tesis, cuando encontramos la rama de los fonones ópticos y particularmente en el estudio de los modelos fenomenológicos para describir el comportamiento de los mismos en heteroestructuras semiconductoras, rama que centrará nuestro interés de ahora en adelante.

Las heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad han sido objeto de estudio y desarrollo durante las últimas décadas.

El éxito conseguido con las estructuras bidimensionales como pozos cuánticos (quantum wells: QWs) y superredes (superlattices), ha servido de estímulo para deducir la dimensionalidad de los sistemas semiconductores. Desde entonces, sistemas monodimensionales, hilos cuánticos (quantum wires: QWIs), y sistemas de

dimensión cero, puntos cuánticos (quantum dots: QDs) están siendo producidos a nivel de laboratorio.

Los modos ópticos en semiconductores polares juegan un papel importante en muchas propiedades físicas debido a que la interacción electrón-fonón afecta a diversos mecanismos de dispersión (*scattering*). La movilidad de portadores de carga, los tiempos de relajación de los electrones, las transiciones intra- e inter-bandas, y los tiempos de vida de los excitones son algunas de las características que están afectadas por el scattering de electrones debido a los fonones ópticos. Aunque existan modelos microscópicos bien establecidos como *ab-initio* o pseudo-potencial, los estudios teóricos de mecanismos de scattering por fonones recurren al tratamiento continuo de la vibración de la red. La razón de recurrir a un tratamiento continuo estriba en la necesidad de reducir la complejidad del problema que conlleva el tratamiento microscópico.

La mayoría de los materiales semiconductores empleados en las heteroestructuras de baja dimensionalidad, tales como pozos, hilos y puntos cuánticos son altamente polares. Por tanto, en estas estructuras existe una carga local que provoca una fuerte interacción coulombiana con la red. La presencia del electrón en el campo iónico del cristal polariza este último y la polarización actúa sobre el electrón, modificando así sus propiedades. La densidad de polarización generada por las vibraciones da lugar a un campo eléctrico \mathbf{E} y a un campo de desplazamiento eléctrico \mathbf{D} . Estas cantidades están relacionadas entre sí a través de las ecuaciones de Maxwell.

Una gran variedad de propiedades físicas de los sólidos depende de la dinámica de las redes cristalinas. Esto es extensivo a heteroestructuras semiconductoras, para las que ha habido un creciente interés en el estudio de sus propiedades vibracionales. Técnicas espectroscópicas, como la dispersión Raman,

permiten caracterizar el espectro fonónico con gran precisión y brindar información de la calidad de las interacciones [1]. Aspectos novedosos como el análisis mediante imágenes de fonones (phonon imaging) [2,3] o la reducción de la conductividad térmica en superredes respecto a la del volumétrico [4-9] demandan, además, del conocimiento de la forma en que los modos se propagan a través de las estructuras.

Estos avances promueven el estudio teórico de los modos de oscilación. Se necesitan modelos de cálculo, suficientemente simples y versátiles, que ofrezcan buenos resultados al comparar con datos experimentales tanto en materiales polares como no polares. Los primeros modelos microscópicos empleados para estudiar heteroestructuras fueron las cadenas lineales con interacción a pocos vecinos [10-12]. Estos se han ido desarrollando hasta llegar a métodos más elaborados como el modelo planar de carga de enlace (*planar bond charge model*) [13] y aquellos que toman las constantes de fuerza de cálculos de primeros principios [14,15]. En direcciones de alta simetría, como la [001] o la [111], las cadenas lineales constituyen resultados bastante exactos que se derivan analíticamente del problema tridimensional [16]. Para direcciones de menor simetría no existen, hasta donde abarca nuestro conocimiento, métodos tan simples. Es necesario emplear entonces modelos fenomenológicos en términos de parámetros ajustables tales como el modelo del ión rígido (*rigid-ion model*) [17,18], el modelo de corteza (*shell model*) [19,20] y el modelo de carga de enlace (*bond-charge model*) [21,22].

Habitualmente, en el estudio del fonón, el sistema investigado es considerado continuo, así como el campo de polarización inducido por el movimiento de los iones. Uno de los modelos más destacados es el propuesto por Born y Huang [18] y denominado modelo de dieléctrico continuo (DC). A lo largo de muchos años, este modelo ha dado lugar al establecimiento de los Hamiltonianos de interacción electrón-fonón mediante la cuantización de los campos de polarización y de

- La ecuación de Newton que describe el movimiento de los iones bajo la influencia de la fuerza mecánica del oscilador y la fuerza eléctrica, fruto de la polarización del medio.
- La relación entre la polarización, el campo de desplazamiento iónico y el campo eléctrico. Para las vibraciones ópticas, estas ecuaciones se escriben como:

$$\ddot{\mathbf{u}} = -\omega_{TO}^2 \mathbf{u} + \sqrt{\rho \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)} \omega_{TO} \mathbf{E} \quad (1.1)$$

$$\mathbf{P} = \sqrt{\rho \left(\frac{\epsilon_0 - \epsilon_\infty}{4\pi} \right)} \omega_{TO} \mathbf{u} + \left(\frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi} \right) \mathbf{E} \quad (1.2)$$

Aquí ω_{TO} es la frecuencia transversal del material volumétrico (*bulk material*), ρ es la masa reducida por unidad de volumen, mientras ϵ_0 y ϵ_∞ son, las constantes dieléctricas a baja y alta frecuencias respectivamente. En ausencia de carga libre, es sabido que:

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \quad \text{y teniendo en cuenta que:}$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P} = \epsilon(\omega)\mathbf{E} \quad \text{y que}$$

$$\mathbf{E} = -\nabla\Phi, \quad \text{se obtiene:}$$

$$\epsilon(\omega)\nabla^2\Phi = 0 \quad (1.3)$$

donde Φ es el potencial electrostático. La relación de dispersión de la constante dieléctrica viene definida por:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \left(\frac{\omega_{LO}^2 - \omega^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2} \right) \quad (1.4)$$

mientras que las frecuencias LO y TO están acopladas a través de la relación de Lyddane-Sachs-Teller [23]

$$\omega_{LO}^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_{\infty}} \omega_{TO}^2 \quad (1.5)$$

La ecuación (1.3) ofrece dos posibilidades:

- O bien $\epsilon(\omega) = 0$ y $\nabla^2 \Phi \neq 0$
- O $\epsilon(\omega) \neq 0$ y $\nabla^2 \Phi = 0$.

De (1.4) se deduce que si $\epsilon(\omega) = 0$, $\omega = \omega_{LO}$, que corresponde a la componente longitudinal del fonón óptico en el material volumétrico.

En el caso de que $\epsilon(\omega) \neq 0$, la solución de la ecuación de Laplace junto con las condiciones de contorno permite hallar los modos fonónicos en la superficie. Es este último caso el que permite obtener el efecto de geometría en los fonones ópticos, ya que la solución de la ecuación de Laplace adopta otra forma de acuerdo con el sistema de coordenadas utilizado.

La solución de la ecuación (1.3) proporciona un potencial electrostático a partir del cual se deduce la interacción entre los electrones y fonones a través del llamado "*Hamiltoniano de Fröhlich*".

Este tratamiento permite describir bien los modos electrostáticos similares a los que Fuchs y Kliewer obtuvieron para una capa de material dieléctrico [24]. Los modos mecánicos L y T están degenerados y no son dispersivos. Al emplear sólo condiciones de frontera electrostáticas las soluciones presentan una simetría diferente de la que se comprueba experimentalmente.

1.2 Modelo Hidrodinámico

Babiker [25] generalizó el modelo de Born y Huang para los fonones ópticos [18] para incluir la dispersión espacial. Él postuló que el desplazamiento relativo de los iones \mathbf{u} está acoplado con el campo eléctrico \mathbf{E} y la polarización \mathbf{P} mediante las ecuaciones:

$$\ddot{\mathbf{u}} = -\omega_{\text{TO}}^2 \mathbf{u} + \sqrt{\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)}{4\pi}} \omega_{\text{TO}}^2 \mathbf{E} - \beta_a^2 \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \beta_b^2 \nabla^2 \mathbf{u} \quad (1.6)$$

$$\mathbf{P} = \sqrt{\frac{(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)}{4\pi}} \omega_{\text{TO}}^2 \mathbf{u} + \sqrt{\frac{(\epsilon_\infty - 1)}{4\pi}} \mathbf{E} \quad (1.7)$$

los términos donde aparecen β_a^2 y β_b^2 tienen en cuenta la dispersión espacial. Además se incluyen las ecuaciones de Maxwell. Su limitación fue suponer condiciones de frontera hidrodinámicas (continuidad de la componente normal de la velocidad y de la presión), donde los modos longitudinales (L) y transversales (T) están desacoplados, ignorando la continuidad electrostática.

1.3 Modelo Continuo con Constantes *ad hoc*

Huang y Zhu [26] desarrollaron un modelo microscópico sencillo y lo compararon con el modelo dieléctrico. Para corregir los errores del modelo dieléctrico en la predicción de la simetría correcta de los modos introdujeron términos *ad hoc* de forma que los resultados coincidieran con su modelo microscópico y reportes experimentales. Este tratamiento falla cuando se calculan diversas propiedades físicas (vea [27] para una discusión más extensa).

1.4 Aplicación del modelo DC en las heteroestructuras

Las heteroestructuras semiconductoras son sistemas formados por dos materiales volumétricos polares con constantes dieléctricas distintas. Aunque las heteroestructuras son sistemas en los cuales los portadores de carga se encuentran confinados en una región de dimensiones pequeñas en comparación con los tamaños de los materiales volumétricos, hay motivos suficientes para que el tratamiento de sus modos fonónicos se parezca al de material bulk en primera aproximación. Pese a la necesidad de un modelo microscópico que determine los modos de fonón en estructuras de baja dimensionalidad, un tratamiento macroscópico como es el modelo DC da cuenta en buena medida de los fonones tanto confinados como de los de superficie (o de intercara) en las heteroestructuras. El tratamiento macroscópico es válido, siempre y cuando las longitudes de onda de los fonones sean mayores que los parámetros de red. Debido a la peculiaridad de los modos de superficie en los pozos, hilos y puntos cuánticos frente a los modos confinados, es necesario que las anchuras de los pozos de potencial sean también superiores a los parámetros de red. Las

condiciones de contorno electrostáticas, que son la continuidad del potencial electrostático en la intercara que separa los materiales constituyentes y la continuidad de la componente normal del vector desplazamiento eléctrico \mathbf{D} . Si representamos por material 1 el que está confinado y por material 2, el que sirve de barrera, las condiciones anteriores se traducen en:

$$\Phi_1 = \Phi_2, \quad \varepsilon_1(\omega)\nabla\Phi_1 = \varepsilon_2(\omega)\nabla\Phi_2. \quad (1.8)$$

Cabe resaltar que en el caso de que uno o ambos semiconductores sean absorbentes, la función dieléctrica incluirá una parte imaginaria, así se tendrá

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{\infty,i} \left(\frac{\omega_{LO,i}^2 - \omega^2}{\omega_{TO,i}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma} \right), \quad i = 1,2 \quad (1.9)$$

donde Γ representa el “damping” del fonón.

1.5 Modelo DC: tensiones y aleaciones

El modelo aquí descrito se aplica con éxito al sistema diatómico bien conocido como cadena diatómica lineal. Sin embargo, los experimentos de crecimiento de heteroestructuras seguidos de la caracterización de las mismas han revelado que los componentes (por ejemplo GaAs, AlAs, InAs) que entran en la fabricación de heteroestructuras pueden mezclarse en una cierta proporción y formar un *arreglo* de átomos, dando así lugar a un cristal mixto o aleación ternaria. En la

aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ por ejemplo, la constante de la red varía linealmente con la concentración de Al, y su valor está comprendido entre los valores de GaAs y AlAs.

Para tener en cuenta la composición, se suelen usar unas relaciones empíricas que describen la variación de las frecuencias ópticas, constantes dieléctricas y masas efectivas en función de la composición [29,30]. Pero estas relaciones no están a menudo definidas para todos los materiales que componen las heteroestructuras. Además, para las heteroestructuras cuyas especies constituyentes tienen un desajuste apreciable en el parámetro de red, las tensiones juegan un papel importante [31]. Estas tensiones pueden modificar los modos de vibración en la medida que afectan tanto a los parámetros de red como a las constantes de fuerza entre los iones de los compuestos. Como se puede notar, el modelo clásico de dieléctrico continuo no tiene en cuenta estos dos efectos de forma explícita. En las siguientes secciones, explicaremos los dos modelos más empleados para describir los modos de vibración en las aleaciones y en los sistemas tensados.

1.6 Tensión en el modelo DC: modelo hidrodinámico o fenomenológico

Una forma de tener en cuenta las tensiones en el cálculo de los modos de vibración consiste en incorporar en el modelo de Born y Huang [18] los términos adicionales que representan estas tensiones. Einderlein [28] ha desarrollado un modelo que describe las distintas variaciones del campo de desplazamiento en un cristal diatómico.

Si designamos por $\mathbf{u} = \mathbf{u}_+ - \mathbf{u}_-$ el campo de desplazamiento relativo, donde \mathbf{u}_+ (\mathbf{u}_-) se refiere al ion positivo (negativo), nos encontramos con las siguientes situaciones:

- Si \mathbf{u} se anula en un punto \mathbf{x}' de la red, esto no significa necesariamente que ambos \mathbf{u}_+ y \mathbf{u}_- sean nulos en el mismo punto \mathbf{x}' .
- Si \mathbf{u} es función de la posición en la red ($\mathbf{u}(\mathbf{x})$), puede ser que \mathbf{u}_+ ó \mathbf{u}_- varíe con la posición, o que los dos varíen a la vez. El cambio de los campos atómicos ($\mathbf{u}_+, \mathbf{u}_-$) con la posición hace que las subredes atómicas sufran tensiones. Estas tensiones pueden ser diferentes en las dos subredes, de forma que una de ellas esté estirada y la otra comprimida. Esta situación se da para los fonones LO con vector de onda no nulo.
- Si \mathbf{u} no cambia con la posición, pero los campos atómicos \mathbf{u}_+ y \mathbf{u}_- cambian, se generan también tensiones internas en las subredes. Esta situación se da para los fonones acústicos longitudinales.

La mejor forma de expresar los efectos de tensiones en los modos de vibración consiste en introducir en la ecuación de movimiento (1.1), además de la fuerza eléctrica, la fuerza mecánica a través de un tensor de tensiones (stress) τ . De esta manera, la ecuación modificada de Born-Huang se escribe como [32]

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = -\rho \omega_{\text{TO}}^2 u - \alpha \nabla \Phi - \nabla \cdot \sigma \quad (1.10)$$

donde los elementos del tensor τ vienen definidos por:

$$\tau_{ij} = \rho (\beta_{\text{LO}}^2 - \beta_{\text{TO}}^2) (\nabla \cdot \mathbf{u}) \delta_{ij} - 2\rho \beta_{\text{TO}}^2 u_{ij} \quad (1.11)$$

donde ρ representa la masa reducida por unidad de volumen de la celda, mientras α es la constante de acoplamiento entre el campo eléctrico y el desplazamiento atómico y se expresa por:

$$\alpha = \sqrt{\frac{\rho(\epsilon_0 - \epsilon_\infty)}{4\pi}} \omega_{\text{TO}}^2 \quad (1.12)$$

En la ecuación (1.11), el término u_{ij} puede considerarse como un tensor de deformación (*strain*) definido por la expresión:

$$u_{ij} = \frac{1}{2} (\nabla_j u_i + \nabla_i u_j) \quad (1.13)$$

Los parámetros fenomenológicos β_{TO} y β_{LO} se obtienen ajustando las relaciones de dispersión para los fonones del material del bulk y sus valores son próximos a las velocidades del sonido en el medio.

τ contiene todas las propiedades del tensor de rigidez (*"stiffness"*) para un medio isótropo. Es sabido que la componente transversal del desplazamiento del fonón óptico conduce a un campo eléctrico nulo ($\nabla \cdot \mathbf{u}_{\text{TO}} = 0$), mientras la componente longitudinal da lugar a un campo eléctrico diferente de cero ($\nabla \times \mathbf{u}_{\text{LO}} = 0$).

De la resolución del sistema de ecuaciones formado por la ecuación (1.10) y la ecuación de campo de polarización (1.2), se deducen los modos de vibración. Para la resolución de la ecuación (1.10) se requiere que se cumplan los criterios de continuidad del campo de desplazamiento en todo el sistema estudiado. De tal forma

que, si consideramos dos regiones del espacio con materiales 1 y 2, las condiciones de contorno a cumplir serán:

$$\mathbf{u}|_{s_-} = \mathbf{u}|_{s_+} \quad (1.14a)$$

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}|_{s_-} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}|_{s_+} \quad (1.14b)$$

$$\mathbf{D} \cdot \mathbf{n}|_{s_-} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{n}|_{s_+} \quad (1.14c)$$

donde S es la superficie de contacto entre los dos materiales y \mathbf{n} un vector unitario normal a la superficie. En caso de oscilaciones libres, cuando el material está rodeado de vacío, las condiciones de contorno anteriores se convierten en:

$$\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{n}|_{s_-} = 0 \quad (1.15a)$$

$$\mathbf{D}_N \text{ es continuo en la superficie} \quad (1.15b)$$

Debido a la introducción en la ecuación de movimiento de términos mecánicos a través de tensores de rigidez y de deformación, el modelo hidrodinámico predice tanto los modos ópticos (confinados y de intercara) como los modos mecánicos (acústicos). Esto condujo a Trallero-Giner y colaboradores [33] a predecir el acoplamiento entre los modos ópticos confinados y los de intercara.

Ellos consideraron ambos efectos, electrostáticos y mecánicos, acoplados entre sí de una forma natural. Para lograrlo postularon la siguiente densidad Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\rho \left| \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} \right|^2 - \frac{1}{2}\rho \omega_T^2 |\mathbf{u}|^2 - \alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \phi + \frac{\epsilon_\infty |\nabla \phi|^2}{8\pi} - \frac{\tau_{ij} \mathbf{u}_{ji}^* + \tau_{ji}^* \mathbf{u}_{ij}}{4} \quad (1.16)$$

\mathbf{u} representa el desplazamiento relativo de los dos iones involucrados. Otros parámetros físicos del medio son $\rho = \mu / v_c$, la densidad de masa reducida, donde μ , es la masa reducida de los iones y v_c el volumen de la celda unidad; ω_L y ω_T son las frecuencias longitudinal y transversal del material volumétrico respectivamente.

El primer término es la densidad de energía cinética, el segundo representa un acoplamiento del campo \mathbf{u} consigo mismo, el tercer término describe el acoplamiento de las oscilaciones mecánicas con el campo eléctrico y el cuarto término es la energía del campo eléctrico en el medio. Respecto al parámetro α nos referiremos como la constante de acoplamiento entre las oscilaciones mecánicas y el campo eléctrico. El último término incorpora las tensiones internas del medio y provoca el carácter dispersivo de las oscilaciones. Posteriormente daremos más detalles del mismo. Las condiciones de fronteras mecánicas y electrostáticas las obtuvieron del sistema de ecuaciones diferenciales [33].

Aunque el modelo DC se presta al cálculo en los sistemas macroscópicos, Born y Huang han demostrado que este formalismo puede extenderse a los desplazamientos atómicos en cristales polares, como son los semiconductores III-V o II-VI, con la salvedad de que el campo eléctrico macroscópico es sustituido por el campo local, fruto del movimiento de los iones respecto a sus posiciones de equilibrio. Este campo local viene definido a través de la relación de Lorentz:

$$\mathbf{E}_{loc} = \mathbf{E} + 4\pi\mathbf{P}/3 \quad (1.17)$$

para los fonones ópticos longitudinales (LO), se tiene que:

$$\mathbf{E}_{\text{loc}} = -8\pi\mathbf{P} / 3 \quad (1.18)$$

mientras para los fonones ópticos transversales (TO):

$$\mathbf{E}_{\text{loc}} = 4\pi\mathbf{P} / 3 \quad (1.19)$$

En los estudios de los modos de vibración en las aleaciones, por ejemplo, es costumbre utilizar las magnitudes locales, como campo eléctrico local, en lugar de las magnitudes macroscópicas. La ventaja de ese uso viene de la facilidad de relacionar estas magnitudes con los parámetros microscópicos, como por ejemplo la polarizabilidad electrónica, en los Hamiltonianos de interacción electrón-fonón.

1.7 Fonones ópticos en las aleaciones: modelo MREI

Las aleaciones ternarias pueden compararse a sistemas con defectos cuyos modos local y gap inducidos por una impureza en proporción todavía pequeña, provoca un ensanchamiento de estos modos en bandas vibracionales al aumentar la concentración. De los muchos métodos empleados para estudiar los modos ópticos en las aleaciones, presentamos el modelo de Chen y colaboradores [34], luego modificado por Chang y Mitra [35], llamado MREI (*Modified Random Element Isodisplacement*). En este modelo, una aleación $AB_{1-x}C_x$ es considerada bajo dos hipótesis:

- Iso-desplazamiento: los cationes y aniones de especies similares vibran como unidades rígidas, con la misma fase y amplitud.
- Aleatoriedad: los iones B y C están aleatoriamente distribuidos a lo largo de la sub-red aniónica. Así, cada átomo está sujeto a las fuerzas creadas por una

media estadística de sus vecinos. En este modelo, una fracción $(1-x)$ de iones B y una fracción x de iones C están considerados como primeros vecinos de los iones A . De este modo, la interacción coulombiana a largo alcance viene dada a través del campo local. Así, el MREI depende de la simetría del cristal, puesto que hay que tener en cuenta el número de primeros vecinos. La ventaja de este modelo estriba en que no requiere a priori las frecuencias de los modos locales y gap, y además depende de algunas constantes físicas como: masas de los iones y frecuencias de los fonones de los *end-materials*¹. A continuación, desarrollaremos este modelo para los cristales con simetría cúbica, pues muchas de las heteroestructuras estudiadas poseen esta simetría.

En MREI, las ecuaciones de movimiento de los iones A , B y C en el cristal $AB_{1-x}C_x$ se expresan como:

$$m_A \ddot{\mathbf{u}}_A = -(1-x)\Lambda_{AB}(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B) - x\Lambda_{AC}(\mathbf{u}_A - \mathbf{u}_C) + e_A \mathbf{E}_{loc} \quad (1.20a)$$

$$m_B \ddot{\mathbf{u}}_B = -\Lambda_{AB}(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_A) - x\Lambda_{BC}(\mathbf{u}_B - \mathbf{u}_C) - e_B \mathbf{E}_{loc} \quad (1.20b)$$

$$m_C \ddot{\mathbf{u}}_C = -\Lambda_{AC}(\mathbf{u}_C - \mathbf{u}_A) - (1-x)\Lambda_{BC}(\mathbf{u}_C - \mathbf{u}_B) - e_C \mathbf{E}_{loc} \quad (1.20c)$$

donde m_A, m_B, m_C , son las masas de A, B, C ; $\mathbf{u}_A, \mathbf{u}_B, \mathbf{u}_C$ representan los vectores desplazamientos y $\Lambda_{AB}, \Lambda_{BC}, \Lambda_{AC}$ son las constantes de fuerza interatómica entre los primeros vecinos. Designando por e_A, e_B y e_C , las cargas de los distintos elementos constituyentes de la aleación, la condición de neutralidad del cristal exige que:

¹ En una aleación ternaria $AB_{1-x}C_x$, se denominan *end-materials* (materiales extremos) a los compuestos binarios con $x = 0(AB)$ y $x = 1(AC)$.

$$e_A - (1-x)e_B - xe_C = 0 \quad (1.21)$$

donde las dos cargas efectivas e_B y e_C , se consideran como parámetros ajustables. Con motivo de conectar el modelo MREI con las propiedades de transporte u ópticas, se debe encontrar las expresiones del campo de polarización y aplicar el formalismo de Born-Huang para hallar el Hamiltoniano de Fröhlich correspondiente.

Para los fonones ópticos transversales de longitud de onda grande, se puede utilizar la aproximación $\mathbf{E} \approx 0$. Entonces, el campo de polarización viene dado por:

$$\mathbf{P} = N[e_A \mathbf{u}_A - (1-x)e_B \mathbf{u}_B - xe_C \mathbf{u}_C] + N\alpha \mathbf{E}_{loc} \quad (1.22)$$

donde N es la densidad de pares de iones. La polarizabilidad electrónica α está relacionada con la constante dieléctrica a alta frecuencia a través de la fórmula de Clausius-Mossoti [23]

$$\frac{4\pi}{3} N\alpha = \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2} \quad (1.23)$$

Realizando el cambio de variables $\mathbf{w}_1 = \mathbf{u}_A - \mathbf{u}_B$ y $\mathbf{w}_2 = \mathbf{u}_A - \mathbf{u}_C$ y utilizando la ecuación (1.23), se puede combinar las ecuaciones MREI (1.20a)-(1.20c) en un sistema de dos ecuaciones:

$$\ddot{\mathbf{w}}_1 = \left[-(1-x) \frac{\Lambda_{AB}}{m_A} - \frac{\Lambda_{AB}}{m_B} - x \frac{\Lambda_{AC}}{m_B} \right] \mathbf{w}_1 - \left(x \frac{\Lambda_{AC}}{m_A} - x \frac{\Lambda_{BC}}{m_B} \right) \mathbf{w}_2 \quad (1.24a)$$

$$\ddot{\mathbf{w}}_2 = \left[-x \frac{\Lambda_{AC}}{m_A} - \frac{\Lambda_{AC}}{m_C} - (1-x) \frac{\Lambda_{BC}}{m_C} \right] \mathbf{w}_2 - (1-x) \left(\frac{\Lambda_{AB}}{m_A} - \frac{\Lambda_{BC}}{m_C} \right) \mathbf{w}_1 \quad (1.24b)$$

siendo:

$$\Lambda_{AB} = \Lambda_{AB} - \frac{4\pi}{3} N e_A e_B \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \right) \quad (1.25a)$$

$$\Lambda_{AC} = \Lambda_{AC} - \frac{4\pi}{3} N e_A e_C \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \right) \quad (1.25b)$$

$$\Lambda_{BC} = \Lambda_{BC} + \frac{4\pi}{3} N e_B e_C \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \right) \quad (1.25c)$$

donde E y ϵ_∞ dependen linealmente de la composición según las leyes:

$$N = (1-x)N_{AB} + xN_{AC} \quad (1.26)$$

$$N = (1-x)\epsilon_{\infty,AB} + x\epsilon_{\infty,AC} \quad (1.27)$$

Aquí, N_{AB} y N_{AC} definen las densidades de compuestos AB y AC, mientras que $\epsilon_{\infty,AB}$ y $\epsilon_{\infty,AC}$ representan sus constantes dieléctricas a alta frecuencia. Si se supone que las soluciones de las ecuaciones (1.24a)-(1.24b) se escriben en términos de onda plana; $\mathbf{w}_1 = A_1 e^{-i\omega t}$ y $\mathbf{w}_2 = A_2 e^{-i\omega t}$ para $\kappa \approx 0$, las frecuencias propias pueden ser determinadas a partir de la ecuación:

$$\omega^4 - (K_1 + K_2)\omega^2 + (K_1 K_2 - K_{12} K_{21}) = 0 \quad (1.28)$$

donde:

$$K_1 = (1-x) \frac{\Lambda_{AB}}{m_A} + \frac{\Lambda_{AB}}{m_B} + x \frac{\Lambda_{BC}}{m_B} \quad (1.29a)$$

$$K_2 = x \frac{\Lambda_{AC}}{m_A} + \frac{\Lambda_{AC}}{m_C} + (1-x) \frac{\Lambda_{BC}}{m_C} \quad (1.29b)$$

$$K_{12} = x \frac{\Lambda_{AC}}{m_A} - x \frac{\Lambda_{BC}}{m_B} \quad (1.29c)$$

$$K_{21} = (1-x) \frac{\Lambda_{AB}}{m_A} - (1-x) \frac{\Lambda_{BC}}{m_C} \quad (1.29d)$$

En el caso de fonones LO, la determinación de las frecuencias propias se haría de forma análoga al caso de los fonones TO, sin más que usar la relación de Lorentz relativa a los modos LO. Mediante la misma ecuación que los fonones TO [Ec. (1.28)] se calculan las frecuencias propias, siendo las constantes de fuerza Λ reemplazadas por:

$$\Lambda_{AB}'' = \Lambda_{AB} + \frac{8\pi}{3} N e_A e_B \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \right) \quad (1.30a)$$

$$\Lambda_{AC}'' = \Lambda_{AC} + \frac{8\pi}{3} N e_A e_C \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \right) \quad (1.30b)$$

$$\Lambda_{BC}'' = \Lambda_{BC} + \frac{8\pi}{3} N e_B e_C \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{3} \right) \quad (1.30c)$$

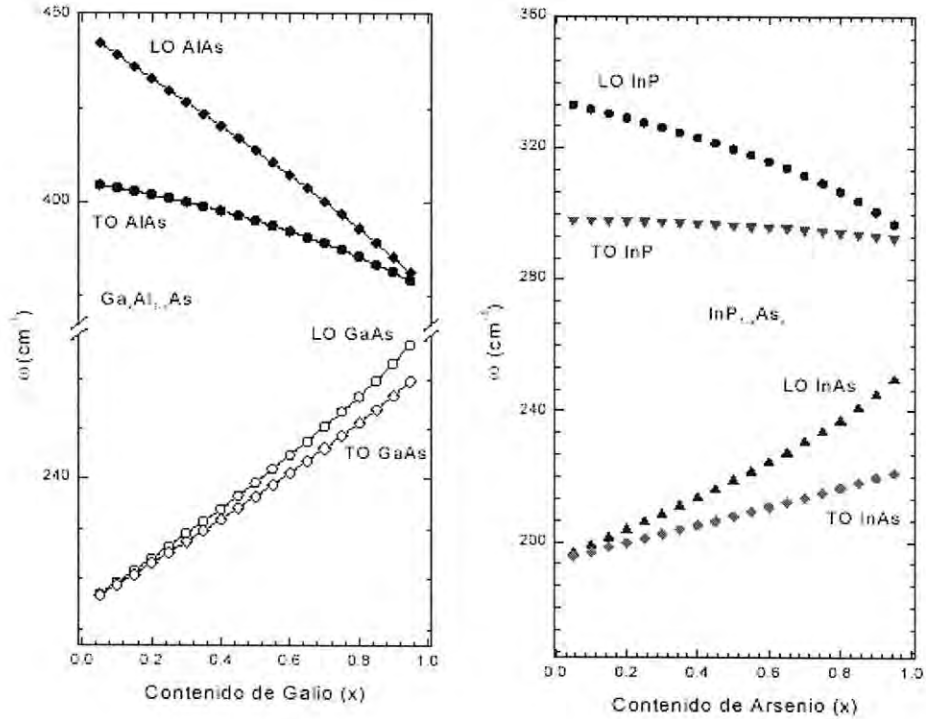


Figura 1.1. Dependencia de la frecuencia de los fonones ópticos con la composición en las aleaciones $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ e $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$.

La solución de la ecuación (1.28) exige que las constantes de fuerza cumplan unas condiciones de contorno que se obtienen resolviendo la ecuación de auto-valores (1.28) para $x = 0$ y para $x = 1$. Estas condiciones conducen a la existencia de los modos gap ($x = 0$) y los modos locales $x = 1$. En la figura 1.1, se representan las frecuencias de los fonones ópticos en función de la composición para las aleaciones de $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ y $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$. En ambas aleaciones, la masa del ión sustituido (Al en

el caso de $\text{Ga}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ y P en el caso $\text{InP}_{1-x}\text{As}_x$) es inferior a la masa reducida del compuesto formado por los dos materiales restantes. Como consecuencia, se observan dos modos distintos de fonones que asociamos a los llamados *end materials* para los dos ternarios. Además, $m_{\text{Ga}} > \mu_{\text{GaAs}}$ y $m_{\text{In}} > \mu_{\text{GaAs}}$. Los dos criterios de masa se cumplen, lo que da lugar a la existencia de los modos local y gap en los dos extremos de las aleaciones estudiadas.

Existen otros tipos de aleaciones para los que los modos fonónicos presentan un solo modo. Es el caso de aleaciones de tipo $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ donde el nitrógeno influye mucho en los modos de vibración. En efecto, la masa atómica de N es inferior a la de Al, In o Ga, por lo que las masas reducidas de AlN, InN o GaN serán del mismo orden de magnitud. Debido a la poca diferencia entre las masas reducidas de los *end-materials* en las aleaciones de nitruro, las energías de los fonones son más próximas en ambos compuestos, lo que destruye el comportamiento de dos modos para los fonones. La inexistencia de dos modos implica que no existe ni modo local ni modo gap en estos ternarios. Además de los casos considerados anteriormente, existen sistemas para los que los modos de vibración tienen un comportamiento mixto. Este es el caso del ternario $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$. Para esta aleación, se tiene $m_{\text{Ga}} > \mu_{\text{InAs}}$ y $m_{\text{In}} > \mu_{\text{GaAs}}$. Los criterios que gobiernan la existencia de modos mixtos, aún no están claros.

1.8 Teoría de la Función Envolvente de Akera y Ando

Akera y Ando describen los fonones de onda larga con un modelo continuo tipo electrónico. Pero dedujeron las condiciones de frontera de modelos

microscópicos simples, empalmando en las intercaras mediante matrices de transferencias [36]. Es muy engorroso para realizar cálculos, mas sus condiciones de frontera son exactas y se obtienen los resultados correctos para todos los modos, incluyendo los de intercara. Ellos analizaron tanto problemas unidimensionales como el problema tridimensional.

1.9 Teoría de la Función Envolvente de Foreman

Recientemente Foreman derivó un formalismo de función envolvente partiendo del problema microscópico [37]. El escogió entre las infinitas interpolaciones continuas posibles aquella que describiera de mejor forma las propiedades de las funciones definidas en una red uniforme. Demostró que para ello los vectores de onda deben limitarse a la primera Zona de Brillouin (ZB), y desarrolló los cálculos consecuentemente. Los resultados coinciden con cálculos microscópicos y con el modelo de Akera y Ando [36]. Se limitó al problema unidimensional, aunque hace algunas predicciones para el caso tridimensional.

Foreman demuestra de forma razonablemente rigurosa las diferencias entre los modelos continuos para fonones ópticos y acústicos, mejora el tratamiento de Akera y Ando y descubre un nuevo tipo de condiciones de frontera no tenido en cuenta por los modelos fenomenológicos del continuo más sofisticados [33].

1.10 Métodos Ab Initio

Como constantemente comparamos nuestros resultados con cálculos de primeros principios, por ser los más confiables hoy en día, es bueno brindar una breve idea del basamento de los mismos. Baroni et al desarrollaron la llamada teoría de perturbaciones para el funcional densidad [38], que permite aplicar la teoría de la respuesta lineal de las vibraciones de la red dentro del marco teórico que provee la teoría del funcional densidad. El conjunto de ecuaciones que se obtiene para la variación de las diferentes magnitudes es análogo a las conocidas ecuaciones de Kohn-Sham, para las que se han desarrollado diversos procedimientos de solución.

Una de las ventajas del método es que las respuestas a perturbaciones de diferente longitud de onda están desacopladas. Se han calculado los estados fonónicos de infinidad de metales, semiconductores, aislantes, superconductores, ferroeléctricos y diversas propiedades físicas de los mismos (una revisión del tema puede encontrarse en [39]). En el caso de las superredes se emplean los valores de las constantes de fuerza y parámetros de la red calculada para los materiales en el modelo de la cadena lineal [40,41].

Capítulo 2

Modelo fenomenológico de ondas largas

2.1 Ecuación de movimiento

El problema dinámico del movimiento de los iones puede ser resuelto tanto microscópica como macroscópicamente mediante el cálculo numérico o analíticamente, sin embargo, el tratamiento basado en un modelo macroscópico continuo resulta ser el más empleado, siendo particularmente válido en el límite de longitud de onda larga para las oscilaciones.

En el caso de las heteroestructuras a capas, resultados experimentales de resonancia ciclotrónica y magnetofonónica [1, 45], así como experimentos de dispersión Raman en superredes y pozos cuánticos múltiples [11,42], mostraron evidencias de las importantes diferencias que se detectan en el espectro de los fonones ópticos longitudinales (LO) en esas estructuras y que son imputables a la presencia de intercaras. De ahí que en la literatura científica un buen número de trabajos trataron de describir fenomenológicamente, en el marco de modelos continuos, las oscilaciones ópticas polares de longitud de onda larga en heteroestructuras [25,33,36,47,48-50].

Cada uno de estos trabajos tiene sus particularidades y en esencia tratan de eliminar diferentes limitaciones e incompatibilidades entre ellos. En esencia éstos se pueden agrupar de dos formas:

a).- El modelo dieléctrico continuo [25,33,36,48].

b).- El modelo hidrodinámico dispersivo [25,49,50].

En el *modelo dieléctrico* se impone la continuidad electrostática, a expensas de la discontinuidad mecánica, resultando que el patrón de amplitudes vibracionales y el potencial electrostático que se obtienen están en contradicción con datos experimentales obtenidos así como con cálculos microscópicos realizados.

El *modelo hidrodinámico* parte de una ecuación de movimiento mecánica para la amplitud de vibración y se impone la continuidad mecánica, obteniéndose un potencial electrostático discontinuo.

En esencia la dificultad mayor de estos modelos fenomenológicos radica en el tratamiento inadecuado de las ecuaciones para los campos mecánicos y electrostáticos que conduce a un mal planteamiento del problema del empalme de las soluciones en las intercaras.

En general en estos tratamientos fenomenológicos se hacen suposiciones impositivas a priori que desacoplan las ecuaciones, estableciendo una separación en modos longitudinales y modos transversales, o en modos confinados de volumen y modos de intercaras.

En el año de 1993 apareció un trabajo de C. Trallero-Giner y colaboradores [51], donde se muestra la posibilidad de combinar de manera apropiada las condiciones de contorno mecánicas y electrostáticas y así lograr el acoplamiento entre los campos mecánicos y electrostáticos, mediante una manipulación coherente y rigurosa del sistema de ecuaciones acopladas. Partiendo de estas ideas F. Comas, R. Pérez-Álvarez, C. Trallero-Giner y M. Cardona [32,33,51,52] han desarrollado una teoría fenomenológica de longitudes de onda larga para los fonones ópticos polares

en las heteroestructuras, en la que se parte de las ecuaciones de movimiento siguientes:

$$\rho(\omega^2 - \omega_{T_0}^2)\mathbf{u}(\mathbf{r}) + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} - \alpha \nabla \varphi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.1)$$

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\alpha}{\varepsilon_\infty} \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) \quad (2.2)$$

donde:

$$\alpha^2 = \frac{\omega_{T_0}^2 \rho (\varepsilon_0 - \varepsilon_\infty)}{4\pi} \quad (2.3)$$

aquí ε_0 (ε_∞) es la constante dieléctrica a bajas (altas) frecuencias y ρ es la densidad de la masa reducida.

El campo eléctrico acoplado a las oscilaciones mecánicas está dado por $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$ y se corresponde con un tratamiento cuasiestacionario de las ecuaciones de Maxwell en el límite en que se desprecian los efectos de retardo. En esta teoría el desplazamiento eléctrico \mathbf{D} y el tensor de tensiones $\boldsymbol{\tau}$ están dados por las siguientes relaciones:

$$\mathbf{D} = 4\pi\alpha \mathbf{u} - \varepsilon_\infty \nabla \varphi \quad (2.4)$$

$$\tau_y = -\rho(\beta_L^2 - 2\beta_T^2)\delta_y \nabla \cdot \mathbf{u} - \rho\beta_T^2(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i) \quad (2.5)$$

aquí β_L (β_T) son los parámetros de parabolicidad longitudinal (transversal) que dan cuenta de la dispersión de estas curvas para valores pequeños del vector de onda.

Tomemos

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = u(z) \exp[i(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\rho} - \omega t)]$$

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(z) \exp[i(\boldsymbol{\kappa} \cdot \boldsymbol{\rho} - \omega t)]$$

como el campo de desplazamiento y el potencial eléctrico asociado al modo en cuestión, donde $\mathbf{r} = (r_x, r_y)$ es el vector de posición en este plano, $\boldsymbol{\kappa} = (\kappa_x, \kappa_y)$ es el vector de onda paralelo a la intercara.

Para obtener la solución correcta del problema hay que resolver el sistema de cuatro ecuaciones diferenciales acopladas.

Para un medio volumétrico (parámetros no dependientes de la posición) se desacoplan las soluciones longitudinales (L) y transversales (T) con relaciones de dispersión:

$$\omega_L^2 = \omega_{L0}^2 - \beta_L^2 k^2 \quad (2.6)$$

$$\omega_T^2 = \omega_{T0}^2 - \beta_T^2 k^2 \quad (2.7)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda 3D, $\omega_T(\omega_L)$ es la frecuencia transversal (longitudinal) de las ramas fonónicas de volumen y

$$\omega_{L0}^2 = \omega_{T0}^2 \left(\frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \right) \text{ (Relación de Lyddane-Sach-Teller)} \quad (2.8)$$

Las ecuaciones (2.1) y (2.2) están rigurosamente deducidas e interpretadas en la referencia [33] para una doble heteroestructura crecida a lo largo del eje con

intercara en $Z = \pm \frac{d}{2}$ y considerando a todas las capas como un continuo isotrópico.

En [53] se muestra que el sistema de ecuaciones para $\mathbf{u}(z)$ y $\varphi(z)$ es en ecuaciones diferenciales ordinarias y que tiene un subespacio de soluciones bidimensional de estados transversales horizontales de la forma:

$$u_x(z) = ik_T \exp(ik_T z); \quad u_y(z) = 0; \quad u_z(z) = 0 \quad \varphi(z) = 0 \quad (2.9)$$

$$u_x(z) = -ik_T \exp(ik_T z); \quad u_y(z) = 0 \quad u_z(z) = 0; \quad \varphi(z) = 0 \quad (2.10)$$

donde:

$$k_T = \sqrt{\frac{\omega_T^2 - \omega^2}{\beta_T^2} - \kappa^2}$$

Por simplicidad tomaremos $\boldsymbol{\kappa} = (0, k_y)$.

Además se demuestra [53] que el sistema de ecuaciones tiene un subespacio de soluciones de dimensión seis con $u_x(z) = 0$. Si trabajamos con magnitudes de tres componentes (u_y, u_z, φ) este espacio tiene la siguiente base:

$$f_1(z) = \begin{vmatrix} i\kappa \\ ik_L \\ \frac{4\pi\alpha}{\varepsilon_\infty} \end{vmatrix} \exp(ik_L z) \quad ; \quad f_4(z) = \begin{vmatrix} i\kappa \\ -ik_L \\ \frac{4\pi\alpha}{\varepsilon_\infty} \end{vmatrix} \exp(-ik_L z) \quad (2.11)$$

$$f_2(z) = \begin{vmatrix} -ik_T \\ i\kappa \\ 0 \end{vmatrix} \exp(ik_T z); \quad f_5(z) = \begin{vmatrix} ik_T \\ i\kappa \\ 0 \end{vmatrix} \exp(-ik_T z) \quad (2.12)$$

$$f_3(z) = \begin{vmatrix} iC\kappa \\ C\kappa \\ 1 \end{vmatrix} \exp(\kappa z); \quad f_6(z) = \begin{vmatrix} iC\kappa \\ -C\kappa \\ 1 \end{vmatrix} \exp(-\kappa z) \quad (2.13)$$

donde:

$$C = \frac{\alpha}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} \quad (2.14)$$

$$k_L = \sqrt{\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\beta_L^2} - \kappa^2} \quad (2.15)$$

2.2 Condiciones de empalme de las intercaras

Las condiciones de empalme en las intercaras se derivan sistemática y rigurosamente de principios físicos básicos, a saber:

- Continuidad del campo de elongaciones de \mathbf{u} en la intercara
- Continuidad del potencial electrostático φ en la intercara
- Continuidad en la intercara del vector

$$\boldsymbol{\tau}_N = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{N}$$

donde $\boldsymbol{\tau}$ es el tensor de tensiones y está dado por (2.5), donde \mathbf{N} es el vector unitario normal a la intercara.

- Continuidad en la intercara de D_N , componente normal del vector desplazamiento eléctrico \mathbf{D} , dado por la ecuación (2.4).

Este enfoque del problema de empalme para el modelo microscópico de fonones ópticos salva la inconsistencia de modelos anteriores, pues de aquí se deriva que:

- No se supone el confinamiento total de los estados en una capa.
- Las ecuaciones mecánicas (Newton) y eléctricas (Poisson) no se desacoplan. El problema, inevitablemente, es de cuatro ecuaciones acopladas.
- En general no es lícito buscar soluciones L. Se puede demostrar que esto es posible sólo en $\boldsymbol{\kappa} = 0$. En cualquier otro caso un modo cualquiera es una mezcla de campos L y T, excepción hecha, de los modos transversales horizontales, pues aquí no se supone a priori el carácter longitudinal ni transversal de ningún estado.
- Se satisfacen todas las condiciones de contorno y empalme del caso.

Los resultados de esta teoría tienen una excelente concordancia con cálculos microscópicos de la interacción electrón-fonón en pozos cuánticos de GaAs/AlAs [54,55,59] y una de sus más interesantes conclusiones es que no es posible, en general, separar las polarizaciones transversales y longitudinales de los modos ópticos polares, ya que ambas polarizaciones aparecen mezcladas a $\boldsymbol{\kappa} \neq 0$.

2.3 Modelo con interfaces rígidas.

En el caso de una doble heteroestructura crecida a lo largo del eje Z con intercara en $Z \pm d/2$ de CdTe-ZnTe o CdTe-ZnSe, la ecuación de movimiento, el sistema de ecuaciones para $\mathbf{u}(z)$ y $\varphi(z)$, y el subespacio de soluciones bidimensionales de estados transversales horizontales tienen la misma forma a la presentada en el epígrafe (2.1).

Aquí y en lo que sigue usaremos un campo de tres componentes $u_y(z), u_z(z)$ y $\varphi(z)$, para los cuales $u_x(z)$ es idénticamente cero.

En principio estamos interesados en los autoestados de estos espacios que decaen para $Z \rightarrow \pm\infty$ y que satisfacen las siguientes condiciones de empalme en las intercaras:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(a+) &= \mathbf{u}(a-) \\ \varphi(a+) &= \varphi(a-) \\ Dz(a+) &= Dz(a-) \\ \tau_{3j}(a+) &= \tau_{3j}(a-) \quad j = 1, 2, 3 \end{aligned} \tag{2.17}$$

No obstante, para los materiales que tratamos (CdTe, ZnTe, ZnSe) los estados propagantes en uno de ellos no lo son en el otro, de modo que es plausible exigir la condición:

$$\mathbf{u}(a) = \mathbf{0} \tag{2.18}$$

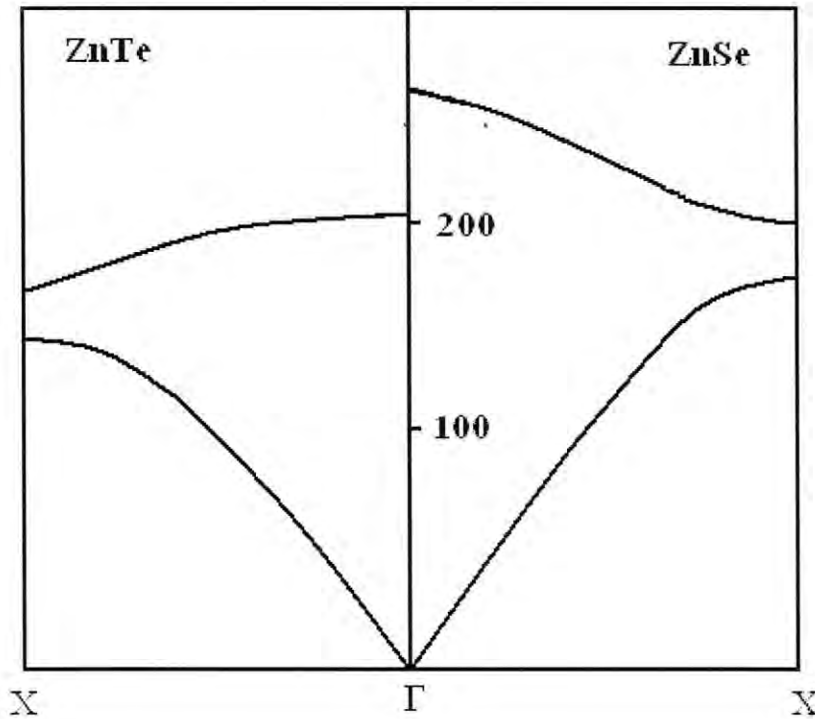


Figura 2.1: Curva de dispersión de fonones longitudinales para el material volumétrico de ZnSe y ZnTe.

En cada intercara esto está dado porque las propiedades dinámicas de las superredes y pozos cuánticos están gobernadas por los materiales que la conforman y dependen drásticamente de las posiciones relativas de la banda de fonones de ambos materiales.

En la figura 2.1 se muestra la curva de dispersión de los fonones longitudinales para $\kappa//[001]$ obtenida para el ajuste de la data de dispersión neutrónica inelástica para el material volumétrico de ZnSe y el ZnTe obtenida por J. Frandon y colaboradores [56]. Se puede observar que no existe solapamiento, excepto

para las frecuencias acústicas, es decir, los estados propagantes en uno de ellos no lo son en el otro; esto está dado por la diferencia que existe entre las frecuencias de los materiales, por ejemplo para el caso que nos ocupa los valores de frecuencias son los siguientes $\omega_{LO}^{ZnTe} = 210\text{cm}^{-1}$; $\omega_{LO}^{ZnSe} = 250\text{cm}^{-1}$, de forma análoga ocurre para el caso del CdTe ($\omega_{LO}^{CdTe} = 170\text{cm}^{-1}$) con cualquiera de los materiales ZnTe-ZnSe, de ahí, que la condición anterior es válida para materiales que cumplan con esta condición.

Los modos ópticos polares que se han dado en llamar **Shear Horizontal Modes** se corresponden (atendiendo a la simetría respecto al eje $Z = 0$) con:

$$X(z) = i \frac{\kappa^2 + k_T^2}{k_T} B \cos(k_T z) \quad (2.19)$$

$$k_T = \frac{n\pi}{d}, \quad n = \text{inpar}$$

$$X(z) = - \frac{\kappa^2 + k_T^2}{k_T} B \sin(k_T z) \quad (2.20)$$

$$k_T = \frac{n\pi}{d}, \quad n = \text{par}$$

con autofrecuencias:

$$\omega^2 = \omega_T^2 - \beta_T^2 (\kappa^2 + k_T^2) \quad (2.21)$$

donde:

$$k_T = \sqrt{\frac{\omega_T^2 - \omega^2}{\beta_T^2} - \kappa^2} \quad (2.22)$$

y B es una constante de normalización.

Los restantes modos acoplados se dividen en dos grupos, atendiendo a su simetría respecto al origen. Tenemos los **Estados de Potencial Impar** (OPS-Odd Potencial States):

$$Y(z) = iA \left[\kappa \sin(k_L z) + k_T \frac{S_L}{C_T} \left(\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right) \sin(k_T z) \right. \\ \left. + S_L \left(\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right) \exp \left[- \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \sinh(\kappa z) \right] \quad (2.23)$$

$$Z(z) = A \left[k_L \cos(k_L z) - \kappa \frac{S_L}{C_T} \left(\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right) \cos(k_T z) \right] \quad (2.24)$$

$$f(z) = \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} A \left[\sin(k_L z) - \frac{S_L}{k} \exp \left[- \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \sinh(\kappa z) \right] \quad (2.25)$$

para $|z| < \frac{d}{2}$; mientras que para $|z| > \frac{d}{2}$ tenemos:

$$Y(z) = 0; \quad Z(z) = 0; \quad f(z) = \frac{4\pi A}{\epsilon_\infty} S_0 \exp(-\kappa|z|) \frac{z}{|z|} \quad (2.26)$$

donde A es una constante de normalización y

$$S_{L(T)} = \sqrt{\kappa^2 + k_{L(T)}^2} \sin \left[\frac{k_{L(T)}d}{2} + \theta_{L(T)} \right] \quad (2.27)$$

$$C_{L(T)} = \sqrt{\kappa^2 + k_{L(T)}^2} \cos \left[\frac{k_{L(T)}d}{2} + \theta_{L(T)} \right] \quad (2.28)$$

$$\tan \theta_{L(T)} = \frac{k_{L(T)}}{\kappa} \quad (2.29)$$

y

$$S_o = \frac{1}{\kappa} \left[\kappa \sin \left(\frac{k_L d}{2} \right) \cosh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) - k_L \cos \left(\frac{k_L d}{2} \right) \sinh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \quad (2.30)$$

Para estos estados, la relación de dispersión es la siguiente:

$$\begin{aligned} & (\omega_l^2 - \omega^2) \left[k_l \cos \left(\frac{k_l d}{2} \right) + \kappa \sin \left(\frac{k_l d}{2} \right) \right] \\ & \times \left[k_r \sin \left(\frac{k_r d}{2} \right) \cosh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) + \kappa \cos \left(\frac{k_r d}{2} \right) \sinh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \\ & = (\omega_r^2 - \omega^2) \left[\kappa \cos \left(\frac{k_r d}{2} \right) + k_r \sin \left(\frac{k_r d}{2} \right) \right] \\ & \times \left[k_l \cos \left(\frac{k_l d}{2} \right) \sinh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) + \kappa \sin \left(\frac{k_l d}{2} \right) \cosh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.31)$$

Para los **Estados de Potencial Par** (EPS- Even Potential States) tenemos:

$$Y(z) = iA' \left[\kappa \cos(k_L z) - k_T \frac{C_L}{S_T} \left(\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right) \cos(k_T z) + C_L \left(\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right) \exp \left[- \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \cosh(\kappa z) \right] \quad (2.32)$$

$$Z(z) = A \left[k_L \sin(k_L z) - \kappa \frac{C_L}{S_T} \left(\frac{\omega_L^2 - \omega^2}{\omega_T^2 - \omega^2} \right) \sin(k_T z) \right] \quad (2.33)$$

$$f(z) = \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} A' \left[\cos(k_L z) - \frac{C_L}{\kappa} \exp \left[- \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \cosh(\kappa z) \right] \quad (2.34)$$

para $|Z| < \frac{d}{2}$; mientras para $|Z| > \frac{d}{2}$ tenemos:

$$Y(z) = 0; \quad Z(z) = 0; \quad f(z) = \frac{4\pi A'}{\epsilon_\infty} C_o \exp(-\kappa|z|) \quad (2.35)$$

donde

$$C_o = \frac{1}{\kappa} \left[\kappa \cos \left(\frac{k_L d}{2} \right) \sinh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) + k_L \sin \left(\frac{k_L d}{2} \right) \cosh \left(\frac{\kappa d}{2} \right) \right] \quad (2.36)$$

y A es una constante de normalización.

Para estos estados la relación de dispersión es la siguiente:

$$(\omega_L^2 - \omega^2) \left[\kappa \cos \left(\frac{k_L d}{2} \right) + k_L \sin \left(\frac{k_L d}{2} \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[k_T \cos\left(\frac{k_T d}{2}\right) \sinh\left(\frac{\kappa d}{2}\right) - \kappa \sin\left(\frac{k_T d}{2}\right) \cosh\left(\frac{\kappa d}{2}\right) \right] \\
 & = (\omega_T^2 - \omega^2) \left[\kappa \sin\left(\frac{k_T d}{2}\right) + k_T \cos\left(\frac{k_T d}{2}\right) \right] \\
 & \times \left[k_L \sin\left(\frac{k_L d}{2}\right) \cosh\left(\frac{\kappa d}{2}\right) + \kappa \cos\left(\frac{k_L d}{2}\right) \sinh\left(\frac{\kappa d}{2}\right) \right] \quad (2.37)
 \end{aligned}$$

En todos los casos, la constante de normalización se obtiene a partir de:

$$\int_{-\frac{d}{2}}^{\frac{d}{2}} \mathbf{U}_m^*(z) \cdot \mathbf{U}_{m'}(z) dz = \Omega_0 \delta_{mm'} \quad (2.38)$$

donde Ω_0 es una constante que toma un valor arbitrario y m es un índice discreto que designa las diferentes soluciones propias una vez resueltas (2.31) y (2.37).

En ambas situaciones, los modos acoplados no son ni L puros, ni T puros. Lo que puede decirse es que unos modos son predominantemente L (cuasi-L) o predominantemente T (cuasi-T). La influencia del potencial eléctrico φ conduce a un cierto carácter de intercara en algunos modos (2.25, 2.34), pero no tendremos modos de intercara puros. Los modos de intercara puros se obtendrían en el límite de una doble heteroestructuras (DHS) muy ancha ($d \rightarrow \infty$) y se corresponden con lo previsto en el modelo dieléctrico continuo. Para $\kappa = 0$, los modos se desacoplan, originando un conjunto de modos L puros $\nabla \times \mathbf{u} = 0$ con autofrecuencias:

$$\omega_m^2 = \omega_{TO}^2 - \beta_T^2 \left(\frac{m\pi}{d} \right)^2 \quad (2.39)$$

$$m = 1, 2, \dots$$

Aplicando este modelo podemos calcular los modos fonónicos ópticos para pozos cuánticos de materiales de CdTe, ZnTe y ZnSe de anchos de 2nm y 6 monocapas emparedado con cualquiera de ellos, esto está dado por el hecho de que los estados propagantes en uno de ellos no lo son en el otro.

Los cálculos fueron hechos con MATHEMATICA, lo que permitió obtener formulas analíticas compactas para todas las magnitudes y evaluarlas al final con la exactitud deseada. Este es un detalle no trivial dada la rigidez del problema.

En las figuras 2.2 a las 2.7 se muestran las curvas $\omega(\kappa)$ para los diferentes modos de pozos de CdTe, ZnTe y ZnSe de distintos anchos. Por simplicidad no incluimos las curvas de dispersión de los modos transversales horizontales.

2.4 Pozo cuántico de CdTe no tensionado

En las figuras 2.2 y 2.3 mostramos las relaciones de dispersión del pozo cuántico de CdTe para $d = 2\text{nm}$ y $d = 3.8892\text{ nm}$ respectivamente. Los modos están etiquetados de acuerdo a su carácter en $\kappa = 0$, como se observa hay una secuencia de estados Longitudinales (LO1, LO2, LO3, etc.) y otra de estados Transversales (TO1, TO2, TO3, etc.). Contrariamente a lo que pasa en el GaAs y en AlAs reportado por

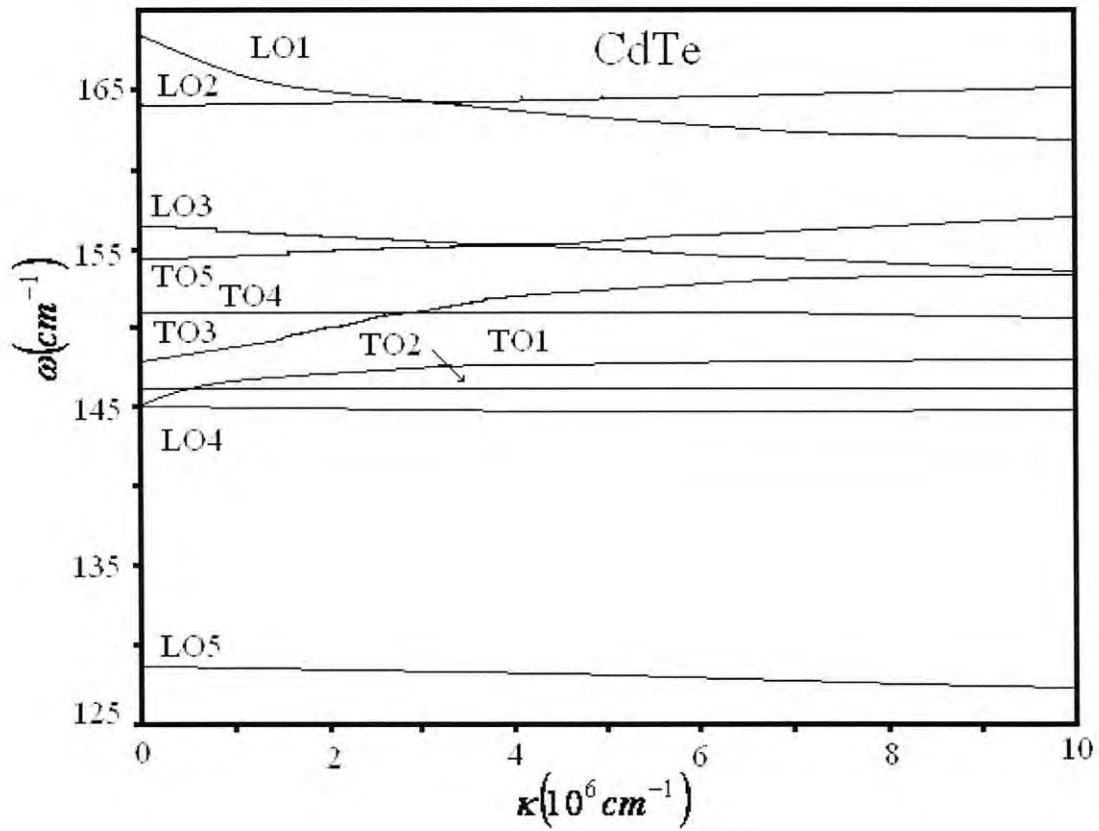


Figura 2.2: Relaciones de dispersión para los autoestados del pozo de CdTe para un ancho de $d = 2\text{nm}$ no tensionado.

F.Comas, R. Pérez-Álvarez; C. Trallero-Giner y M. Gardona [53], la secuencia de los estados transversales es de frecuencia creciente, tanto para el pozo de $d = 2\text{nm}$ como para $d = 3.8892 \text{ nm}$, en correspondencia con el valor negativo β_T^2 reportado por

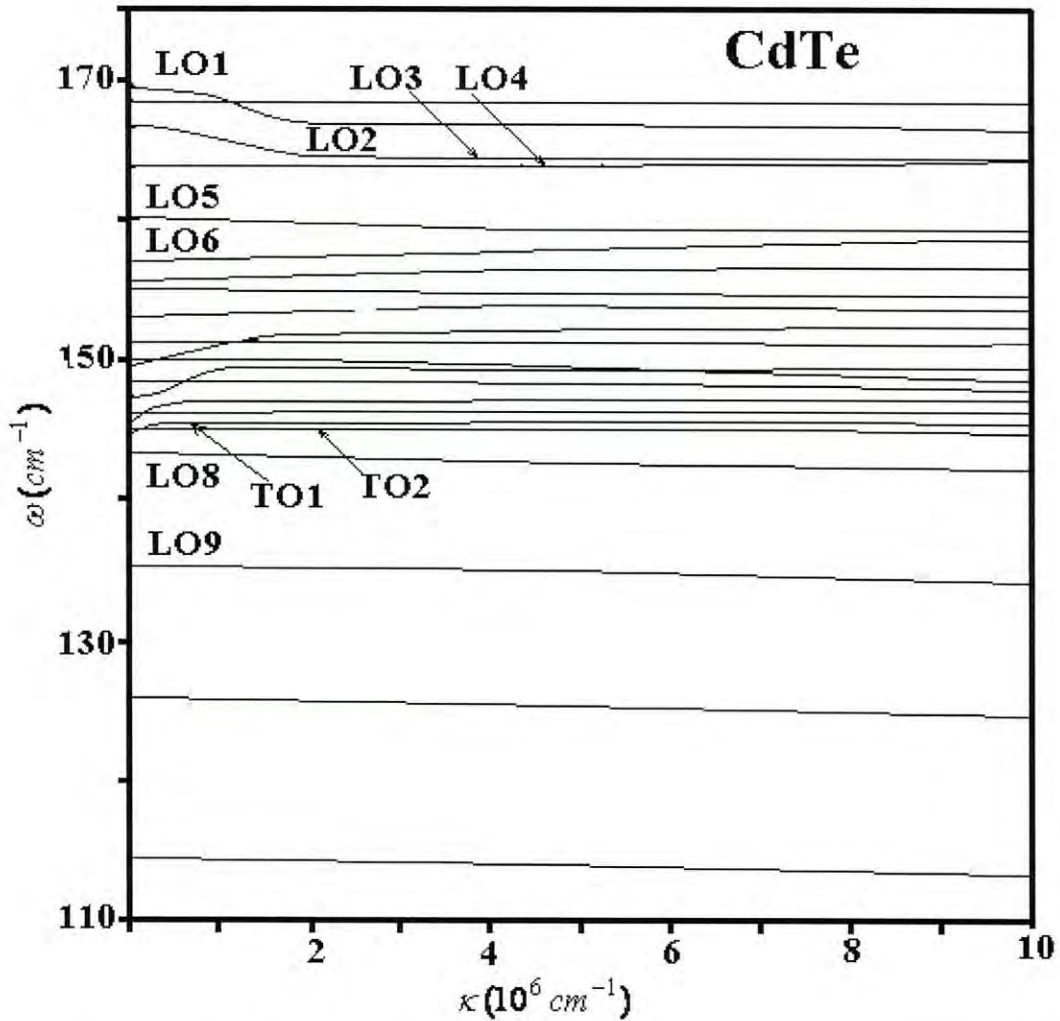


Figura 2.3: Relaciones de dispersión para los autoestados del pozo de CdTe para un ancho de $d = 3.8892\text{nm}$ no tensionado.

nosotros [57-61]. Aquí se observa claramente que las ramas con diferente paridad, es decir, las OPS cruzan a las de EPS y viceversa mientras que las ramas con idéntica paridad, es decir, del mismo grupo no se cruzan, originan bandas prohibidas en el espectro. En nuestro caso tales gaps ocurren entre LO1-LO3, TO1-TO3 y finalmente entre TO3-TO5 para el pozo de $d = 2\text{nm}$. Para el caso del pozo de $d = 3.8892\text{ nm}$

sería para LO1-LO3, LO3-LO5 y para los estados de potencial par TO1-TO3, TO3-TO5, TO5-TO7, TO7- TO9, TO9-LO6 y LO6-TO11.

Para $\kappa \neq 0$ las distintas ramas son casi planas excepto en regiones de κ donde son dispersivas, los intervalos de κ las ramas que muestran mas fuerte dispersión son las referidas a los estados con fuerte efecto electrostático, es decir, con un fuerte carácter de intercara. Esto fortalece la idea de que los modos puramente de intercara no aparecen en este modelo, pero para algunos intervalos de κ algunas ramas pueden mostrar un carácter predominante de intercara.

2.5 Pozo cuántico de ZnTe no tensionado.

En las figuras 2.4 y 2.5 se muestran las relaciones de dispersión del pozo cuántico de ZnTe para $d = 2$ nm y $d = 3.6624$ nm respectivamente, al igual que en los pozos anteriores, los modos están etiquetados de acuerdo a su carácter en $\kappa = 0$.

En los gráficos se aprecian las siguientes características:

- Las curvas de los OPS cruzan a las de los EPS y viceversa. Las curvas de un mismo grupo no se cruzan (crean gaps en el espectro).

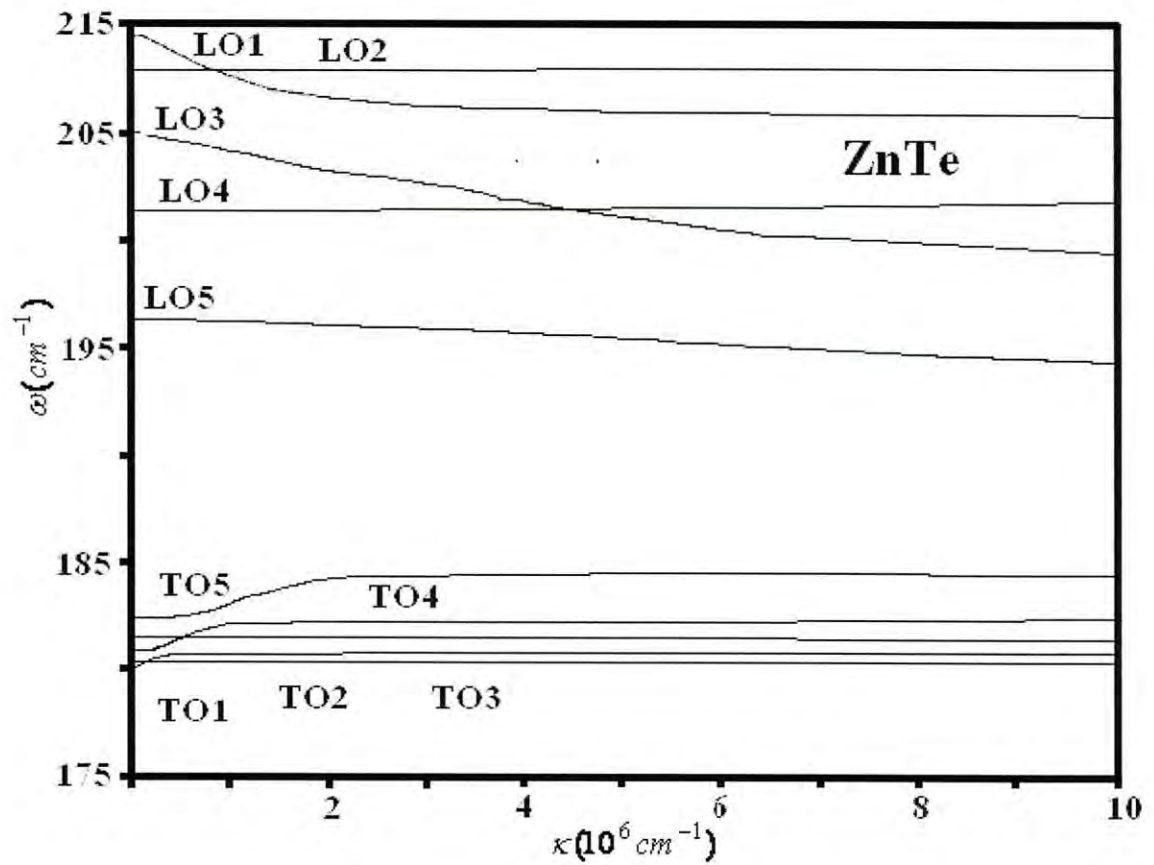


Figura 2:4: Relaciones de dispersión para los autoestados del pozo de ZnTe para un ancho de $d = 2\text{nm}$ no tensionado.

- A $\kappa \neq 0$ hay una secuencia de estados longitudinales (LO1, LO2, LO3, etc.) y otra de estados transversales (TO1, TO2, TO3, etc.), de igual forma a como pasa en el pozo de CdTe, la secuencia de los estados T es de frecuencia creciente, en correspondencia con el valor negativo de β_T^2 .
- Para $\kappa \neq 0$ las distintas ramas son casi planas excepto en regiones en donde son dispersivas.

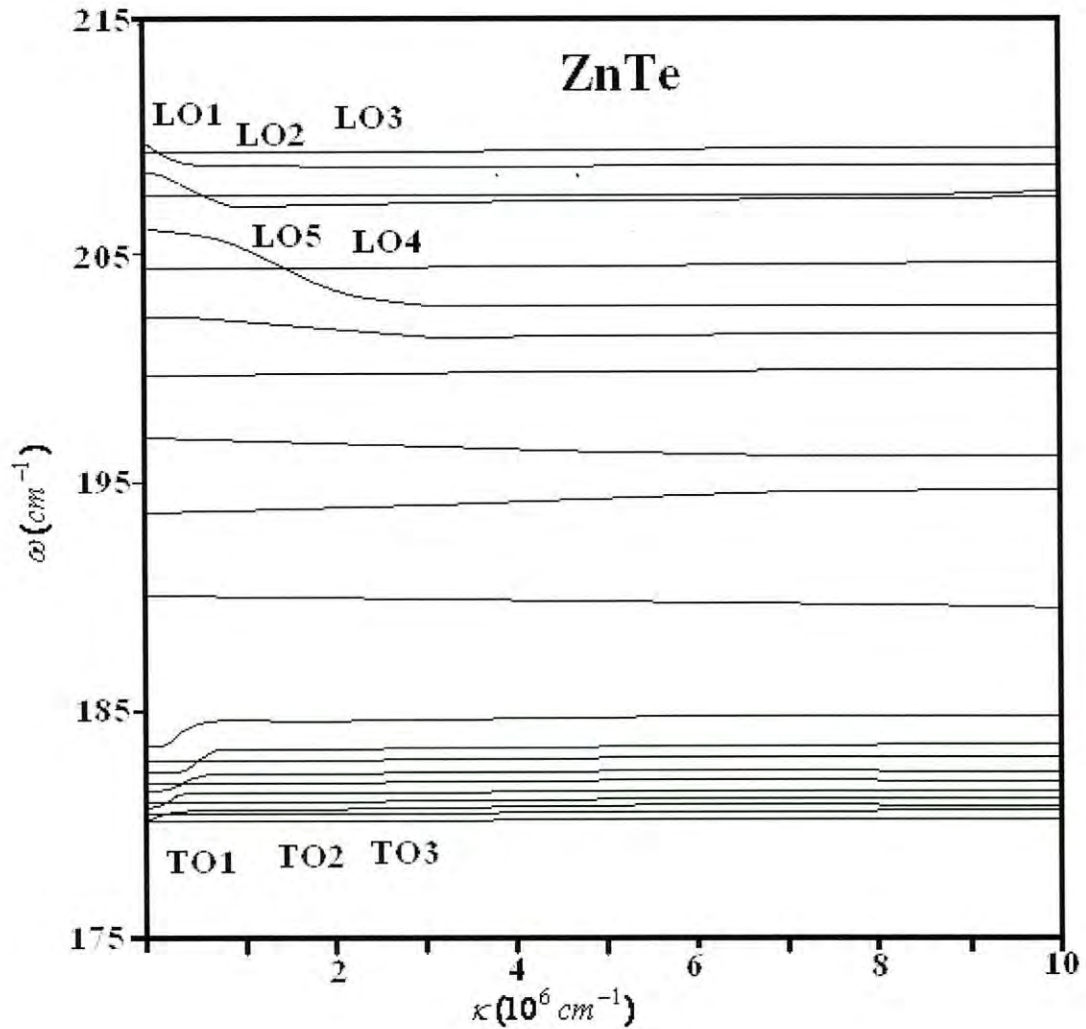


Figura 2.5: Relaciones de dispersión para los autoestados del pozo de ZnTe para un ancho de $d = 3.6624\text{nm}$ no tensionado.

El carácter dispersivo de las ramas en el caso del pozo de $d = 2\text{ nm}$ se transmite de la LO1 a la LO3 y de LO3 a la LO5 (TO1 a la TO3 y de TO3 a TO5). Para el pozo de $d = 3.6624\text{ nm}$ esto sucede con la secuencia de ramas LO1 a la LO3, de

LO3 a LO5, de LO5 a LO7 y de LO7 a la LO9 (TO1 a TO3, TO3 a TO5, TO5 a TO7, TO7 a TO9, TO9 a TO11 y finalmente TO11 a la LO10).

En esencia en estos pozos se observan características similares a las de las ramas de dispersión de los pozos de CdTe. En este caso lo que los diferencia substancialmente de los pozos anteriores es que tenemos una mayor cantidad de modos en un intervalo similar de frecuencias, esto se debe al valor particularmente pequeño del parámetro β_i [57-61].

2.6. Pozo cuántico de ZnSe no tensionado.

En las figuras 2.6 y 2.7 mostramos las relaciones de dispersión del pozo cuántico de ZnSe emparedado con cualquier material con frecuencias propias no propagantes en el ZnSe; en estas figuras encontramos de nuevo cruzamientos y gaps al igual que en los pozos anteriores, la secuencia de los estados transversales es de frecuencia decreciente, de la misma forma a como pasa en el GaAs y AlAs, en correspondencia con el valor positivo de β_T^2 reportado por [57-61].

Para el cálculo no hemos tenido en cuenta hasta ahora los posibles estados de tensión en el pozo cuántico. La gran diferencia de constantes de la red entre estos materiales puede provocar diversos estados de tensión dependiendo de las condiciones del crecimiento

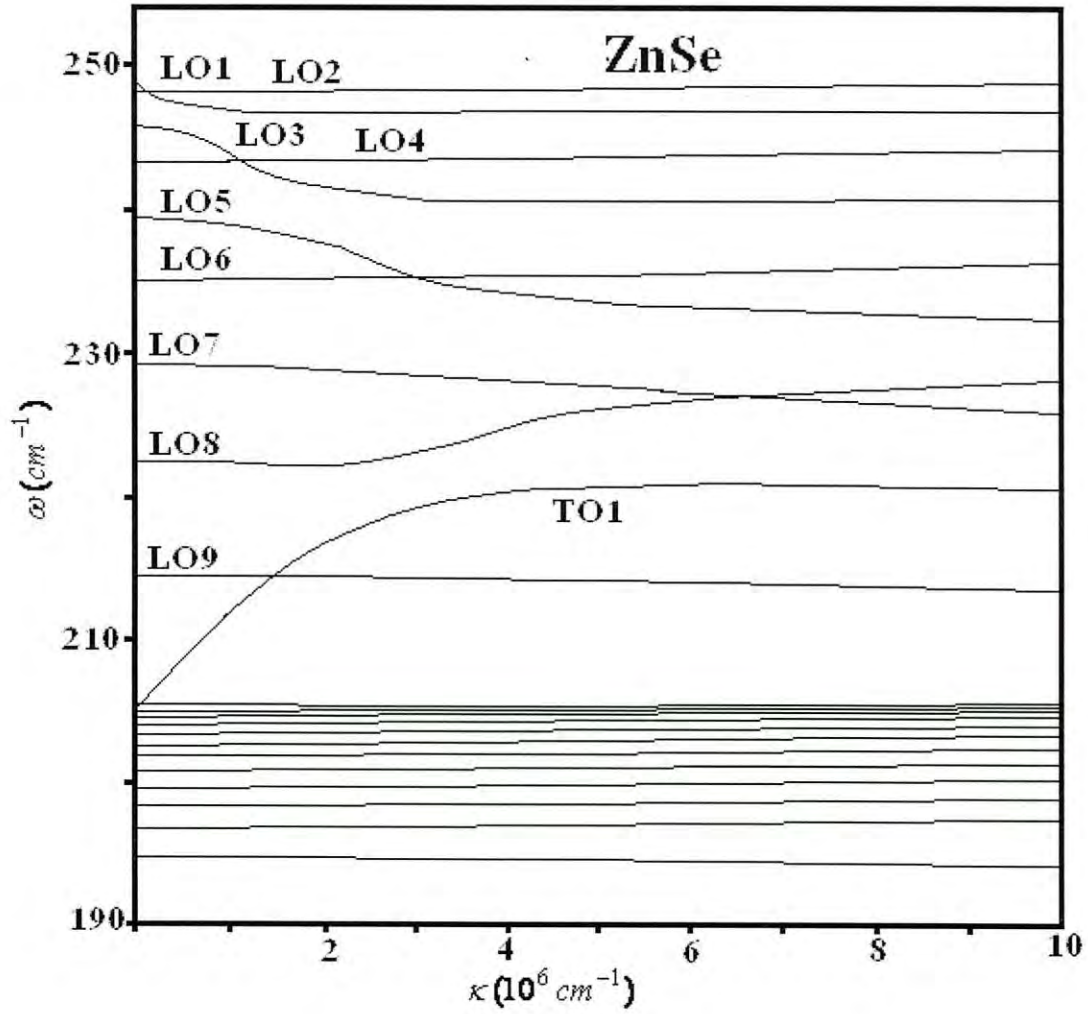


Figura 2.7: Relaciones de dispersión para los autoestados del pozo de ZnTe para un ancho de $d = 3.4\text{nm}$ no tensionado.

Capítulo 3

Modelo fenomenológico de ondas largas para materiales polares.

3.1 Generalidades. Materiales II-VI

Los semiconductores pueden clasificarse de acuerdo al tipo de compuesto que forman. De esta manera tenemos los llamados semiconductores del grupo IV, III-V, II-VI, IV-VI donde los números se refieren al grupo de la tabla periódica (ver figura 3.1)

Número atómico →	<div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content;"> <p style="text-align: center;">5 10,811 3</p> <p style="text-align: center;">(2030) B</p> <p style="text-align: center;">2,34</p> <p style="text-align: center;">$1s^2 2s^2 2p^1$</p> <p style="text-align: center;">Boro</p> </div>	← Peso atómico						
Punto de ebullición en °C →		← Valencia						
Punto de fusión °C →		← Símbolo						
Densidad (g/ml) →		← Estructura atómica						
		← Nombre						

		18					
		2					
		He					
		Helio					
		13	14	15	16	17	18
5	6	7	8	9	10		
B	C	N	O	F	Ne		
Boro	Carbono	Nitrogeno	Oxígeno	Flúor	Neón		
13	14	15	16	17	18		
Al	Si	P	S	Cl	Ar		
Aluminio	Silicio	Fósforo	Azufre	Cloro	Argón		
11	12	29	30	31	32	33	34
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Cobre	Cinc	Gaio	Germanio	Arsénico	Selenio	Bromo	Criptón
47	48	49	50	51	52	53	54
Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
Plata	Cadmio	Indio	Estaño	Antimonio	Teluro	Yodo	Xenón
79	80	81	82	83	84	85	86
Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
Oro	Mercurio	Taio	Plomo	Bismuto	Polonio	Astato	Radón

Figura 3.1: Segmento de la tabla periódica de los elementos. El número a la derecha del símbolo del elemento es el peso atómico. Debajo se da la estructura atómica en el estado básico. Los símbolos s, p, etc, representan los números cuánticos orbitales l=0, etc.

De aquí se observa que existe un gran número de compuestos semiconductores clasificados según la posición de sus elementos en la tabla periódica. Además pueden formarse soluciones sólidas entre ellos con nuevas propiedades ópticas y eléctricas. Estas soluciones pueden ser ternarias o con más elementos lo cual hace multiplicar el número de materiales existentes considerablemente.

Del total de materiales que existen nosotros utilizaremos los binarios por lo que analizaremos muy someramente algunas propiedades y características de los mismos. Los compuestos binarios son estequiométricos. Ejemplos de ellos son el GaAs, el CdTe, etc. La estructura más usual que se presenta es el Blenda de Zinc, también llamada escalerita. Este es el caso de muchos de los semiconductores binarios como el CdTe, GaAs, InO, HgTe y muchos otros. Algunos otros poseen la estructura de la wurzita (hexagonal) como el CdS a altas temperaturas, y otros presentan la estructura del NaCl como el PbTe y SnTe.

De los componentes binarios II-VI, entre ellos tenemos a ZnO, ZnS, CdO, CdS, CdTe, ZnTe, CdSe, ZnSe, HgS, HgSe, HgTe, que constituyen una familia de compuestos semiconductores poseedores de un sinnúmero de propiedades interesantes para la aplicación tecnológica. Nosotros trabajaremos con los materiales siguiente: CdTe, ZnTe y ZnSe. Todos ellos resultan de la unión de un elemento del grupo II de la tabla periódica, el catión, con uno del grupo VI, el anión. El enlace entre átomos es de naturaleza iónico covalente, por tanto tiene cierto carácter polar. La disposición de los enlaces es tetraédrica, de manera que estos compuestos cristalizan según la red característica del sulfuro de zinc o blenda (ver figura 3.2). La estructura cristalina de la blenda (grupo espacial T_d^2) consiste en una red cúbica centrada en las caras (fcc) con una base de dos átomos, uno de ellos situado en el

origen de coordenadas y el otro sobre la diagonal de la celdilla unidad en la posición $\frac{a_0(1, 1, 1)}{4}$ (a_0 es el parámetro de la red cúbica fcc); cada posición se encuentra en el centro de un tetraedro regular cuyos vértices están ocupados por iones de otro tipo, permitiendo así que cada átomo comparta un promedio de cuatro electrones con sus vecinos para formar los enlaces. De aquí proviene la estequiometría de estos compuestos.

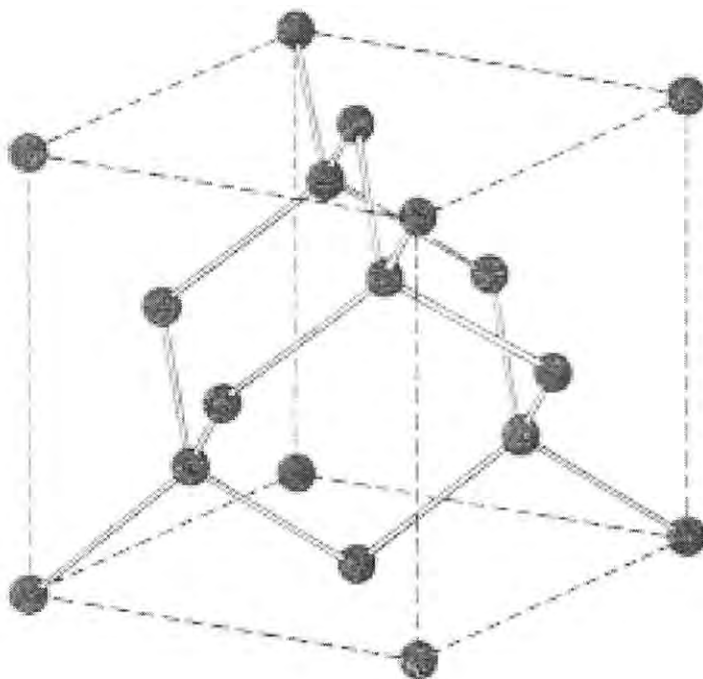


Figura 3.2: Estructura cristalina de los compuestos binarios II-VI.

Su celda de Wigner-Seitz es un octaedro, mientras que su Zona de Brillouin es un dodecaedro truncado. En esta última se distinguen los puntos de alta simetría

$\Gamma = (0, 0, 0)$, $X = (1, 0, 0)$, $\Lambda = \lambda(1, 0, 0)$, $\Gamma = (0 < \lambda < \lambda_{ZB} = 1)$ etc. Esto se puede observar en la figura 3.3

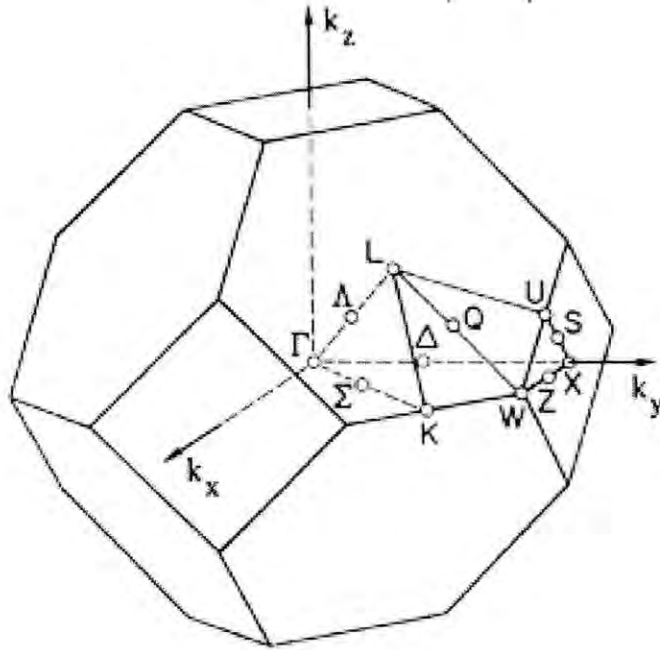


Figura 3.3: Primera zona de Brillouin de una red fcc.

Por otro lado los compuestos II-VI poseen un interesante rango del parámetro de la red desde 5.409 \AA para el ZnS a 6.482 \AA para el CdTe, así como bandas prohibidas muy variadas desde 3.6 eV para el ZnS (grande) hasta -0.15 eV para el HgTe, que es pequeño. En la figura 3.4 se muestra el gráfico reportado en [62] de energía de la banda prohibida (*bandgap* en inglés) contra el parámetro de la red, aquí se observa claramente esta relación para nuestros materiales.

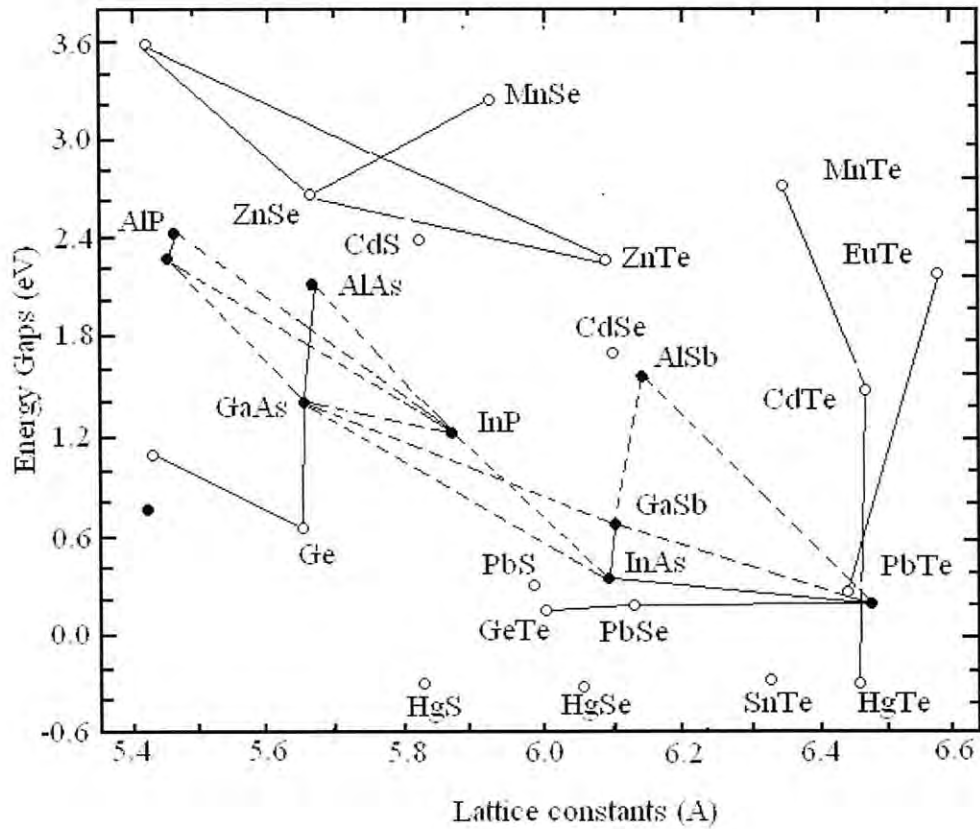


Figura 3.4: Energía de la banda prohibida contra parámetro de la red para diferentes semiconductores.

En la figura 3.5 mostramos también un gráfico de constante de la red contra mismatch de diferentes materiales semiconductores que nos serán útiles durante el desarrollo de la tesis para el cálculo de sistemas tensionados [63].

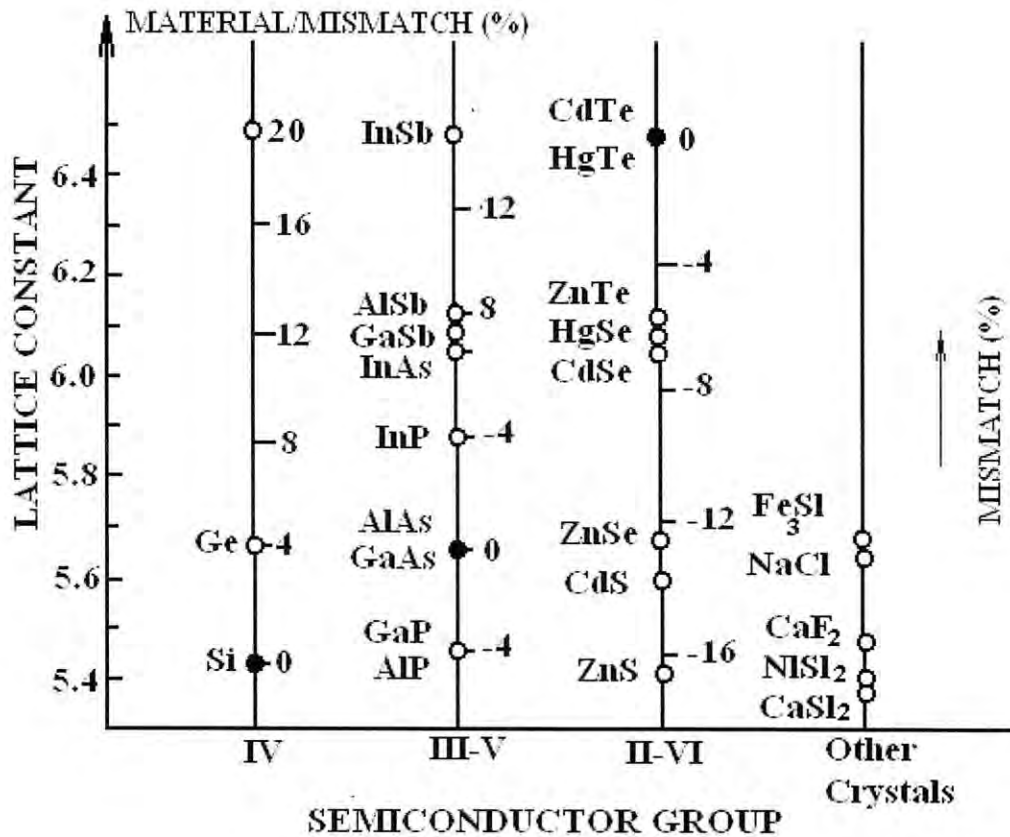


Figura 3.5: Constante de la red y mismatch para diferentes materiales.

En las direcciones de alta simetría en un cristal tridimensional se producen dos tipos de ondas elásticas: longitudinales, es decir, ondas de condensación-rarificación y transversales, que son, las ondas de deformación-desplazamientos. En el primer caso la dirección de propagación de la onda coincide con la dirección de las oscilaciones de los átomos del cristal. Las ondas transversales, que se propagan en dirección perpendicular al plano de oscilación de los átomos, tienen dos direcciones

principales de polarización, puesto que la onda transversal se puede descomponer en dos ondas transversales independientes, en las cuales las oscilaciones se producen por dos direcciones mutuamente perpendiculares.

Para el cristal volumétrico, que contiene S átomos en la celda elemental, debe haber $2S$ tipos de ondas transversales y S tipos de ondas longitudinales, en total $3S$ tipos de ondas, es decir, debe haber $3S$ diferentes ramas de oscilaciones. En otras palabras, a cada valor de κ le corresponden $3S$ oscilaciones, que se diferencian por la frecuencia y la polarización. Tres ramas de oscilaciones son acústicas. Para ellas, en la región de ondas largas, o sea, para pequeños valores de κ se tiene que $V_f = V_{gr} = V_s$, es decir, las velocidades de fase y de grupo son iguales a la velocidad del sonido.

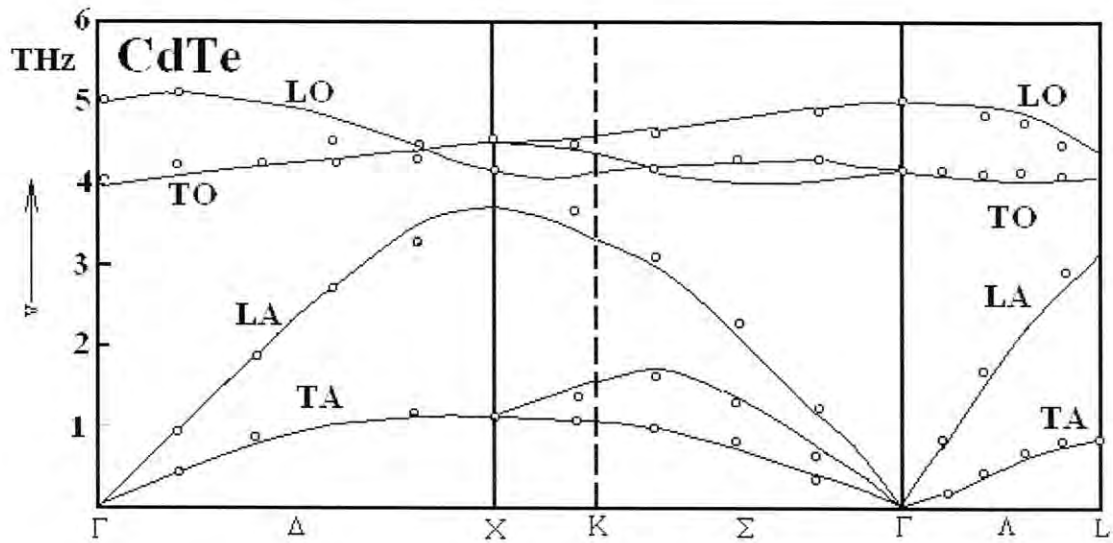


Figura 3.6: Curva de dispersión de los fonones del CdTe en el volumétrico.

En este caso, la frecuencia de las oscilaciones longitudinales es mayor que la frecuencia de las oscilaciones transversales, ya que la velocidad de las ondas elásticas longitudinales es mayor que la velocidad de las ondas transversales. Las demás ramas (3S-3) son ópticas, en las cuales $V_f \rightarrow \infty$ cuando $\kappa \rightarrow 0$, es decir, la velocidad de fase tiende a infinito cuando el vector de onda tiende a cero. Los compuestos binarios que nosotros trabajaremos (CdTe, ZnTe y ZnSe) al tener dos átomos en su celda unitaria, poseen tres ramas acústicas y tres ramas ópticas, en su espectro fonónico. Esto se puede observar en la figura 3.6 para el CdTe, reportada por Kagata, H. M. y Soma, donde las curvas de dispersión del fonón (línea sólida) es comparada con la data de dispersión neutrónica [64]. Para el caso del compuesto binario ZnTe también se puede observar (ver figura 3.7) que posee tres ramas acústicas y tres ramas ópticas, en su espectro fotónico. En [64] se reporta por Rosen, D. L. y colaboradores las curvas de dispersión del fonón según el modelo de fuerza (línea sólida) y es comparada con la data de dispersión de neutrones inelásticos, donde de forma análoga aparecen tres ramas acústicas y tres ramas ópticas.



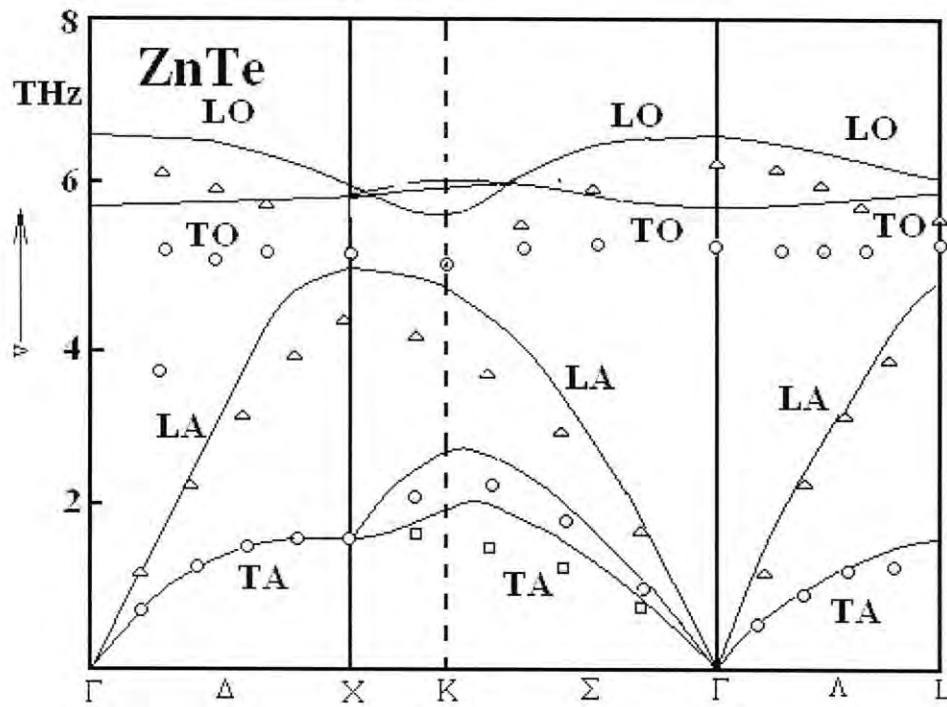


Figura 3.7: Curva de dispersión de los fonones del ZnTe en el volumétrico.

Finalmente, presentamos la curva de dispersión del ZnSe para el volumétrico en la figura 3.8. La misma muestra las curvas de dispersión de fonones (línea sólida) la cual es comparada con la data de dispersión de neutrones inelásticos [64], en dicha figura se puede observar claramente las tres ramas acústicas y las tres ramas ópticas.

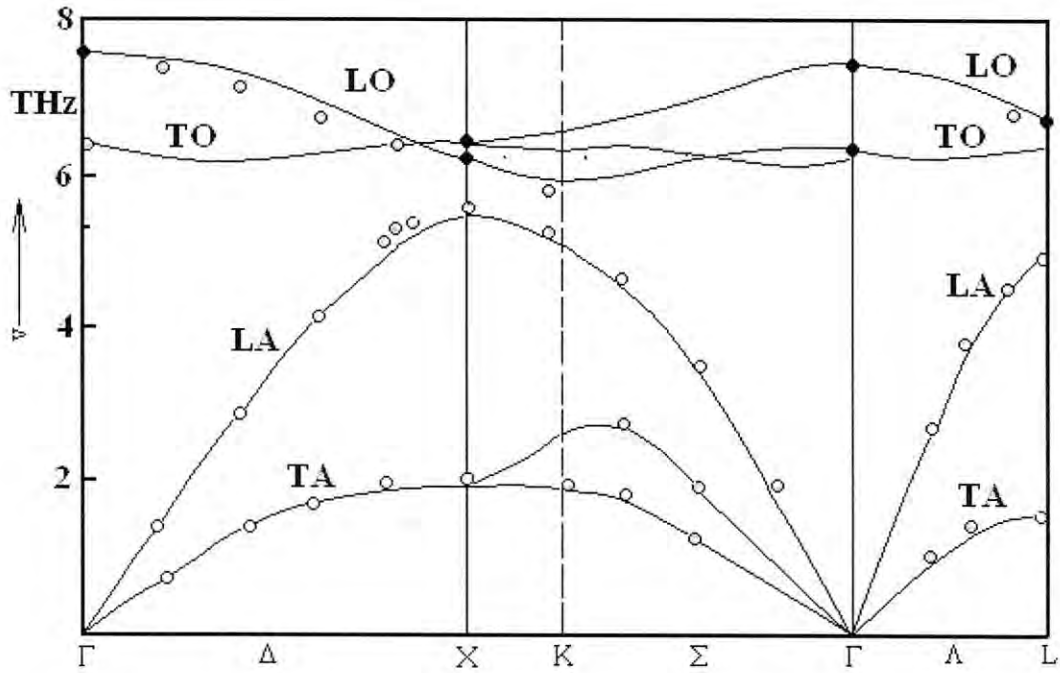


Figura 3.8: Curva de dispersión de los fonones del ZnSe en el volumétrico.

En ciertas direcciones de alta simetría éstas se degeneran. De las tres acústicas dos son transversales y una longitudinal, de igual forma ocurre para el caso de las ramas ópticas. De ahí que se utilicen los subíndices A y O para diferenciar las ramas acústicas de las ópticas y los subíndices T y L para diferenciar las que tienen carácter transversal o longitudinal. En un entorno del punto de simetría $\Gamma = (0,0,0)$ las ramas ópticas, que en este caso son las que nos interesan, tienen una ley de dispersión que se ajusta bastante bien a la ley:

$$\omega^2(\boldsymbol{\kappa}) = \omega_0^2 - \beta^2 \kappa^2 \quad (3.1)$$

por lo que cada rama se puede caracterizar por el valor de su frecuencia en $\Gamma(\kappa = 0)$ y su parámetro de parabolicidad β .

En cuanto a los parámetros ω_0 y β no siempre existen datos confiables; sólo los experimentos arrojan resultados para el primero de estos dos parámetros, en cuanto al valor de β este hay que estimarlo de las curvas de dispersión reportadas por diferentes autores.

3.2 Parámetros del volumétrico y empalme completo.

A continuación mostraremos a través de una tabla (ver tabla 3.1) los parámetros que usaremos en lo que resta de la tesis. Algunos de ellos fueron estimados; otros fueron extraídos de diferentes publicaciones [57-61, 65-68].

Para la descripción de las oscilaciones usaremos el campo de vector desplazamiento \mathbf{u} , que representa el desplazamiento relativo de los dos iones involucrados. Otros parámetros físicos del medio son: $\rho = \frac{\bar{M}}{V_c}$ la densidad de masa reducida, \bar{M} es la masa reducida de los iones, V_c , volumen de la celda unitaria, $\omega_{T(L)}$ son las frecuencias transversales y longitudinales del volumétrico, $\beta_{T(L)}$ son los parámetros que describen la dispersión de las oscilaciones transversales y longitudinales y $\varepsilon_{0(\infty)}$ son las constantes dieléctricas de baja y alta frecuencia.

Parámetros	CdTe	ZnTe	ZnSe
ϵ_0	10.2	8.7	9.1
ϵ_∞	7.1	8.3	5.8
$\omega_{LO} (\text{cm}^{-1})$	170	210	250
$\omega_{TO} (\text{cm}^{-1})$	144.7	180	205
$a(\text{Å})$	6.482	6.104	5.6676
$\beta_L^2 (10^{-12})$	2.24 ± 0.14	0.9 ± 0.05	2.34 ± 0.15
$\beta_T^2 (10^{-12})$	-0.51 ± 0.03	-0.14 ± 0.02	0.32 ± 0.02
$\rho_{\text{red}} (\text{g} / \text{cm}^3)$	0.3663	0.3180	0.3286
$\rho (\text{g} / \text{cm}^3)$	5.84	5.64	5.264
$m_{\text{catión}} (m_p)$	112.4	65.37	65.37
$m_{\text{anión}} (m_p)$	127.6	127.6	78.96

Tabla 3.1: Parámetros del volumétrico o los materiales II-VI (CdTe, ZnTe y ZnSe).

Aquí m_p es la masa del protón.

Las ecuaciones de movimiento son:

$$\rho(\omega^2 - \omega_{TO}^2)\mathbf{u} = \alpha \nabla \varphi(\mathbf{r}) + \rho \beta_L^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} - \rho \beta_T^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} = 0 \quad (3.2)$$

$$\nabla^2 \varphi(\mathbf{r}) = \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (3.3)$$

donde:

$$4\pi\alpha^2 = \omega_{TO}^2 \rho (\epsilon_0 - \epsilon_\infty) = \rho \epsilon_\infty (\omega_L^2 - \omega_T^2) \quad (3.4)$$

El campo eléctrico acoplado a las oscilaciones mecánicas está dado por:

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi \quad (3.5)$$

y se corresponde al tratamiento cuasiestacionario de las ecuaciones de Maxwell en el límite en que se desprecian los efectos de retardo ($c \rightarrow \infty$). Siguiendo el método desarrollado por nosotros en el capítulo anterior obtenemos el espacio de soluciones, escrito en forma de matrices de una columna. Las soluciones presentadas tienen paridad definida. El vector columna es:

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} X(z) \\ Y(z) \\ Z(z) \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

donde z es la dirección perpendicular a las capas.

El espacio general de soluciones está formado por dos subespacios independientes:

- Soluciones puramente transversales.
- Soluciones acopladas.

Las soluciones del segundo subespacio se desacoplan en transversales puras y longitudinales puras para determinadas direcciones de simetría.

Atendiendo a la paridad de las soluciones acopladas se clasifican en soluciones Z pares y soluciones Z impares. Para las soluciones pares tenemos:

$$\begin{pmatrix} -\kappa \sin(k_L z) \\ ik_L \cos(k_L z) \\ i \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} \sin(k_L z) \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} k_T \sin(k_T z) \\ ik \cos(k_T z) \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} \frac{i\alpha\kappa}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} \sinh(\kappa z) \\ \frac{\alpha\kappa}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} \cosh(\kappa z) \\ \sinh(\kappa z) \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

Para las soluciones impares tenemos:

$$\begin{pmatrix} i\kappa \cos(k_L z) \\ -k_L \sin(k_L z) \\ \frac{4\pi\alpha}{\epsilon_\infty} \cos(k_L z) \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} -ik_T \cos(k_T z) \\ -\kappa \sin(k_T z) \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} \frac{i\alpha\kappa}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} \cosh(\kappa z) \\ \frac{\alpha\kappa}{\rho(\omega^2 - \omega_T^2)} \sinh(\kappa z) \\ \cosh(\kappa z) \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

donde:

$$k_{L(T)} = \sqrt{\frac{\omega_{L(T)}^2 - \omega^2}{\beta_{L(T)}^2} - \kappa^2} \quad (3.9)$$

Las condiciones de empalme en las intercaras son:

- Continuidad del campo de elongaciones de \mathbf{u} y del potencial electrostático φ en la intercara.
- Continuidad en la intercara del vector

$$\boldsymbol{\tau}_N = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{N} \quad (3.10)$$

donde \mathbf{N} es el vector unitario normal a la intercara.

Como las intercaras están perpendiculares a Z la componente normal sería:

$$\boldsymbol{\tau}_{ij} \cdot \mathbf{e}_z = \begin{pmatrix} \tau_{xz} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zz} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \rho\beta_T^2 \frac{\partial U_z}{\partial z} \\ \rho\beta_T^2 \left(\frac{\partial U_y}{\partial z} + i\kappa U_z \right) \\ i\rho\kappa(\beta_L^2 - 2\beta_T^2)U_y + \rho\beta_L^2 \frac{\partial U_z}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Esto se deriva de que el tensor de tensiones $\boldsymbol{\tau}$ está dado por:

$$\tau_{ij} = -\rho(\beta_L^2 - 2\beta_T^2)\delta_{ij}\nabla \cdot \mathbf{u} - \rho\beta_T^2(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i) \quad (3.12)$$

Donde la delta de Kronecker toma los siguientes valores:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \quad (3.13)$$

- Continuidad en las interfaces de D_N , que es la componente normal del vector desplazamiento eléctrico \mathbf{D} , el cual está dado por:

$$\mathbf{D} = 4\pi\alpha\mathbf{u} - \varepsilon_\infty \nabla\phi \quad (3.14)$$

$$D_z = 4\pi\alpha u_z - \varepsilon_\infty \frac{\partial\phi}{\partial z} \quad (3.14a)$$

Utilizando el mismo procedimiento que en el capítulo anterior, es decir, partiendo de las mismas ecuaciones de movimiento y empalmando las soluciones obtenemos soluciones que se clasifican de acuerdo a su paridad [65-68]. Para los estados con potencial impar (OPS) la solución la podemos escribir de forma compacta de la siguiente forma:

Caso impar

$$\det \begin{pmatrix} A & kB & \alpha kC \\ kD & E & \alpha kF \\ \alpha G & \alpha H & I \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

$$A = \begin{pmatrix} k_{T(P)} \sin(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & -k_{T(B)} \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \\ \rho_{(P)} \beta_{T(P)}^2 (k_{T(P)} - k^2) \cos(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & \rho_{(B)} \beta_{T(B)}^2 (k_{T(B)} + k^2) \cos(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} -\sin(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & -i \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \\ -2\rho_{(P)} \beta_{T(P)}^2 k_{L(P)} \cos(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & 2i\rho_{(B)} \beta_{T(B)}^2 k_{L(B)} \cos(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} \frac{i \sinh(k \frac{d}{2})}{\rho_{(P)} (\omega^2 - \omega_T^2)} & \frac{-i \exp(-k \frac{d}{2})}{\rho_{(B)} (\omega^2 - \omega_T^2)} \\ \frac{2ik\beta_{T(P)}^2}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \cosh(k \frac{d}{2}) & \frac{2i\alpha k^2 \beta_{T(B)}^2 \exp(-k \frac{d}{2})}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} \cos(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & -i \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \\ -2\rho_{(P)} \beta_{T(P)}^2 k_{L(P)} \cos(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & 2\rho_{(B)} \beta_{T(B)}^2 k_{T(B)} \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$E = \begin{pmatrix} k_{L(P)} \cos(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & -ik_{L(B)} \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \\ -2\rho_{(P)} [k^2(\beta_{L(P)}^2 - 2\beta_{T(P)}^2) + \beta_{L(P)}^2 k_{L(P)}^2] \sin(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & -i\rho_{(B)} [k^2(\beta_{L(B)}^2 - 2\beta_{T(PB)}^2) + \beta_{L(B)}^2 k_{L(PB)}^2] \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$F = \begin{pmatrix} \frac{i \cosh(k \frac{d}{2})}{\rho_{(P)} (\omega^2 - \omega_T^2)} & \frac{-i \exp(-k \frac{d}{2})}{\rho_{(B)} (\omega^2 - \omega_T^2)} \\ \frac{2ik\beta_{T(P)}^2}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \sinh(k \frac{d}{2}) & \frac{2ik\beta_{T(B)}^2 \exp(-k \frac{d}{2})}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \end{pmatrix}$$

$$G = \begin{pmatrix} 4\pi \cos(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & -4\pi \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{4i\pi}{\epsilon_{\infty(P)}} \sinh(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & \frac{4i\pi}{\epsilon_{\infty(B)}} \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$I = \begin{pmatrix} i \cosh(k \frac{d}{2}) \left(\frac{4\pi\alpha^2}{\rho_{(P)}(\omega^2 - \omega_T^2)} - \epsilon_{\infty(P)} \right) & -i \exp(-k \frac{d}{2}) \left(\frac{4\pi\alpha^2}{\rho_{(B)}(\omega^2 - \omega_T^2)} - \epsilon_{\infty(B)} \right) \\ -i \sinh(k \frac{d}{2}) & i \exp(-k \frac{d}{2}) \frac{2ik\beta_{T(B)}^2}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \end{pmatrix}$$

Para el caso par

$$\det \begin{pmatrix} A' & kB' & \alpha kC' \\ kD' & E' & \alpha kF' \\ \alpha G' & \alpha H' & I' \end{pmatrix} \tag{3.16}$$

$$A' = \begin{pmatrix} -k_{T(P)} \cos(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & ik_{T(B)} \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \\ \rho_{(P)}\beta_{T(P)}^2 (k_{T(P)} - k^2) \sin(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & -i\rho_{(B)}\beta_{T(B)}^2 (k_{T(B)} + k^2) \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$B' = \begin{pmatrix} \cos(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & -\exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \\ -2\rho_{(P)}\beta_{T(P)}^2 k_{L(P)} \sin(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & 2\rho_{(B)}\beta_{T(B)}^2 k_{L(B)} \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$C' = \begin{pmatrix} \frac{\cosh(k \frac{d}{2})}{\rho_{(P)}(\omega^2 - \omega_T^2)} & -\frac{\exp(-k \frac{d}{2})}{\rho_{(B)}(\omega^2 - \omega_T^2)} \\ \frac{2k\beta_{T(P)}^2}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \sinh(k \frac{d}{2}) & \frac{2\alpha k^2 \beta_{T(B)}^2 \exp(-k \frac{d}{2})}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \end{pmatrix}$$

$$D' = \begin{pmatrix} -\sin(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & -i \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \\ -2\rho_{(P)}\beta_{T(P)}^2 k_{T(P)} \cos(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & 2i\rho_{(B)}\beta_{T(B)}^2 k_{T(B)} \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$E' = \begin{pmatrix} -k_{L(P)} \sin(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & k_{L(B)} \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \\ -\rho_{(P)} [k^2 (\beta_{L(P)}^2 - \beta_{T(P)}^2) + \beta_{L(P)}^2 k_{L(P)}^2] \cos(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & \rho_{(B)} [k^2 (\beta_{L(B)}^2 - \beta_{T(B)}^2) + \beta_{L(B)}^2 k_{L(B)}^2] \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$F' = \begin{pmatrix} \frac{\sinh(k \frac{d}{2})}{\rho_{(P)} (\omega^2 - \omega_T^2)} & \frac{\exp(-k \frac{d}{2})}{\rho_{(B)} (\omega^2 - \omega_T^2)} \\ \frac{2ik\beta_{T(P)}^2}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \cosh(k \frac{d}{2}) & \frac{2k\beta_{T(B)}^2 \exp(-k \frac{d}{2})}{(\omega^2 - \omega_T^2)} \end{pmatrix}$$

$$G' = \begin{pmatrix} -4\pi \sin(k_{T(P)} \frac{d}{2}) & -4i\pi \exp(-k_{T(B)} \frac{d}{2}) \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \frac{4i\pi}{\epsilon_{\infty(P)}} \cosh(k_{L(P)} \frac{d}{2}) & -\frac{4\pi}{\epsilon_{\infty(B)}} \exp(-k_{L(B)} \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

$$I' = \begin{pmatrix} \sinh(k \frac{d}{2}) \left(\frac{4\pi\alpha^2}{\rho_{(P)} (\omega^2 - \omega_T^2)} - \epsilon_{\infty(P)} \right) & \exp(-k \frac{d}{2}) \left(\frac{4\pi\alpha^2}{\rho_{(B)} (\omega^2 - \omega_T^2)} - \epsilon_{\infty(B)} \right) \\ \cosh(k \frac{d}{2}) & -\exp(-k \frac{d}{2}) \end{pmatrix}$$

Aplicando el empalme completo, es decir, resolviendo el determinante podemos calcular los modos fonónicos ópticos para pozos cuánticos de cualquier material emparedado con cualquier otro material polar.

3.3 Efecto de la tensión en las relaciones de dispersión de los fonones ópticos.

En la práctica se fabrican y estudian estructuras formadas por muy diversos compuestos, aunque las estructuras GaAs y AlAs son de hecho de las más estudiadas por sus propiedades. Esta combinación de materiales tiene una propiedad que facilita mucho el crecimiento de heteroestructuras: ambos compuestos tienen la misma red cristalina y también distancias interatómicas muy parecidas. Eso significa que una capa de GaAs y otra de AlAs se pueden empalmar sin dificultad y por tanto un material se puede crecer sobre el otro sin mayores problemas. Pero esto no ocurre con otros compuestos. Por ejemplo, entre el GaP y el GaAs hay una diferencia en las distancias interatómicas de un 3.7 % y entre el AlAs y el InAs de un 7 %, aproximadamente. Una diferencia tan sólo de un 3.7 % ya presenta dificultades en la práctica.

Para que un material pueda depositarse sobre el otro tienen que producirse deformaciones que fuercen las posiciones atómicas para poder coincidir, y esto ocurre de manera muy anisótropa. Por ejemplo, si se produce una contracción en los planos de crecimiento, entonces se tiene que producir una dilatación en la dirección (perpendicular) de crecimiento cristalino. Estas deformaciones se distribuyen en los distintos materiales componentes según los espesores de las láminas que se crezcan. Estas deformaciones no son en absoluto pequeñas desde el punto de vista físico. Provocan cambios significativos en los niveles de energía, en las frecuencias longitudinales y transversales de los fonones en el volumen, y sobre todo, tienen otro efecto importantísimo: cambian las simetrías. La distorsión de la red cristalina cambia su simetría y esto cambia las simetrías de los estados electrónicos resultantes, lo que significa que cambia su composición espectral orbital. Estas modificaciones tienen consecuencias de largo alcance. Por ejemplo, los cambios en las masas efectivas y en las densidades de estados pueden disminuir el umbral de funcionamiento (corriente eléctrica mínima necesaria) para la acción láser. Hay una investigación muy activa en

el campo de las heteroestructuras con distorsiones, en el que, entre otros aspectos interesantes, aumenta la variedad de los parámetros de diseño en la ingeniería del material. Otro aspecto práctico muy importante es el objetivo final, que sería importantísimo, de integrar las tecnologías del Si y del GaAs, que tienen parámetros cristalinos demasiado diferentes para poder crecer el uno sobre el otro, pero que se podrían integrar a través de materiales intermedios que relajen las deformaciones y tensiones necesarias.

El estudio de algunas propiedades ópticas y electrónicas de estos sistemas tales como GaAs crecidos sobre substratos de Si o CaF_2 han sido ya estudiados por diferentes autores [68], otros autores han realizado estudios de la estructura, propiedades y aplicaciones de estos sistemas [70-72]. Por otro lado también se han realizado estudios de fonones locales en SL basado en el modelo de fuerza constante en el plano [73]. Sin embargo el estudio de estos sistemas en los materiales binarios II-VI no ha sido tan intenso como los anteriores, sólo ésta comenzó de forma intensa a partir de 1991 con el logro del primer diodo láser de inyección azul-verde a 77 K [74]

3.4 Espesor crítico.

Supongamos dos materiales A y B de igual estructura cristalina pero distintos parámetros de red, a_A y a_B . En una intercara plana entre los dos cristales, que supondremos que se mantienen perfectos, caben dos posibilidades extremas:

- Las dos redes cristalinas pueden deformarse biaxialmente de modo uniforme, una en compresión y otra en extensión, lo que requiere cierta energía elástica,

hasta que el parámetro de red en el plano de ambas sea el mismo. Los átomos pueden enlazarse a través de la intercara, formando una *epitaxia coherente*: el parámetro de red es el mismo para toda la heteroestructura, que se denomina *pseudo mórfic*. Los parámetros de red perpendicular son distintos entre sí y a los originales, debido a que un estiramiento en el plano paralelo va acompañado de un encogimiento en la dirección perpendicular, y viceversa (ver figura 3.9).

- Las dos redes cristalinas pueden permanecer sin deformar. La epitaxia no es coherente y la heteroestructura se dice que está *relajada*.

Si crecemos B sobre un substrato A semi-infinito en una estructura pseudo mórfica, la energía acumulada en B es proporcional al espesor crecido h_B . Si la estructura estuviera relajada también habría un exceso de energía (respecto a la de los cristales sin formar intercara), debido a los enlaces no saturados. Este exceso es una propiedad de la intercara y no depende del espesor crecido. Por tanto, cuando h_B tiende a cero, la situación energéticamente favorable es la heteroestructura pseudo mórfica, pero existirá un valor h_C del espesor crecido (espesor crítico) para el que empiece a ser favorable la estructura relajada.

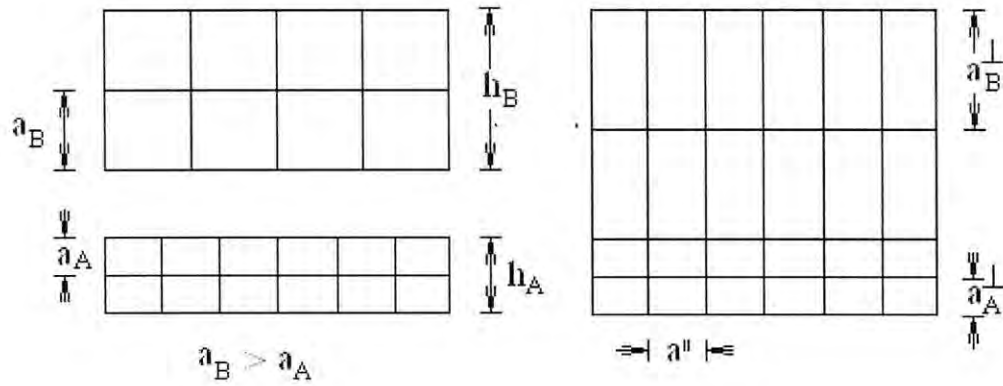


Figura 3.9: Deformaciones biaxiales en una heteroepitaxia: (a) Materiales A y B sin deforma. (b) Heteroestructura pseudomórfica formada al crecer B sobre A.

3.5 Deformaciones en superredes y pozos cuánticos tensados.

Describiremos las deformaciones en superredes y pozos cuánticos tensados mediante el formalismo de la teoría elástica [76].

El estado de deformación de un sólido se describe mediante un *tensor de deformación* (strain tensor) ϵ_{ij} ($ij = 1, 2, 3$). Sus componentes independientes son las *componentes de deformación* ϵ_k ($k = 1, \dots, 6$), dadas por:

$$\epsilon_1 = \epsilon_{11}; \quad \epsilon_2 = \epsilon_{22}; \quad \epsilon_3 = \epsilon_{33}; \quad \epsilon_4 = 2\epsilon_{23}; \quad \epsilon_5 = 2\epsilon_{31}; \quad \epsilon_6 = 2\epsilon_{12} \quad (3.17)$$

Para que varíe el estado de deformación es necesario ejercer esfuerzos mecánicos descritos por el tensor de esfuerzos (*stress tensor*) τ_{ij} ($ij = 1, 2, 3$). A partir de τ_{ij} se definen las componentes de esfuerzo τ_k como:

$$(k = 1, \dots, 6) \quad \tau_1 = \tau_{11}; \quad \tau_2 = \tau_{22}; \quad \tau_3 = \tau_{33}; \quad \tau_4 = \tau_{23}; \quad \tau_5 = \tau_{31}; \quad \tau_6 = \tau_{12}$$

Entre esfuerzo y deformación existe la relación, a temperatura constante:

$$d\tau_i = \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial \varepsilon_j} \right)_{T(\varepsilon)} d\varepsilon_j = c_{ij} d\varepsilon_j \quad (3.18)$$

donde c_{ij} son las constantes elásticas (*stiffness coefficients*). Recíprocamente,

$$d\varepsilon_i = \left(\frac{\partial \varepsilon_i}{\partial \tau_j} \right)_{T(\tau)} d\tau_j = s_{ij} d\tau_j \quad (3.19)$$

donde las s_{ij} son las constantes de deformabilidad (*compliance coefficients*).

En los cristales con simetría cúbica, como los semiconductores II-VI, se cumple que:

$$\begin{aligned} c_{11} &= c_{22} = c_{33} \\ c_{12} &= c_{13} = c_{23} \\ c_{ij} &= 0 \quad \text{si } i \text{ ó } j = 4, 5, 6 \quad (\text{excepto } c_{44} = c_{55} = c_{66} \neq 0) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Utilizando las ecuaciones anteriores y la relación inversa entre s_{ij} y c_{ij} es trivial comprobar que para un esfuerzo uniaxial según la dirección [001] (es decir, todos los $\tau_i = 0$ excepto $\tau_3 = F$) se tiene que:

$$\frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} = -\frac{c_{11} + c_{12}}{c_{12}} \quad (3.21)$$

$$\varepsilon_y = \varepsilon_{xx} \quad (3.22)$$

mientras que para una presión hidrostática (es decir, $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = F$, los demás $\tau_j = 0$):

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} \quad (3.23)$$

En una superred tensada (SLS), las capas están sometidas a un esfuerzo biaxial: si la dirección de crecimiento es [001], $\tau_1 = \tau_2 = F$, y los demás $\tau_j = 0$ (lo que equivale a un esfuerzo hidrostático: $\tau_1 = \tau_2 = \tau_3 = F$, más uno uniaxial: $\tau_3 = F$). Se obtiene:

$$\frac{\varepsilon_{zz}}{\varepsilon_{xx}} = -2\frac{c_{12}}{c_{11}} \quad (3.24)$$

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{xx} \quad (3.25)$$

en cada capa

3.6 Efectos de la deformación sobre la estructura de bandas.

Aquí nos limitaremos a describir cualitativamente los efectos de una tensión biaxial sobre las bandas de un semiconductor.

Las bandas de conducción (BC) y valencia (BV) en las cercanías de $k = 0$ (punto Γ) para un semiconductor II-VI se representan en la figura 3.10.

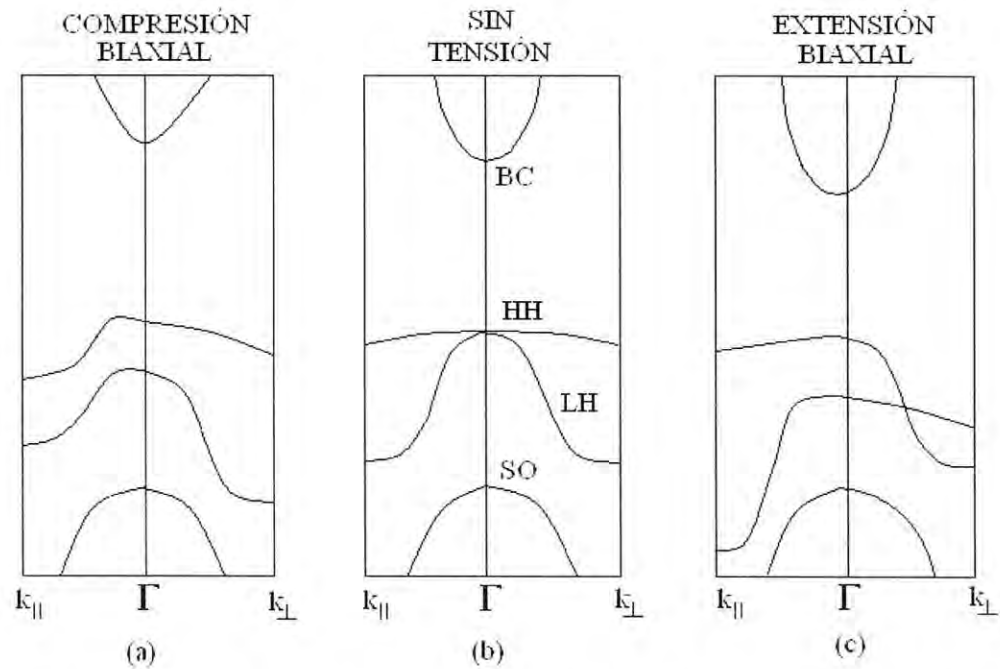


Figura 3.10: Efectos de la tensión biaxial en las bandas de un semiconductor II-VI

Para el material sin tensionar (b), las bandas de huecos pesados (HH) y huecos ligeros (LH) están degeneradas en Γ . Si el material forma parte de una heteroestructura tensionada, está sometido a una tensión biaxial que puede considerarse la suma de una hidrostática y otra uniaxial. La tensión hidrostática altera

el parámetro de red del semiconductor, y en consecuencia, la separación entre BC y BV: ésta aumenta para compresión, y disminuye para extensión. La componente uniaxial disminuye la simetría del cristal, consecuentemente, se rompe la degeneración de LH y HH en T y las bandas superiores de valencia dejan de tener simetría cúbica.

Cuando el material se coloca en un pozo cuántico, cada banda da lugar a una serie de niveles cuya energía está determinada por la masa m_{\perp} . Sin embargo, la densidad de estados asociados está determinada por la masa transversal m_{paralelo} .

En un pozo cuántico formado por un material en compresión biaxial, el nivel de huecos más alto en energía será el HH1; pero la masa en el plano para este nivel será ligera. Sin embargo, el hecho de que tengamos varios niveles confinados puede alterar esta imagen sencilla debido a la interacción entre bandas. En un pozo cuántico tensado la separación entre HH1 y LH1 depende del grado de tensión en el pozo, mientras que la separación entre HH1 y HH2 depende de la altura y anchura del pozo. El grado de tensión y la anchura del pozo pueden variarse independientemente dentro de ciertos límites. Esto es una propiedad única de los sistemas tensados, que le confiere gran versatilidad.

3.7. Efecto de la tensión en el cambio de la frecuencia de los fonones.

En diversas publicaciones [68,76-80] se han realizado investigaciones acerca de los cambios observados en la frecuencia de los fonones, así como se discute el efecto de deformación sobre las vibraciones de la red y su dependencia del ancho de

la capa crecida. En general se discute que para poder crecer un material sobre el otro deben coincidir las posiciones atómicas en el empalme entre los diferentes materiales, es decir, debe producirse una contracción en los planos de crecimiento de un material con respecto al otro provocando una dilatación en la dirección de crecimiento cristalino del mismo o viceversa.

En presencia de deformaciones, la ecuación de movimiento tiene la forma:

$$\bar{m} \ddot{U} = - \left(K_{ii}^{(0)} U_i + \sum_{klm} \frac{\partial K_{ik}}{\partial \xi_{lm}} \xi_{lm} U_k \right) \quad (3.26)$$

\bar{m} : masa reducida

$K_{ij}^{(0)}$: fuerza constante entre dos átomos sin tensionar ($K_{ij}^{(0)} = \bar{m} \omega_0^2$), siendo ω_0 la frecuencia sin tensionar.

$$\frac{\partial K_{ik}}{\partial \xi_{lm}} \xi_{lm} = K_{iklm}^{(1)} \xi_{lm} = K_{ikml}^{(1)} \xi_{ml} , \quad (3.27)$$

cambio que experimenta la constante producto del tensionamiento.

Para cristales cúbicos, teniendo en cuenta consideraciones termodinámica y de simetría, sólo existen tres componentes independientes del Tensor $K^{(1)}$

$$\begin{aligned} K_{1111}^{(1)} &= K_{2222}^{(1)} = K_{3333}^{(1)} = \bar{m} p \\ K_{1122}^{(1)} &= K_{2233}^{(1)} = K_{1133}^{(1)} = \bar{m} q \\ K_{1212}^{(1)} &= K_{2323}^{(1)} = \bar{m} r \end{aligned} \quad (3.28)$$

Teniendo en cuenta (3.26) y las consideraciones anteriores, se puede obtener la ecuación secular para el cambio de la frecuencia de los fonones ópticos en presencia de tensión:

$$\begin{vmatrix} p\xi_{xx} + q(\xi_{yy} + \xi_{zz}) - \lambda & 2r\xi_{xy} & 2r\xi_{xz} \\ 2r\xi_{xy} & p\xi_{yy} + q(\xi_{xx} + \xi_{zz}) - \lambda & 2r\xi_{xy} \\ 2r\xi_{xz} & 2r\xi_{xy} & p\xi_{zz} + q(\xi_{xx} + \xi_{yy}) - \lambda \end{vmatrix} \equiv 0 \quad (3.29)$$

donde

$$\lambda = \Omega^2 - \omega_0^2 \quad (3.30)$$

siendo:

$$\Omega \approx \omega_0 + \frac{\lambda}{2\omega_0} \quad (3.31)$$

Diagonalizando se obtiene:

$$\Omega_s = \omega_0 + 2\Delta\Omega_H - \frac{2}{3}\Delta\Omega \quad (3.32)$$

$$\Omega_d = \omega_0 + 2\Delta\Omega_H + \frac{1}{3}\Delta\Omega \quad (3.33)$$

$$\Delta\Omega_H = -\gamma\omega_0 \frac{S_{11} + 2S_{12}}{S_{11} + S_{12}} \varepsilon_{xx} \quad (3.34)$$

siendo:

$$\gamma = \frac{-(p + 2q)}{6\omega_0^2} \quad (3.35)$$

$$a_s = \frac{p-q}{2\omega_0^2} \quad (3.36)$$

Sustituyendo convenientemente obtenemos (ver [33, 45, 77,80]):

$$\omega(\varepsilon) = \omega_0 + 2\Delta\Omega_H + \frac{1}{3}\Delta\Omega \quad (3.37)$$

donde ω_0 es la frecuencia del fonón sin aplicarle tensionamiento, γ es el parámetro del modo de Grüneisen, a_s , es el parámetro de deformación de corte, ε_{xx} la componente en el plano del tensor de deformación.

De (3.33) podemos concluir que el cambio de la frecuencia está dado por la suma de dos contribuciones:

- La variación de la frecuencia ($\Delta\Omega_H$) causada por la parte hidrostática del Tensor de Deformación Elástica.
- La variación de la frecuencia ($\Delta\Omega$) causada por la parte uniaxial del Tensor de Deformación en las frecuencias fonónicas.

La componente en el plano del tensor de deformación ε_{xx}^i es obtenida por:

$$\varepsilon_{xx}^i = \frac{a_{\perp} - a_i}{a_i} \quad (3.38)$$

aquí ε_{xx}^i puede tomar valor positivo o negativo; por convenio tomaremos que si es positivo indica que en el material crecido sobre el otro se produce una deformación por dilatación y en el caso contrario se produce una deformación por compresión.

Si consideramos la configuración "free standing", la constante de la red a_{\perp} en el plano de la red se puede calcular a través de la siguiente expresión:

$$a_{\perp} = \frac{n_1 a_1^2 K_1 + n_2 a_2^2 K_2}{n_1 a_1 K_1 + n_2 a_2 K_2} \quad (3.39)$$

Donde n_i es el número de monocapas, a_i la constante de la red, la constante K_i es definida por:

$$K_i = (S_{11} + S_{12})^{-1} \quad (3.40)$$

aquí S_{11} y S_{12} son las componentes del Tensor de Deformación Elástica.

La ecuación (3.37) puede ser utilizada para la estructura Blenda de Zinc, es decir, en nuestros materiales si se sustituye ω_0 de forma apropiada por ω_{L0}^0 ó ω_{T0}^0 , es decir, por la frecuencias longitudinales y transversales sin tensionar.

En la tabla 3.2 exponemos los parámetros usados para el cálculo de la variación de la frecuencia de los fonones inducidos por esfuerzos, así como los resultados de nuestros cálculos.

Sobre los valores de a_s y γ hay muy poca información. Hasta donde sabemos el valor de γ ha sido experimentalmente determinado para ZnTe y el ZnSe, al mismo tiempo que no existe data experimental para el γ_{CdTe} . Como muestra la referencia [46] los valores de γ_{ZnTe} y γ_{ZnSe} son idénticos con una precisión de hasta el error experimental. Como aproximación, el valor de γ para el CdTe lo tomamos de forma idéntica al ZnTe y ZnSe.

Para el CdTe y el ZnTe, a_s no es conocido. Por falta de información de a_s para el CdTe y ZnTe, nosotros usamos el correspondiente valor conocido del ZnSe [36] para estos dos compuestos.

Parámetros	CdTe/ZnTe	ZnTe/CdTe	ZnSe/ZnS
S_{11} (10^{-11} Pa)	4.23	2.40	2.27
S_{12} (10^{-11} Pa)	-1.72	-0.87	-0.78
γ	1.7	1.7	1.7
a_s	0.6	0.6	0.6
ω_{L0}^T (cm^{-1})	175.89	196.52	268.8
ω_{L0}^T (cm^{-1})	149.7	168.45	225.52
ϵ_{xx}	-0.058	0.062	-0.045
K	0.3984	0.6536	0.67
$\Delta\Omega_H^{LO}$ (cm^{-1})	5.28	-9.52	9.8
$\Delta\Omega_H^{TO}$ (cm^{-1})	4.49	-8.16	8.22
$\Delta\Omega^{LO}$ (cm^{-1})	-14.02	16.69	14.02
$\Delta\Omega^{TO}$ (cm^{-1})	-11.93	14.31	11.77
a_{\perp}	6.104	6.482	5.4102

Tabla 3.2: Parámetros usados para el cálculo del corrimiento de las frecuencias fonónicas así como los valores calculados.

Argumentos teóricos indican que tanto γ como a_s dependen esencialmente de la ionización de los compuestos. Debido a que el CdTe, el ZnTe y el ZnSe tienen

aproximadamente la misma ionización, la diferencia en los valores de γ y a_s se espera que sea pequeña entre estos compuestos [46].

Los valores de S_{11} y S_{12} fueron tomados de la referencias [64] pero los mismos también pueden ser calculados a través de las siguientes ecuaciones:

$$S_{11} = \frac{C_{11} + C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})} \quad (3.41)$$

$$S_{12} = \frac{C_{12}}{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})} \quad (3.42)$$

donde los valores de C_{11} y C_{12} se encuentran en Landolt-Börnstein [64].

De la tabla se pueden comparar los valores calculados por nosotros con los valores para sistemas sin tensionar [80]. Por otro lado, podemos también comparar los resultados de los valores de frecuencias calculados por nosotros con los valores experimentales que reportan diferentes artículos. Por ejemplo Fromherz y colaboradores [81] reportan para superredes de tres monocapas valores de ω_{TO} para el CdTe, el ZnTe y ZnSe de 150.3, 173.6 y 269.3 cm^{-1} respectivamente, estos valores nos permite realizar la comparación arrojando una buena concordancia. Veamos esto a continuación:

ω	Valor exp.	Sin tensionamiento	Tensionado
CdTe(T)	150.3	145.2	150.3
ZnTe(L)	173.6	170.5	172.1
ZnSe(L)	269.3	268.8	270.0

A continuación mostramos las curvas de $\omega(\kappa)$ para pozos tensionados de ancho de tres monocapas, al igual que en el caso de los sistemas no tensionados no incluimos las curvas de dispersión de los modos transversales horizontales. A continuación analizaremos las características comunes y las diferencias entre los sistemas tensionados y los sin tensionar.

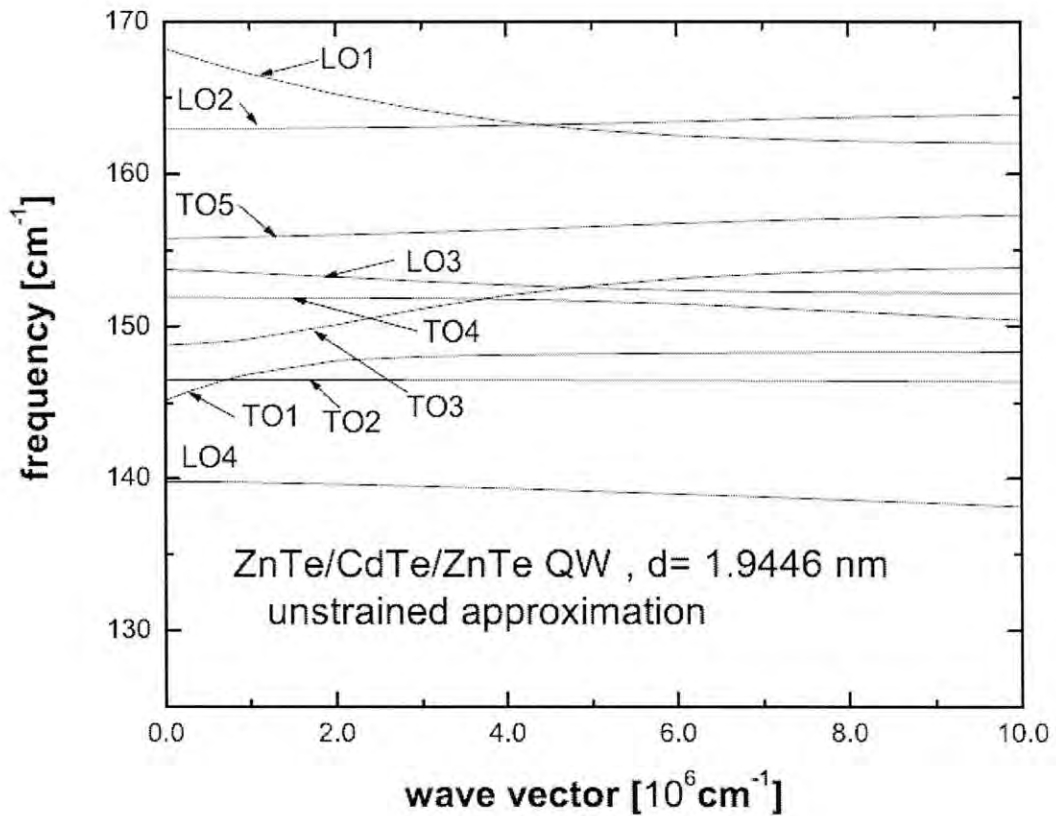


Figura 3.11: Relaciones de dispersión del CdTe para un ancho de tres monocapas sin tensionamiento.

En la figura se muestra las relaciones de dispersión del pozo cuántico para un ancho de 3 monocapas. Los modos están etiquetados de acuerdo a su carácter en $\kappa = 0$. Como se observa hay una secuencia inicial de estados longitudinales y otra de estados transversales, la frecuencia de estados transversales es de frecuencia creciente, tanto para el pozo sin tensionamiento como el tensionado en correspondencia con el valor negativo de β_T reportado por nosotros en [65]. Aquí se observa claramente que las ramas con diferente paridad, es decir, las curvas de los estados con potencial impar OPS cruzan a las de los EPS y viceversa, mientras que las curvas con identidad de paridad, es decir, del mismo grupo no se cruzan, originan bandas prohibidas en el espectro.

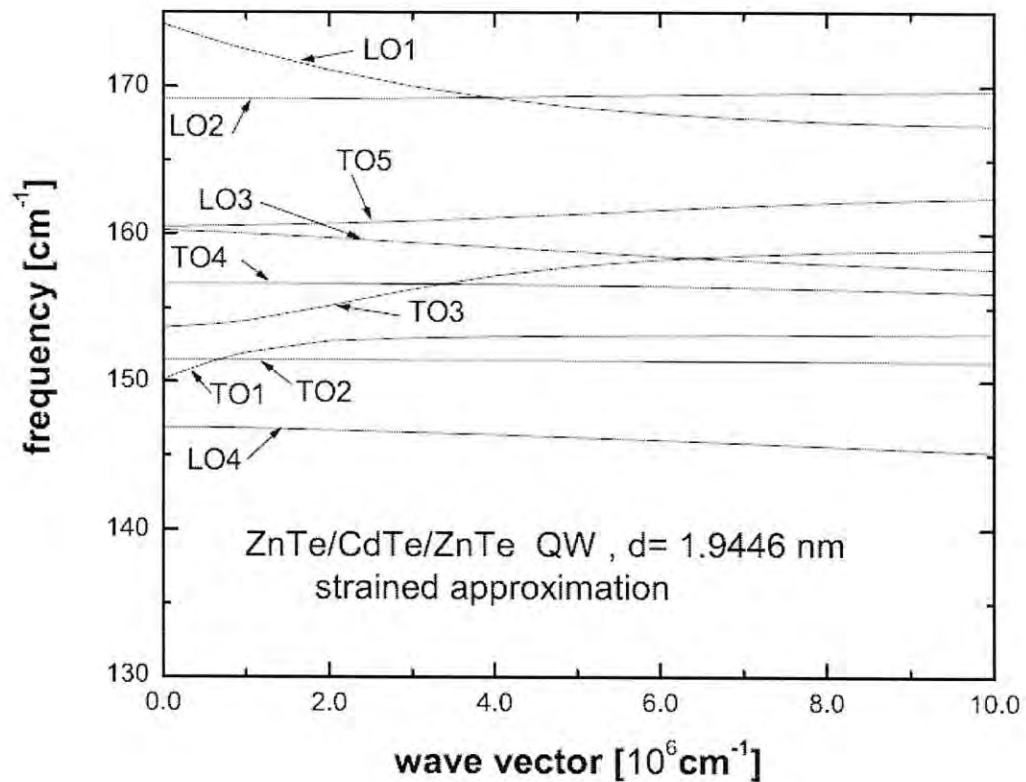


Figura 3.12: Relaciones de dispersión del CdTe para un ancho de tres monocapas con tensionamiento.

Para $\kappa \neq 0$ las distintas ramas son casi planas excepto en regiones de κ donde son dispersivas.

Si comparamos la figura (3.11) que corresponde al pozo sin tensionamiento con la figura con la del pozo con tensión nos damos cuenta de que el espectro fonónico tiene aproximadamente la misma forma, sólo lo diferencia en el corrimiento de la frecuencia que sin tensionar es de 168 y tensionada de 175 cm^{-1} aproximadamente, es decir, se produce un corrimiento de unos 7 cm^{-1} para el caso de las frecuencias longitudinales y para el caso de las transversales de 145 a 150 cm^{-1} , es decir, unos 5 cm^{-1} .

Capítulo 4

Modelo fenomenológico de ondas largas para materiales no polares.

4.1 Germanio

El germanio (Ge) es un elemento químico con número atómico 32, y símbolo Ge, perteneciente al grupo IV de la tabla periódica de los elementos. Es un metaloide sólido duro, cristalino, de color blanco grisáceo lustroso, deleznable, que conserva el brillo a temperaturas ordinarias. Presenta la misma estructura cristalina que el diamante.

El Ge es un importante material semiconductor utilizado en transistores y fotodetectores. A diferencia de la mayoría de los semiconductores, el Ge tiene una pequeña banda prohibida (band gap) por lo que responde de forma eficaz a la radiación infrarroja y puede usarse en amplificadores de baja intensidad.

Las aplicaciones del germanio se ven limitadas por su elevado costo y en muchos casos se investiga su sustitución por materiales más económicos.

El desarrollo de los transistores de germanio abrió la puerta a numerosas aplicaciones electrónicas que hoy son cotidianas. Entre 1950 y los primeros 70, la electrónica constituyó el grueso de la creciente demanda de germanio hasta que empezó a sustituirse por el silicio por sus superiores propiedades eléctricas. Actualmente la gran parte del consumo se destina a fibra óptica (cerca de la mitad), equipos de visión nocturna y catálisis en la polimerización de plásticos, aunque se

investiga su sustitución por catalizadores más económicos. En el futuro es posible que se extiendan las aplicaciones electrónicas de las aleaciones silicio-germanio en sustitución del arseniuro de galio, especialmente en las telecomunicaciones sin cable.

El germanio tiene cinco isótopos estables siendo el más abundante el Ge-74 (35,94%). Se han caracterizado 18 radioisótopos de germanio, siendo el Ge-68 el de mayor vida media con 270,8 días.

4.2 Silicio

El silicio es un elemento químico no metálico, número atómico 14 y situado en el grupo 4 de la tabla periódica de los elementos formando parte de la familia de los carbonoides. Es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre (27,7% en peso) después del oxígeno. Se presenta en forma amorfa y cristalizada; el primero es un polvo parduzco, más activo que la variante cristalina, que se presenta en octaedros de color azul grisáceo y brillo metálico.

Sus propiedades son intermedias entre las del carbono y el germanio. En forma cristalina es muy duro y poco soluble y presenta un brillo metálico y color grisáceo. Aunque es un elemento relativamente inerte y resiste la acción de la mayoría de los ácidos, reacciona con los halógenos y álcalis diluidos. El silicio transmite más del 95% de las longitudes de onda de la radiación infrarroja.

Se utiliza en aleaciones, en la preparación de las siliconas, en la industria de la cerámica técnica y, debido a que es un material semiconductor muy abundante, tiene un interés especial en la industria electrónica y microelectrónica como material básico

para la creación de obleas o chips que se pueden implantar en transistores, pilas solares y una gran variedad de circuitos electrónicos.

El silicio tiene nueve isótopos, con número másico entre 25 a 33. El isótopo más abundante es el Si 28 con una abundancia del 92.23%, el Si 29 tiene una abundancia del 4.67% y el Si 30 que tiene una abundancia del 3.1, todos ellos son estables. El Si 32 es radiactivo que proviene del decaimiento del argón.

Los parámetros físicos que usaremos en lo que resta de la tesis para el caso del silicio y del germanio en el volumétrico, los podemos encontrar en la tabla 4.1. Los valores de β_L , β_T , a y b los podemos encontrar en [82]. El parámetro ω_0 fue tomado de la misma referencia, mientras que los otros parámetros se pueden encontrar en la referencia [83].

material	$a_0(10^{-8} \text{ cm})$	$\rho(\text{g/cm}^3)$	$\omega_0(\text{cm}^{-1})$	$\beta_T(10^5 \text{ cm/s})$	$\beta_L(10^5 \text{ cm/s})$
<i>Si</i>	5.43	2.33	513	1.936	4.532
<i>Ge</i>	5.66	5.32	305	3.48	3.55
	$a(10^{18} \text{ cm/s}^2)$	$b(10^{18} \text{ cm/s}^2)$			
<i>Si</i>	-7.70	14.51			
<i>Ge</i>	-6.26	3.59			

Tabla 4.1: Parámetros del volumétrico del Germanio y Silicio.

4.3 Ecuación fundamental

Los materiales no polares pueden ser vistos como un caso particular de los polares cuando ambos átomos en la celda elemental son iguales. Entonces el campo eléctrico asociado al movimiento relativo de estos átomos desaparece. Matemáticamente el problema puede ser tratado haciendo cero la constante de acoplamiento entre las oscilaciones mecánicas y el campo electrostático. Bajo esta condición muchos resultados obtenidos para medios polares serán válidos en los sistemas no polares.

Si nos interesamos en los fonones ópticos en semiconductores no polares emplearemos para la descripción de las oscilaciones el campo del vector desplazamiento \mathbf{u} , que representará el desplazamiento relativo de los dos átomos involucrados y satisface la ecuación siguiente:

$$\rho(\omega^2 - \omega_{T_0}^2)\mathbf{u} = \rho\beta_L^2 \nabla \nabla \cdot \mathbf{u} - \rho\beta_T^2 \nabla \times \nabla \times \mathbf{u} + i\rho(\mathbf{b} \cdot \nabla)\mathbf{u} + i\rho\mathbf{a}(\nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (4.1)$$

La ecuación (4.1) es análoga a la que introducimos en el capítulo 3. Sin embargo aquí el potencial eléctrico es nulo por tratarse de materiales no polares. Como se puede observar, la ecuación diferencial ha sido modificada sustancialmente debido a la presencia de los dos últimos términos.

ρ : representa la densidad de masa total reducida asociada a los dos átomos (Si o Ge) de la celda unitaria.

ω : es la frecuencia óptica del volumétrico en la dirección Γ

$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ es una función que depende armónicamente del tiempo en la forma $[\exp(-i\omega t)]$

β_L (β_T) son los parámetros de parabolicidad longitudinal (transversal) que dan cuenta de la dispersión de estas curvas para valores pequeños del vector de onda.

El modelo físico que analizamos en nuestro trabajo es esencialmente isotrópico en sus características físicas. La introducción de los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} no destruye la isotropía del sistema porque, como veremos más adelante, estos vectores se toman siempre a lo largo de la dirección del vector de onda.

La ecuación (4.1) es un sistema de tres ecuaciones diferenciales parciales acopladas que permiten describir los fonones ópticos confinados en la heteroestructura. Las soluciones se deben empalmar en la intercara aplicando las condiciones límites para \mathbf{u} , que analizaremos más adelante.

$$\tau_{ij} = \rho(\beta_L^2 - 2\beta_T^2)(\nabla \cdot \mathbf{u})\delta_{ij} + \rho\beta_T^2(u_{j,i} + u_{i,j}) + i\rho(a_i u_j + b_j u_i) \quad (4.2)$$

Este tensor se puede comparar al tensor de la tensión usado en la teoría de medios elásticos continuos, y su divergencia proporciona realmente una densidad de fuerza.

Para nuestro caso asumiremos que nuestro sistema está crecido a lo largo del eje Z en $z = \pm \frac{d}{2}$. Para el caso del pozo cuántico las coordenadas toman valores de $\pm \infty$. Nuestro sistema sería Ge/Si/Ge.

En la teoría de los medios continuos elásticos las condiciones de empalme en las intercaras están dadas por:

- Continuidad del campo de elongaciones \mathbf{u} en la intercara.
- Continuidad del flujo de fuerza dado por:

$$\tau_{ij} = \tau \cdot \mathbf{N} \tag{4.3}$$

Donde \mathbf{N} es el vector unidad normal a la intercara.

4.4 Solución de la ecuación diferencial para materiales no polares.

Las tres ecuaciones diferenciales implicadas en la ecuación (4.1) se pueden resolver de forma similar a como se hizo en el capítulo anterior para materiales polares.

La diferencia principal que podemos encontrar se relaciona con la presencia de los términos lineales en la ecuación. Sin embargo, la ecuación llega a ser más simple si elegimos los vectores \mathbf{a} y \mathbf{b} a lo largo de la dirección del vector de la onda $\boldsymbol{\kappa}$.

De forma similar al caso de materiales polares nuestro espacio de soluciones tiene la siguiente base para $F(z)$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ Q_T \\ \kappa \end{bmatrix} \exp(iQ_T z); \begin{bmatrix} 0 \\ Q_T \\ \kappa \end{bmatrix} \exp(-iQ_T z); \begin{bmatrix} 0 \\ \kappa\Gamma \\ Q_L\Gamma' \end{bmatrix} \exp(iQ_L z); \begin{bmatrix} 0 \\ \kappa\Gamma \\ -Q_L\Gamma' \end{bmatrix} \exp(-iQ_L z) \tag{4.4}$$

Donde las magnitudes Q_L , Q_T , Γ y Γ' están dadas por:

$$Q_L = \sqrt{\frac{\omega_0^2 - \omega^2 - (a+b)\kappa}{\beta_L^2 - \kappa^2}} \tag{4.5}$$

$$Q_T = \sqrt{\frac{(\omega_0^2 - \omega^2 - b\kappa)}{\beta_T^2 - \kappa^2}} \quad (4.6)$$

$$\Gamma = 1 + \frac{aQ_L^2}{\beta_T^2 \kappa (Q_T^2 - Q_L^2)} \quad (4.7)$$

$$\Gamma' = 1 - \frac{a\kappa}{\beta_T^2 (Q_T^2 - Q_L^2)} \quad (4.8)$$

La simetría del problema permite clasificar las oscilaciones según su paridad en la forma siguiente:

a) Estados acoplados impares, para los que tenemos:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ iQ_T \cos(Q_T z) \\ \kappa \sin(Q_T z) \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 0 \\ i\kappa\Gamma \cos(Q_L z) \\ -Q_L \Gamma' \sin(Q_L z) \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

Los cuales están definidos para $-d/2 < z < d/2$. En el intervalo $|z| > d/2$ las soluciones se deben elegir como ondas salientes que viajan de $z \rightarrow \pm\infty$. Aplicando las condiciones de empalme encontramos las siguientes soluciones.

$$\frac{F_y(z)}{C} = iQ_T \cos(Q_T z) + \frac{i\Gamma \kappa^2 \sin \mu}{Q_L \Gamma' \sin \eta} \cos(Q_L z) \quad (4.10)$$

$$\frac{F_z(z)}{C} = \kappa \sin(Q_T z) - \frac{\kappa \sin \mu}{\sin \eta} \sin(Q_L z) \quad (4.11)$$

donde la relación de dispersión está dada por:

$$\mu \eta \cot \mu \tan \eta = -\frac{v^2 \Gamma}{\Gamma'} \quad (4.12)$$

donde

$$\mu = \frac{Q_T d}{2}; \quad \eta = \frac{Q_L d}{2}; \quad \text{y} \quad v = \frac{\kappa d}{2}$$

b) Para estados acoplados pares, el espacio de soluciones está dado por:

$$\begin{bmatrix} 0 \\ Q_T \sin(Q_T z) \\ i\kappa \cos(Q_T z) \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} 0 \\ -i\kappa \Gamma \sin(Q_L z) \\ iQ_L \Gamma' \cos(Q_L z) \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

donde

$$\frac{F_y(z)}{C} = Q_T \sin(Q_T z) + \frac{\Gamma \kappa^2 \cos \mu}{Q_L \Gamma' \cos \eta} \sin(Q_L z) \quad (4.14)$$

$$\frac{F_z(z)}{C} = i\kappa \cos(Q_T z) - \frac{i\kappa \cos \mu}{\cos \eta} \cos(Q_L z) \quad (4.15)$$

y la relación de dispersión está dada por:

$$\mu \eta \tan \mu \cot \eta = -\frac{v^2 \Gamma}{\Gamma'} \quad (4.16)$$

En ambos casos C es una constante de normalización que se puede obtener explícitamente por métodos estándares.

Para el empalme completo las 'capas' de Germanio vibran por lo que las soluciones se pueden escribir como:

Impares

$$F_y(z) = iQ_{1T} \cos(Q_{1T}z)C_1 + i\kappa\Gamma_1 \cos(Q_{1L}z)C_2 \quad (4.17)$$

$$F_z(z) = \kappa \sin(Q_{1T}z)C_1 - Q_{1L}\Gamma_1' \sin(Q_{1L}z)C_2 \quad (4.18)$$

definida para $|z| < d/2$. Para $|z| > d/2$ la solución está dada por:

$$\widehat{F}_y(z) = -Q_{2T} \exp(iQ_{2T}|z|)C_3 + \kappa\Gamma_2 \exp(iQ_{2L}|z|)C_4 \quad (4.19)$$

$$\widehat{F}_z(z) = \frac{z}{|z|} [\kappa \exp(iQ_{2T}|z|)C_3 + Q_{2L}\Gamma_2' \exp(iQ_{2L}|z|)C_4] \quad (4.20)$$

De ahora en adelante la notación "1" ("2") indica que nos estamos refiriendo al Si(Ge).

En las ecuaciones anteriores exigimos la continuidad del vector \mathbf{u} en la intercara así como la continuidad de τ_{yz} y τ_{zz} (la componente $\tau_{xx} \equiv 0$ para los modos acoplados). Las componentes del tensor están dadas por:

$$\tau_{yz} = \rho\beta_T^2 \left(i\kappa u_z + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) + i\rho a u_z \quad (4.21)$$

$$\tau_{zz} = \rho\beta_L^2 \frac{\partial u_z}{\partial z} + i\kappa\rho(\beta_L^2 - 2\beta_T^2)u_y \quad (4.22)$$

Las condiciones de empalme conducen a un sistema de 4×4 ecuaciones homogéneas lineales. Este sistema de ecuaciones se puede escribir en una forma compacta de la siguiente forma:

$$\sum_{n=1}^4 G_{in} C_n = 0 \quad i, n = 1,2,3,4 \quad (4.23)$$

y las componentes de la matriz están dadas por:

$$\det|G_{in} = 0| \quad (4.24)$$

$$G_{in} = \begin{bmatrix} i\mu_1 \cos \mu_1 & iv\Gamma_1 \cos \eta_1 & \mu_2 \exp(i\mu_2) & -v\Gamma_2 \exp(i\eta_2) \\ v \sin \mu_1 & \eta_1 \Gamma_1' \sin \eta_1 & -v \exp(i\mu_2) & -\eta_2 \Gamma_2' \exp(i\eta_2) \\ \alpha f_1 \sin \mu_1 & -\alpha g_1 \eta_1 \sin \eta_1 & -f_2 \exp(i\mu_2) & -g_2 \eta_2 \exp(i\eta_2) \\ 2\alpha v \mu_1 \cos \mu_1 & -\alpha h_1 \cos \eta_1 & 2iv\mu_2 \exp(i\mu_2) & -ih_2 \exp(i\eta_2) \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

Para los estados pares:

$$F_y(z) = Q_{IT} \sin(Q_{IT}z)C_1' - \kappa\Gamma_1 \sin(Q_{IL}z)C_2' \quad (4.26)$$

$$F_z(z) = i\kappa \cos(Q_{IT}z)C_1' + iQ_{IL} \Gamma_1' \cos(Q_{IL}z)C_2' \quad (4.27)$$

definida para $|z| < d/2$. Para $|z| > d/2$ las soluciones son:

$$\widehat{F}_y(z) = \frac{z}{|z|} \left[-Q_{2T} \exp(iQ_{2T}|z|)C'_3 + \kappa\Gamma_2 \exp(iQ_{2L}|z|)C'_4 \right] \quad (4.28)$$

$$\widehat{F}_z(z) = \kappa \exp(iQ_{2T}|z|)C'_3 + Q_{2L}\Gamma'_2 \exp(iQ_{2L}|z|)C'_4 \quad (4.29)$$

Aplicando las mismas condiciones de empalme obtenemos:

$$\sum_{n=1}^4 G'_{in} C'_n = 0 \quad i, n = 1,2,3,4 \quad (4.30)$$

y las componentes de la matriz están dadas por:

$$\det|G'_{in} = 0| \quad (4.31)$$

$$G'_{in} = \begin{bmatrix} \mu_1 \sin \mu_1 & -v\Gamma_1 \sin \eta_1 & \mu_2 \exp(i\mu_2) & -v\Gamma_2 \exp(i\eta_2) \\ iv \cos \mu_1 & i\eta_1 \Gamma'_1 \cos \eta_1 & -v \exp(i\mu_2) & -\eta_2 \Gamma'_2 \exp(i\eta_2) \\ -\alpha f_1 \cos \mu_1 & -\alpha g_1 \eta_1 \cos \eta_1 & -if_2 \exp(i\mu_2) & -ig_2 \eta_2 \exp(i\eta_2) \\ -2\alpha v \mu_1 \sin \mu_1 & -\alpha h_1 \cos \eta_1 & 2v\mu_2 \exp(i\mu_2) & h_2 \exp(i\eta_2) \end{bmatrix} \quad (4.32)$$

donde:

$$f_j = v^2 - \mu_j^2 + \frac{a_j dv}{2\beta_{jT}^2} \quad (4.33)$$

$$g_j = (\Gamma_j + \Gamma'_j)v + \frac{a_j d}{2\beta_{jT}^2} \Gamma'_j \quad (4.34)$$

$$h_j = \left(\frac{\beta_{jL}}{\beta_{jT}} \right)^2 (\Gamma_j v^2 + \Gamma_j \eta_j^2) - 2\Gamma_j v^2 \quad (4.35)$$

donde

$$\alpha = \frac{\rho_1 \beta_{1T}^2}{\rho_2 \beta_{2T}^2} ; j=1,2 \quad (4.36)$$

4.5 Relaciones de dispersión de pozos Ge/Si/Ge.

A continuación mostramos las curvas de $\omega(\kappa)$ para pozos de ancho de $d = 3.258\text{nm}$ para el caso de la no aplicación del empalme completo y el caso del empalme completo lo que nos permitirá analizar las características comunes y las diferencias.

En la figura 4.1 mostramos las relaciones de dispersión para el caso del pozo de Ge/Si/Ge para un ancho de $d = 3.258\text{nm}$ (aproximadamente unas 6 monocapas); en este caso no tuvimos en cuenta el empalme completo en correspondencia a las ecuaciones (4.12) y (4.16). Aquí solo mostramos las primeras 15 ramas ópticas para el pozo correspondiente. Se puede observar que los modos longitudinales y transversales están muy pegados entre los valores de frecuencia de 505 a 515 cm^{-1} respectivamente y no muestran gran carácter de dispersión. Los modos están etiquetados de acuerdo a su carácter en $\kappa = 0$. Como se observa hay una secuencia inicial

de estados longitudinales y otra de estados transversales, la frecuencia de estados transversales es de frecuencia decreciente.[84-85]

Para $\kappa \neq 0$ las distintas ramas son casi planas, en el caso de los materiales polares los intervalos de κ donde las ramas muestran una fuerte dispersión son las referidas a los estados con fuerte efecto electrostático, es decir, con un fuerte carácter de intercara. Esto fortalece nuestro modelo donde el efecto electrostático no se tiene en cuenta por tratarse de materiales no polares.

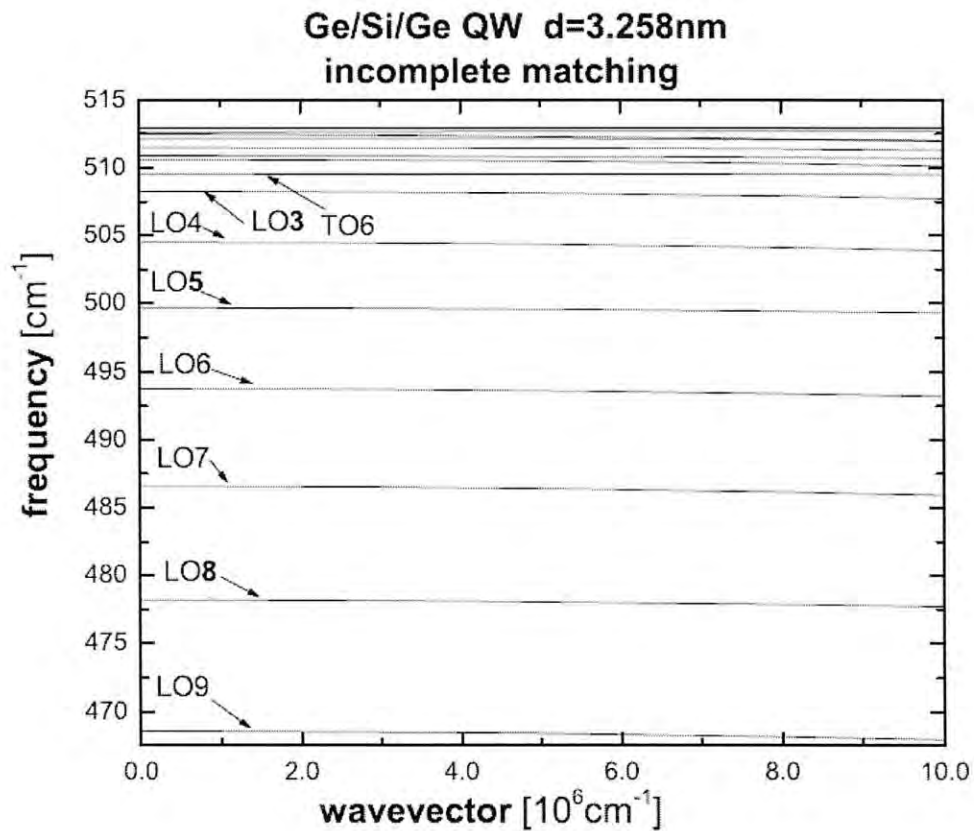


Figura 4.1: Relaciones de dispersión del Ge/Si/Ge para el caso de empalme incompleto.

En la figura 4.2 mostramos las relaciones de dispersión para el mismo pozo pero para el caso del empalme completo. Las curvas de dispersión fueron obtenidas a partir de las ecuaciones (4.24) y (4.31) que corresponden al empalme completo. Como podemos observar ambas figuras tiene aspectos muy parecidos, sólo se observa un corrimiento del espectro fonónico [84-85]

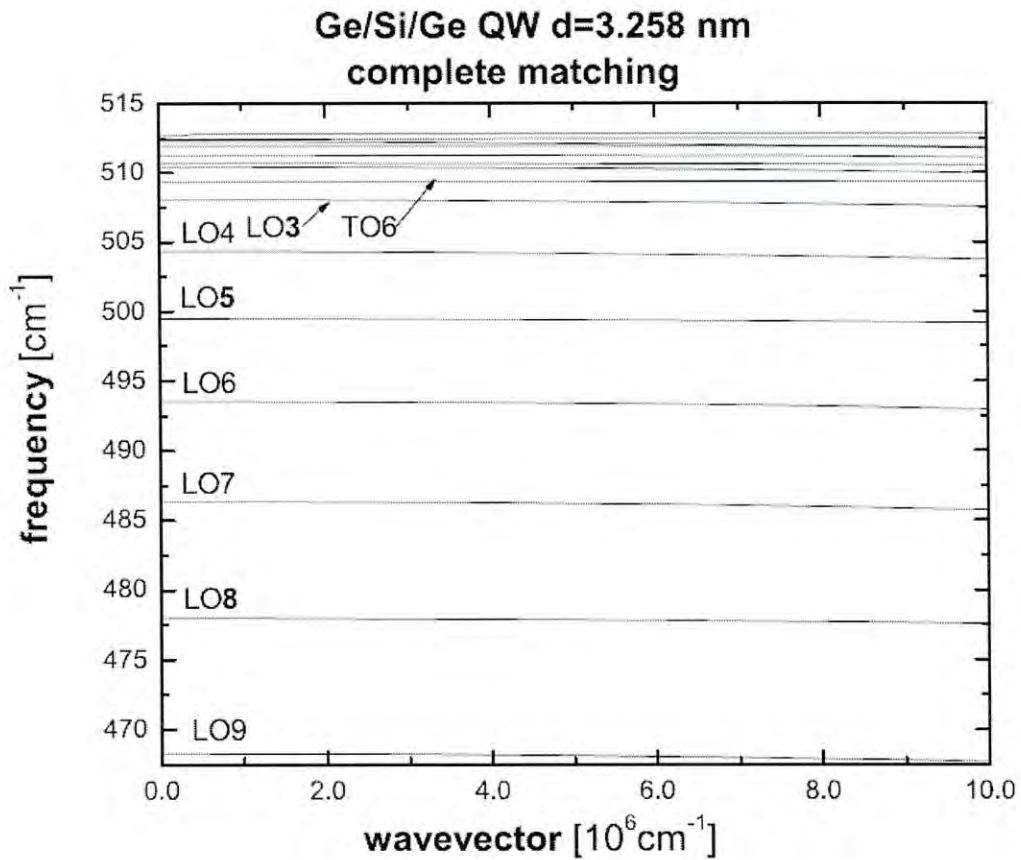


Figura 4.2: Relaciones de dispersión del Ge/Si/Ge para el caso de empalme completo

En la figura 4.3 mostramos las relaciones de dispersión para el pozo cuántico de Ge/Si/Ge de ancho de $d = 3.258\text{nm}$ para ambos casos, es decir, para el empalme completo y el caso de no empalme completo. Las curvas continuas corresponden al empalme completo y las discontinuas al empalmé incompleto.

Nuestros cálculos muestran que ambos resultados son útiles para futuras investigaciones en estos tipos de sistemas. Hasta el momento no contamos con datos experimentales para poder comparar nuestro modelo con los datos experimentales.[84-85]

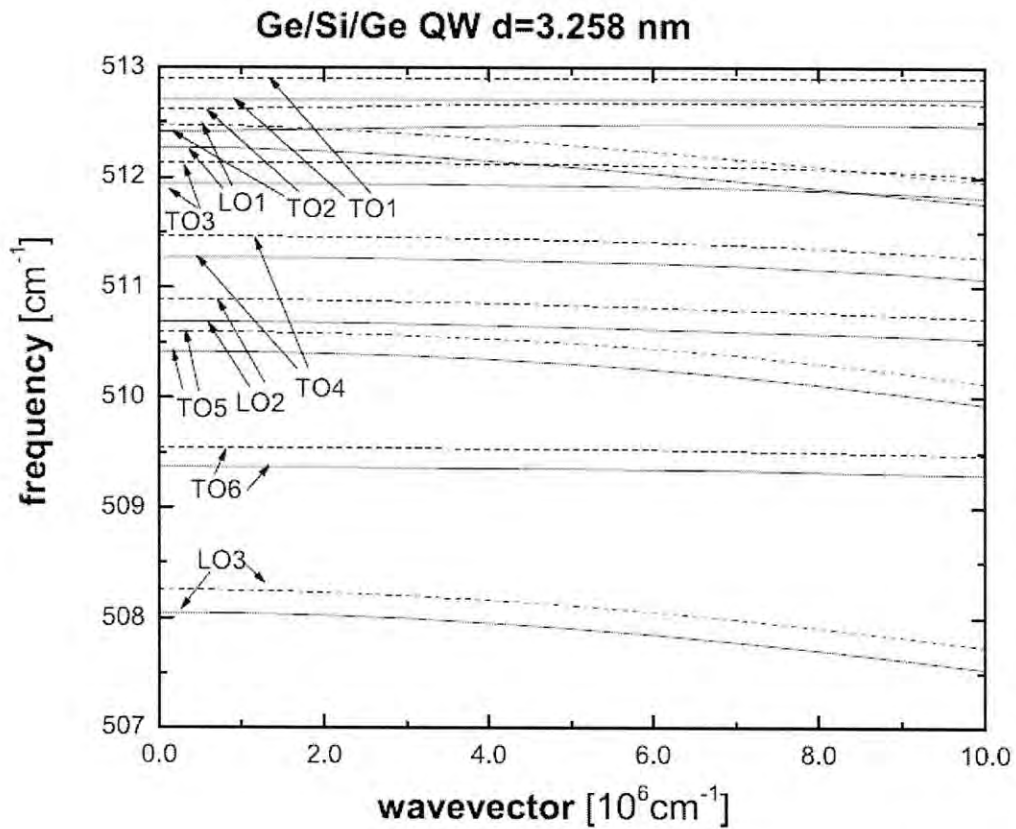


Figura 4.3: Relaciones de dispersión del Ge/Si/Ge para el caso de empalme incompleto y completo. Las líneas continuas representa el empalme completo.

Conclusiones.

A continuación trataremos de resumir de forma breve las conclusiones más trascendentes de nuestra tesis.

En primer lugar debemos de mencionar la aplicación del modelo fenomenológico de ondas largas de Trallero-Giner, Pérez Alvarez, Comas y colaboradores al cálculo del espectro fonónico para pozos cuánticos de cualquier material.

En segundo lugar se propuso un modelo de onda larga en materiales polares con el cual pudimos calcular el espectro fonónico para pozos cuánticos sin tensionamiento y con tensionamiento y los resultados fueron más precisos que para el caso en que no se considera el empalme completo.

En tercer lugar con el cálculo del espectro fonónico de sistemas tensionados y sin tensionar llegamos al resultado de que sus espectros fonónicos son prácticamente similares; sólo lo diferencia el corrimiento que se produce en la frecuencia longitudinal y transversal de sus valores respecto a los valores conocido del masivo, producto del tensionamiento del sistema.

En cuarto lugar se propuso un modelo para fonones de onda larga en materiales no polares en el espíritu de la teoría de los medios continuos, el cual es válido para describir los modos fonónicos en pozos cuánticos. Este tratamiento puede ser visto como un caso particular del modelo para fonones polares.

En quinto lugar podemos plantear que en los gráficos en su conjunto se aprecian las siguientes características:

- Las curvas de los estados pares cruzan a los impares y viceversas. Las curvas de un mismo grupo no se cruzan (crean gaps en el espectro).
- A $\kappa = 0$ hay secuencia de estados longitudinales y otra de estados transversales. La secuencia de estados transversales es de frecuencia creciente o decreciente en correspondencia con el valor negativo o positivo de β_T .

Es importante señalar que el modelo propuesto por nosotros tiene excelente concordancias con los experimentos por lo que sería bueno extender estos resultados a futuro a otras estructuras tales como superredes, hilos cuánticos y esferas cuánticas. De igual modo resulta interesante resolver el matching completo para el caso de estructura tipo polares/no polares.

Bibliografía

1. B. Jusserand y M. Cardona, Raman spectroscopy of vibrations in superlattices, en *Light Scattering in Solids V*, editado por M. Cardona y G. Güntherodt (Springer-Verlag, Heidelberg, 1989).
2. R. L. Weaver, M. R. Hauser y J. P. Wolfe, *Phys. B* 90, 27 (1993).
3. S. Mizuno y S. Tamura, *Phys. Rev. B* 50, 7708 (1994).
4. T. Yao, *Appl. Phys. Lett.* 51, 1798 (1987); X. Y. Yu, G. Chen, A. Verma y J. S., *Appl. Phys. Lett.* 67, 3554 (1995).
5. W. S. Capinski, M. Cardona, D. S. Katzer, H. J. Maris, K. Ploog and T. Ruf, *Physica B* 263, 530 (1999).
6. D. A. Broido y T. L. Reinecke, *Phys. Rev. B* 51, 13797 (1995).
7. P. Hyldgaard y G. D. Mahan, *Phys. Rev. B* 56, 10754 (1997).
8. S. Tamura, Y. Tanaka and H. J. Maris, *Phys. Rev. B* 60, 2627 (1999)
9. M. V. Simkin y G. D. Mahan, *Phys. Rev. Lett.* 84, 927 (2000).
10. S. Barker, Jr., J. L. Merz y A. C. Gossard, *Phys. Rev. B* 17, 3181 (1978).
11. Colvard, T. A. Gant, M. V. Klein, R. Merlin, R. Fischer, H., *Phys. Rev. B* 31, 2080 (1985).
12. Jusserand, D. Paquet y A. Regreny, *Phys. Rev. B* 30, 6245 (1984).
13. P. Molinas Mata y M. Cardona, *Phys. Rev. B* 43, 9799 (1991)
14. A. Qteish, y E. Molinari, *Phys. Rev. B* 42, 7090 (1990).
15. S. de Gironcoli, E. Molinari, R. Shorer y G. Abstreiter, *Phys. Rev. B* 48, 8959 (1993).
16. Fasolino, E. Molinari y K. Kunc, *Phys. Rev. B* 41, 8302 (1990).
17. K. Kunc, M. Balkanski y M. A. Nusimovici, *Phys. Rev. B* 12, 4346 (1975).
18. M. Born and K. Huang. *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. University Press, Oxford, UK, (1958).
19. B. G. Dick, Jr. y A. W. Overhauser, *Phys. Rev.* 112, 90 (1958).

20. G. Dolling y J. L. T. Waugh, in *Lattice Dynamics*, editado por R. F. Wallis (Pergamon, London, 1965).
21. W. Weber, *Phys. Rev. Lett.* 33, 371 (1974).
22. K. C. Rustagi y W. Weber, *Solid State Commun.* 18, 673 (1976).
23. Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, New York, USA, (1976).
24. H. Fuchs y K. L. Kliewer, *Phys. Rev.* 140, A2Ü76 (1965).
25. M. Babiker, *J. Phys. C* 19, 683 (1986).
26. K. Huang y B. Zhu, *Phys. Rev. B* 38. 13377, (1988).
27. V. R. Velasco y F. García Moliner, *Surface Science Reports*, 28, 123 (1997).
28. R. Enderlein. *Phys. Rev. B* 43, 14513 (1991).
29. S. Adachi. *Properties of Aluminium Gallium Arsenide*. INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, London, UK, (1993).
30. P. Bhattachraya. *Properties of Lattice-Matched and Strained Indium Gallium Arsenide*. London, UK, (1993).
31. S.C. Jain, M. Willander, K. Pinardi and H.E. Maes. *Physica Scripta*, T69, 65, (1997).
32. Trallero-Giner, R. Pérez-Alvarez and F. García-Moliner. *Long Wave Polar Modes in Semiconductor Heterostructures*. Pergamon, Kidlington, UK, (1992).
33. Trallero-Giner, F. García-Moliner, V. R. Velasco and M. Cardona. *Phys. Rev. B* 45, 1194 (1994).
34. M. H. Chen and N. Tzoar, *Phys. Rev. B* 5, 233 (1972).
35. F. Chang and S. S. Mitra. *Phys. Rev.* 182, 924 (1968).
36. H. Akera y T. Ando, *Phys. Rev. B* 40, 2914 (1989).
37. B. A. Foreman, *Phys. Rev. B* 52, 12260 (1995).
38. S. Baroni, P. Giannozzi y A. Testa, *Phys. Rev. Lett.* 58, 1861 (1987).

39. S. Baroni, S. de Gironcoli, A. dal Corso y P. Giannozzi, *Rev. Mod. Phys.* 73, 515 (2001).
40. A. Qteish y E. Molinari, *Phys. Rev. B* 42, 7090 (1990).
41. S. de Gironcoli, E. Molinari, R. Shorer y G. Abstreiter, *Phys. Rev. B* 48, 8959 (1993).
42. Th. Englert, D. C. Tsui, J. C. Portal, J. Beerens, A. Gossard, *Solid State Comm.* 44, 1301 (1982).
43. G. Lindemann, R. Lassnig, W. Seidenbusch, E. Gornik, *Phys. Rev. B* 28, 4693 (1983).
44. H. Sigg, P. Wyder, J. A. A. J. Perenboom, *Phys. Rev. B* 31, 5253 (1985).
45. T. Tsuchiya, H. Akera, T. Ando, *Phys. Rev. B* 39, 6025 (1989).
46. M. C. Tatham, J. C. Ryan, C. T. Foxon, *Phys. Rev Lett.* 63, 1637 (1989).
47. H. Chu, Sh.-F. Ren, Y.-Ch. Chang, *Phys. Rev. B* 37, 10746 (1988)
48. G. Weber, *Phys. Rev. B* 46, 16171 (1992).
49. C. Trallero-Giner, F. Comas, *Phys. Stat. Sol. (b)* 144, 19 (1987).
50. B. K. Ridley, *J. Phys. C* 15, 5899 (1982).
51. C. Trallero-Giner, F. Comas, F. García-Moliner, *Phys. Rev. B* 50 1755 (1994).
52. R. Pérez-Álvarez, F. García-Moliner, V. R. Velasco, C. Trallero-Giner, *Phys. Rev. B* 48, 5672 (1993).
53. F. Comas, R. Pérez-Alvarez, C. Trallero-Giner, M. Cardona, *Superlatt. and Microstruct.* 14, 95 (1993)
54. H. Rücker, E. Molinari, P. Lugli, *Phys. Rev. B* 44, 3463 (1991)
55. H. Rücker, E. Molinari, P.; Lugli, *Phys. Rev. B* 45, 6747 (1992)
56. J. Frandon, M. A. Renucci, N. Briot, O. Briot, R.L. Aulombard, *Superlatt. and Microstruct.* 14, 71 (1993).
57. J. M. Nieto-Jalil, R. Pérez-Álvarez, España, p369. Editores: R. Bravo-Quinta y J. Salgado-Carballo (1995).
58. J. Nieto and R. Pérez-Álvarez, *Phys. Stat. Sol. (a)* 164, 699 (1997).

59. J.M Nieto Jalil and Pérez-Alvarez “Optical modes in thin AlAs-based quantum wells”. World Scientific, Singapore 2000
60. J.M. Nieto Jalil, J.L.Marin Flores and J.J.Vidal Córdova. XLVIII Congreso Nacional de Física, pag 49, (2005)
61. J.M. Nieto Jalil, J.L.Marin Flores, R. Betancourt Riera and R.Riera Aroche XLVIII Congreso Nacional de Física, pag 119, (2005).
62. Semiconductor and Semimetal V33 Editor Thomas P. Pearsall Academic Press, inc., Harcourt Bruce Jovanovich, Publisher (1995).
63. Morkoc, H; Sverdlov,B; Gao, G-B, Proceeding of the IEEE, Vol 81 (1993).
64. Landolt-Börnstein, Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology Vol III/17, Springer Verlag, Berlin (1982).
65. J.M.Nieto Jalil, F. Comas, Physica B 388, 153-158 (2007)
66. J.M.Nieto Jalil, R.Betancourt Riera, R. Riera Aroche. XLIX Congreso Nacional de Física, pg. 83 (2006).
67. J.M. Nieto Jalil, R. Betancourt Riera, R. Riera Aroche and F. Comas. XVIII Latin American Symposium on Solid State Physics, TUP28 (2006)
68. J.M. Nieto Jalil, R. Betancourt Riera, R. Riera Aroche and F. Comas, Revista Mexicana de Física, 53, 119-122 (2007).
69. Puech, P.; Landa, G.; Carles, R.; Pisan, P.S.; Daran, E.; Fontaiene, C.; J. Appl. Phys.76, 2773 (1994).
70. Jain, S.C.; Hayes, W. Semicond. Sci. Technol. 6, 547 (1991).
71. Tran, C.A.; Brebner, J.L.; Leonelli, R.; Jouanne, M.; Masut, R.A., Phys. Rev. B49, 11268 (1994).
72. Pavesi, L. ; Mariotto, G. ; Carlin, J.F. ; Rudra, A. ; Colombo, L., Semicond. Sci. Technol. 9, 256 (1994).
73. Armelles, G. ; Alonso, M.I. ; Castillo, P., Local phonos in strained superlattices. NATO-ARW on Phonons in Semiconductor Nanostructures sant Feliu de Guixols, Spain (1992).

74. Morkoc, H.; Strite, S.; Gao, G.B.; Lin, M.E.; Sverdlov, B.; Burns, M.; *J. Appl. Phys.* 76, 1363 (1994).
75. Nye, J.F.; *Physical properties of crystals*, Oxford university Press (1985).
76. Frandon, J.; Renucci, M.A.; Briot, O.; Aulombard, R.L., *Superlatt. And Microstruct.* 14, 71 (1993).
77. Eunsoon, O.; Ramdas, A.K.; Fromherz, T.; Faschinger, W.; Helm, M.; Juza, P.; Sitter, H.; Bauer, G.; *Phys. Rev. B* 47, 1998 (1993)
78. Lee, C.D.; Kim, B.K.; Kim, J.w.; Chang, S.K., *J. Appl. Phys.* 76, 928 (1998).
79. Pelekanos, N.T.; Ding, J.; Hagerott, M.; Nurmikko, A.V.; Luo, H.; Samarth, N.; Furdyna, J.K., *Phys. Rev. B* 45, 6037 (1992).
80. Cerdeira, F.; Buchenauer, C.J.; Pollak, F.H.; Cardona, M., *Phys. Rev. B* 5, 580 (1972).
81. Frandon, J.; Renucci, M.A.; Briot, O.; Aulombard, R.L.; *Superlatt. And Microstruct.* 14, 71 (1993).
82. W. Weber, *Phys. Rev. B* 15, 4789 (1977).
83. E. Kasper and F. Schaffler in *Semiconductors and semimetals*, Vol. 33, ed. T.P. Pearsall (Academic Press, NY, 1991), p.223.
84. J.M. Nieto Jalil and F. Comas, *Physica E* 35, 110-116 (2006)
85. J.M. Nieto Jalil, R. Betancourt-Riera, R. Riera-Aroche and R.A. Rosas-Burgos, III International Physics Congress, pg 110. (2007).