



Revista EIA
ISSN 1794-1237
e-ISSN 2463-0950
Año XVIII/ Volumen 18/ Edición N.36
Junio-Diciembre de 2021
Reia36020 pp. 1-14

Publicación científica semestral
Universidad EIA, Envigado, Colombia

**PARA CITAR ESTE ARTÍCULO /
TO REFERENCE THIS ARTICLE /**

Cardona-Bedoya, J. A.; Celemín Sanchez, H.; Pulzara-Mora, A. (2021). Estudio de la influencia de la segregación de indio y del campo eléctrico interno en las propiedades ópticas de heteroestructuras de pozos cuánticos III-V. Revista EIA, 18(36), Reia36020. pp. 1-14. <https://doi.org/10.24050/reia.v18i36.1511>

Autor de correspondencia:

Cardona-Bedoya, J. A (Jairo Armando): Grupo de Investigación en Materiales Semiconductores y Superiónicos, Departamento de Física, Universidad del Tolima. Correo electrónico: jcardona@ut.edu.co

Recibido: 14-03-2021

Aceptado: 12-05-2021

Disponibile online: 01-06-2021

Estudio de la influencia de la segregación de indio y del campo eléctrico interno en las propiedades ópticas de heteroestructuras de pozos cuánticos III-V.

JAIRO A. CARDONA-BEDOYA¹
HUBERNEY CELEMÍN SANCHEZ¹
ÁLVARO PULZARA-MORA²

1. Grupo de Investigación en Materiales Semiconductores y Superiónicos, Departamento de Física, Universidad del Tolima, A.A. 546, Ibagué.
2. Laboratorio de Nanoestructuras Semiconductoras, Grupo Magnetismo y Materiales Avanzados, Universidad Nacional de Colombia, sede Manizales. A.A. 127, Manizales.

Resumen

La segregación superficial de átomos en las aleaciones de semiconductores III-V produce interfaces abruptas y modifica los perfiles del potencial, alternando los estados electrónicos en el pozo cuántico y la energía de emisión en el espectro de fotoluminiscencia. En este trabajo se resuelve mediante serie de potencias la ecuación de Schrödinger considerando un potencial simétrico tipo Cauchy, el cual es suave y decreciente al infinito. Se propone dicho potencial debido a los cambios en el perfil del potencial del pozo cuántico por la segregación de átomos durante el proceso de crecimiento. Se determinó la energía del estado base en función de los parámetros que caracterizan este potencial. Este modelo fue aplicado al caso particular de la segregación de indio en el sistema InGaAs/GaAs. La energía de transición del estado base se calcula a partir de las diferencias de energía entre el electrón y el hueco en función del ancho del pozo. Dichos cálculos están de acuerdo con los picos de energía de fotoluminiscencia reportados. Adicionalmente, la influencia del campo eléctrico debido al efecto piezoeléctrico en la emisión de fotoluminiscencia es estudiada. Para esto se consideró una función de onda variacional de electrones y se calculó la transición de energía del estado base en la región activa de la heteroestructura a partir de las diferencias de energía de electrones y huecos en función del ancho del pozo y del campo eléctrico. Para pozos cuánticos de InGaAs/GaAs la energía base es ajustada dentro de este modelo coincidiendo nuestros cálculos teóricos con la parte experimental.

Palabras Claves: Ecuación de Schrödinger, Pozos cuánticos, Semiconductores III-V, Segregación.

Study of the influence of indium segregation and Internal electric-field on the optical properties of III-V quantum wells heterostructures.

Abstract

The surface segregation in III-V semiconductor alloys produce abrupt interfaces, and modifies the potential profiles, alternating the electronic states in the quantum well and the emission energy in the photoluminescence spectrum. In this work, the Schrödinger equation is solved by means of a power series considering a Cauchy type symmetrical potential, which is soft and decreasing to infinity. This potential is proposed due to the changes in the potential profile from quantum well by the segregation of atoms during the growth process. The ground state energy was determined according to the parameters that characterize this potential. This model was applied to the particular case of indium segregation in the InGaAs/GaAs system. The ground state energy transition is calculated from the difference in energy between the electron and hole in function of well width. These calculations are in agreement with the reported photoluminescence peak energies. In addition, the influence of the electrical field due to the piezoelectric effect on the photoluminescence emission is studied. For this purpose, an electron variational wavefunction was considered and the ground state energy transition in the active region of the heterostructure was calculated from the difference in energy between the electron and hole in function of well width and the electric field. For InGaAs/GaAs quantum wells, the ground energy is adjusted within this model coinciding our theoretical calculations with the experimental part.

Key Words: *Quantum wells, Schrödinger equation, Segregation, III-V semiconductors.*

1. Introducción

Los compuestos semiconductores III-V tienen propiedades ópticas y electrónicas únicas, las cuales son usadas frecuentemente en la fabricación de láseres, diodos emisores de luz, detectores para comunicaciones ópticas, instrumentación y sensores. En particular las heteroestructuras de pozos cuánticos semiconductores (QWs) son ampliamente utilizadas en la optoelectrónica moderna; de hecho, existen industrias que fabrican circuitos integrados III-V en grandes volúmenes para aplicaciones tan diversas como teléfonos inteligentes, estaciones base de telefonía móvil, sistemas de fibra óptica, redes inalámbricas de área local, comunicaciones por satélite, radares, radioastronomía y sistemas de defensa. Una de las cuestiones importantes en la tecnología de crecimiento epitaxial es el control de calidad de la interfaz del QWs. En la actualidad está bien establecido que el crecimiento epitaxial de QWs de InGaAs o InGaN se caracterizan por una fuerte segregación de átomos de indio que se acumulan en el frente de crecimiento y alteran fuertemente el perfil de la composición de In, al distorsionar las interfaces del crecimiento epitaxial, lo que lleva a una modificación de las propiedades ópticas de los QWs. El efecto de la segregación se ha reportado en varios sistemas de QWs crecidos epitaxialmente; ver Deng et al. (2014), Massabuau et al. (2017) y Mehrrens et al. (2013). En particular, la segregación de indio se produce durante el crecimiento de capas de InGaAs/GaAs, o InGaN/GaN mediante la técnica de

epitaxia de haces molecular (MBE) tal como aparece en los trabajos de Mehrstens et al. (2013) y de Shan et al. (2016); así como en la técnica de deposición químico-vapor de metales orgánicos (CVD); ver Bonaf et al. (2017) y Song et al. (2012). El efecto de la segregación se ha observado utilizando varios métodos de análisis estructural, por ejemplo en los trabajos de Deng et al. (2014) y Loykaew et al. (2013) y por espectroscopia de fotoluminiscencia (PL) según el trabajo de Dong et al. (2016).

Los estudios teóricos son una ayuda sin precedentes para el avance tecnológico en el área de materia condensada. Durante los últimos años se han presentado diversos estudios teóricos para investigar las propiedades electrónicas y ópticas en los pozos cuánticos semiconductores tales como los trabajos de Bastard et al. (1983), Chenini et al. (2021), y Martínez Rendón et al. (2016). El cálculo de las energías de los electrones en sistemas simples, como un pozo cuántico aislado o un pozo cuántico doble simétrico, presenta soluciones analíticas. Para estos sistemas, se han utilizado diferentes enfoques. El enfoque variacional ha sido un método de elección para la determinación del espectro electrónico en heteroestructuras de semiconductores desde los primeros años de investigación en la materia. Entre una serie de trabajos, Ahn y Chuang (1986) y Bastard et al. (1983) reportaron estudios teóricos con el uso del método variacional para investigar la dependencia de la energía del estado base para un electrón confinado dentro de un QW, con potencial infinito de confinamiento rectangular, en función de un campo eléctrico externo aplicado a lo largo de la dirección de crecimiento de la heteroestructura. Yildirim y Tomak (2006) estudiaron los efectos de la asimetría y del campo eléctrico aplicado sobre los estados electrónicos y los espectros de absorción intersubbanda en QWs con un potencial de confinamiento Pöschl-Teller. Utilizaron el método variacional para investigar el comportamiento del estado base y algunos de los primeros estados excitados considerando diferentes valores de la intensidad de campo eléctrico aplicada.

El efecto de la segregación ocurre durante el crecimiento de heteroestructuras ternarias III-V mediante las técnicas de epitaxia de haces moleculares y epitaxia metalorgánica en fase de vapor. En particular el proceso de segregación de In tiene lugar durante la deposición epitaxial de la capa; el cual consiste en un proceso activado térmicamente en donde los átomos de In migran hacia el frente de crecimiento. Se pueden encontrar distintas aproximaciones para cuantificar el efecto de la segregación de In en QWs de In(Ga)As/GaAs crecidas por MBE, siendo el modelo de Muraki, Fukatsu y Shiraki (1992) el más utilizado. Desde el punto de vista teórico, hay pocos estudios sobre la segregación de indio. Schowalter et al. (2006) al considerar un modelo Kane de ocho bandas, obtuvo el comportamiento de la posición energética de las intensidades de pico de fotoluminiscencia (PL) en función del coeficiente de segregación R , ver Muraki, et al. (1992); la concentración de indio y el espesor del QW. Wu et al. (2009a, 2009b) resolvieron analíticamente la ecuación de Schrödinger tomando en cuenta los cambios de forma de los QWs $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ debido a la segregación de indio. De la Cruz (2004) exploró el cálculo de la energía de transición entre el electrón confinado y los estados del hueco como una función del ancho del pozo, teniendo en cuenta los efectos de la segregación de indio dentro de QWs individuales de InGaAs/GaAs. El resolvió la ecuación de Schrödinger analíticamente considerando un potencial simétrico de Pöschl-Teller, que se asemeja a la forma del pozo debido a la segregación de la superficie de los átomos de indio en las heteroestructuras semiconductoras. Posteriormente De la Cruz et al. (2005) examinaron los efectos combinados de la segregación y el campo eléctrico sobre las diferentes transiciones interbanda en QWs con el potencial simétrico de Pöschl-Teller, teniendo en cuenta la composición de In, la dependencia de la temperatura de la energía de banda prohibida, y la presencia del campo eléctrico interno en el QW sobre la energía de emisión en el espectro PL. La energía de transición electrón-hueco en el QW la calcularon utilizando la regla de oro

de Fermi. Las funciones de ondas del electrón y del hueco fueron descritas mediante funciones de ondas variables. Bajo estas aproximaciones, utilizaron como parámetro de ajuste el campo eléctrico incorporado en el QW cuando se compara con los picos experimentales de PL de los QWs InGaAs/GaAs/GaAs. En este trabajo, se adoptó el mismo método considerando un pozo de potencial simétrico de tipo Cauchy.

Los compuestos semiconductores III-V pertenecen a la clase de materiales piezoeléctricos con estructura zinc-blenda. En general, cuando se aplica alguna forma de tensión o deformación a un material piezoeléctrico, se induce una polarización y por lo tanto un campo eléctrico. Para los semiconductores III-V, este campo es inducido en direcciones de simetría específicas. Estructuras de pozos cuánticos de InGaAs/GaAs se han utilizado para diseñar y fabricar novedosos dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. Sin embargo, la mayoría de estas estructuras de dispositivos han sido sintetizadas en sustratos convencionales GaAs (001). La estructura cristalina del semiconductor GaAs y sus compuestos binarios, ternarios y cuaternarios relacionados es tal que los efectos físicos únicos debidos a la naturaleza piezoeléctrica de estos materiales con estructura zinc-blenda ocurren en direcciones simétricas específicas. Los cálculos teóricos han demostrado, por ejemplo, que existen grandes campos eléctricos inducidos por deformación en finas capas alternantes de (In, Ga)As y GaAs orientados en la dirección cristalográfica (111). Se sabe que la presencia de estos campos modifica las propiedades ópticas de las películas delgadas. Smith y Mailhiot (1988) fueron los primeros en sentar las bases teóricas para la mayoría de los cálculos de las películas delgadas orientadas en la dirección (111). Esta suposición implica que tanto las capas (In, Ga) As como las capas GaAs están bajo tensión elástica.

En este artículo se soluciona la ecuación de Schrödinger en presencia de un campo eléctrico en estructuras de pozos cuánticos empleando un potencial simétrico de confinamiento del tipo Cauchy. Para esto se calculó la energía base del electrón en el pozo, resolviendo la ecuación de Schrödinger por el método de series de potencia en ausencia de campo eléctrico. Posteriormente se tuvo en cuenta la influencia del campo eléctrico, por lo que se propuso una función de onda variacional y se calculó la energía base del electrón en el QW, así como la energía de transición entre el primer nivel de electrones y primer nivel de huecos en la región activa de la heteroestructura.

2. Modelo teórico

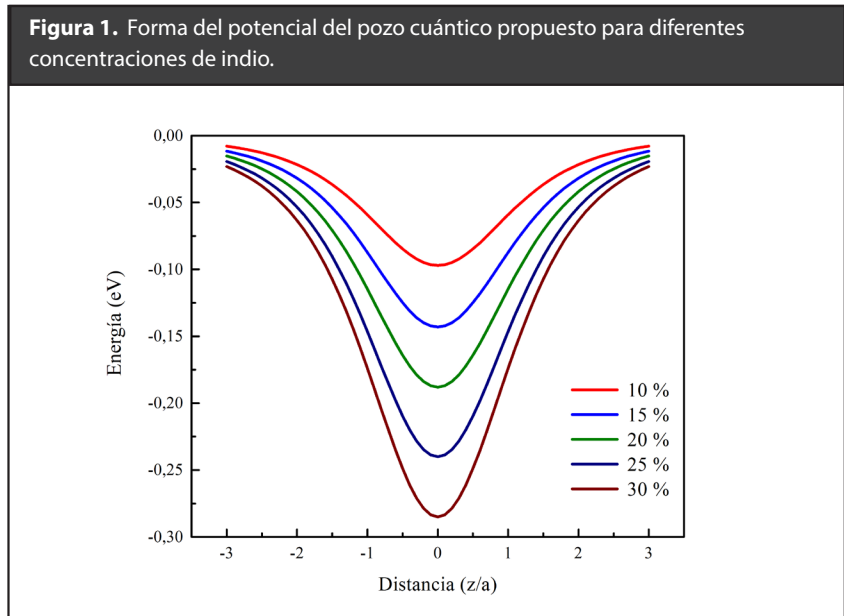
Los semiconductores de banda directa como los GaAs e InAs son eficientes en la emisión o absorción de luz. Estos semiconductores se utilizan exclusivamente en la fabricación de dispositivos como sensores, LEDs y celdas solares. Este estudio se basa en la comparación de los valores teóricos de las energías de transición entre el electrón confinado y el hueco con los calculados de los espectros de fotoluminiscencia (PL). El pico teórico del PL en un QW de In_xGa_{1-x}As/GaAs, viene dado por

$$\delta E_{PL} = E_g (\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) + E_{0e} + E_{0hh}, \quad (1)$$

donde $E_g (\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As})$ es el ancho de banda de energía prohibida del pozo, en el cual se han tenido en cuenta los efectos de la tensión y la temperatura; E_{0e} y E_{0hh} son las energías de confinamiento de electrones y huecos pesados. Para poder calcular las energías de transición requeridas, se necesita conocer el perfil del potencial, que está determinado por las desviaciones de las bandas de conducción y valencia, y también se debe de incluir los efectos de la deformación.

La segregación de átomos de indio durante el crecimiento de los QW's conduce a interfaces no abruptas entre los semiconductores $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y GaAs. Sin tener en cuenta los efectos de la segregación, los cálculos de las energías de transición se encuentran considerando un pozo de potencial cuadrado. En principio, es un problema exacto cuyas soluciones son las combinaciones lineales de las funciones senos o cosenos y los niveles de energía están dados por una ecuación trascendental como función del espesor y la barrera del pozo cuántico. Un pozo cuántico unidimensional soporta al menos un estado ligado, independientemente de la altura de la barrera de confinamiento y soporta un número infinito de niveles ligados si el potencial es infinito. Bajo esta condición los valores permitidos de la energía E corresponden a los del pozo cuadrado infinito de ancho $2a$ según Bastard, et al. (1983):

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8m a^2} n^2 \quad (2)$$



Para estudiar las consecuencias de la desviación de un potencial ideal de pozo cuadrado debido a la segregación de indio y su influencia en los niveles de energía y propiedades ópticas en el sistema $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$, se propone un potencial de confinamiento simple para describir la segregación superficial, dentro del marco de la aproximación de la masa efectiva, como:

$$V(z) = -\frac{\frac{V_0(x)}{\xi}}{\left[1 + \left[\xi \left(\frac{z}{a}\right)^2\right]^2\right]} \quad (3)$$

donde $V_0(x)$ representa el alto de las barreras del pozo cuántico de ancho $2a$ que depende de la concentración x de indio. Los parámetros de ajuste adimensional ξ y ζ se utilizan para ajustar la energía de recombinación δE del par electrón-hueco al valor experimental deseado. Se asume, por simplicidad, que la masa efectiva de las partículas es la misma dentro y fuera del pozo. La forma de los pozos cuánticos potenciales

para diferentes concentraciones de In se muestra en la figura 1. En este caso, se analizó sólo los huecos pesados (hh), ya que sólo nos interesa la transición óptica con la energía más baja (que implica la recombinación de la banda fundamental de conducción y la banda fundamental de la banda de valencia, llena por los hh). La ecuación de Schrödinger es la siguiente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} - \frac{\frac{V_0(x)}{\zeta} \Psi(z)}{\left[1 + \left(\frac{z}{a}\right)^2\right]^2} = E \Psi(z) \quad (4)$$

La elección de este potencial efectivo de pozos cuánticos nos permite obtener la solución de la ecuación de Schrödinger, mediante series de potencia. Resolviendo la ecuación, se obtiene, la función de onda normalizada en el estado base:

$$\Psi_0(z) = \sqrt[4]{\frac{2mE_0}{\pi \hbar^2}} e^{-\frac{mE_0 z^2}{\hbar^2}} \quad (5)$$

y el valor para la energía del estado base del electrón:

$$E_0 = -\frac{V_0}{\zeta} + \sqrt{\frac{3}{2} \left(\frac{V_0(x)}{\zeta}\right)^2 + \frac{V_0 \hbar^2}{\zeta m} \left(\frac{\xi}{a}\right)^2} \quad (6)$$

Esta selección particular del pozo potencial en los QWs ha sido bastante útil para estudiar la sensibilidad de la segregación superficial de indio en la forma del perfil de pozo cuántico y, por lo tanto, también en la energía de transición entre el estado base del electrón confinado y del hueco. Dentro de este modelo, se puede calcular el desplazamiento de los niveles de energía electrónica por medio de la Ec. (1) como:

$$\begin{aligned} \delta E_{PL} = E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) - 2\frac{V_0}{\zeta} + \sqrt{\frac{3V_0^2}{2\zeta^2} + \frac{V_0 \hbar^2}{\zeta m_e} \left(\frac{\xi}{a}\right)^2} \\ + \sqrt{\frac{3V_0^2}{2\zeta^2} + \frac{V_0 \hbar^2}{\zeta m_{hh}} \left(\frac{\xi}{a}\right)^2} \end{aligned} \quad (7)$$

Considerando el efecto del campo eléctrico incorporado, se calcula la energía de transición electrón-hueco del estado base del QW $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$. Dentro de esta aproximación, la energía de transición entre el estado confinado de electrón-hueco se pueden escribir como

$$\delta E = \delta E_{PL} + \delta \varepsilon_e + \delta \varepsilon_{hh}, \quad (8)$$

donde δE_{PL} es el pico teórico del PL en un QW de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As} / \text{GaAs}$, $\delta \varepsilon_e$ y $\delta \varepsilon_{hh}$ son las energías de confinamiento de electrones y huecos pesados debido al campo eléctrico. Nuestro potencial está sujeto a un campo uniforme, donde se ha considerado una partícula de carga e y masa efectiva m^* en un QW finito de ancho $2a$:

$$U(z) = \begin{cases} U_0(z) + eFz, & \& -a < 0 < a \\ U_0(z), & \& z \geq a \wedge z \leq -a \end{cases} \quad (9)$$

donde $U_0(z)$ el potencial propuesto, z es la coordenada a lo largo del eje crecimiento del QW, y F es el campo eléctrico. Para calcular la energía del estado base se aplicó el método variacional. Se utiliza la función de onda variacional propuesta por Bastard (1983).

$$\Psi(\beta) = N_\beta \left(1 + \frac{\beta z}{2a}\right) \Psi_0(z) \quad (10)$$

donde β es el parámetro variacional, $\Psi_0(z)$ es la función de onda del estado base del pozo propuesto y $N_\beta = \sqrt{(2a)^2 / (2a)^2 + \beta^2 \langle z^2 \rangle}$ es la constante de normalización con $\langle z^2 \rangle = \langle \Psi_0(z) | z^2 | \Psi_0(z) \rangle$. La energía para minimizar puede ser escrita como

$$E = E_0 + \frac{(2a)^2}{[(2a)^2 + \beta^2 \langle z^2 \rangle]} \left[\frac{3\hbar^2 \beta^2}{32ma^2} + \frac{eF\beta}{a} \langle z^2 \rangle \right] \quad (11)$$

En el límite de campos débiles: $\frac{m^2 e^2 F^2 \langle z^2 \rangle^3}{\hbar^4} \ll 1$ se calcula el valor de β que hace mínimo la energía, obteniendo:

$$\beta = -\frac{16ameF}{3\hbar^2} \langle z^2 \rangle \quad (12)$$

Reemplazando la ecuación (12) en la ecuación (11) y considerando el límite de campos débiles se obtiene:

$$E = E_0 - \frac{8}{3} m \left(\frac{eF}{\hbar} \langle z^2 \rangle \right)^2 \quad (13)$$

Para encontrar la energía del estado base en nuestro modelo, es necesario calcular $\langle z^2 \rangle$:

$$\langle z^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4mE_0} \operatorname{erf} \left(a \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}} \right) - \left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE_0\pi}} \right) \exp \left[\frac{-2a^2 mE_0}{\hbar^2} \right] \quad (14)$$

y al sustituir en la ecuación (13) se encuentra el cambio de energía inducido por el campo eléctrico ($\delta\varepsilon_e = E - E_0$).

$$\delta\varepsilon_e = -\frac{8}{3} m \left(\frac{eF}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{4mE_0} \operatorname{erf} \left(a \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}} \right) - \left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE_0\pi}} \right) \exp \left[\frac{-2a^2 mE_0}{\hbar^2} \right] \right) \right)^2 \quad (15)$$

La cual predice un cambio de la energía que depende del campo eléctrico al cuadrado. Dentro de este modelo, es posible calcular el desplazamiento de los niveles de energía electrónica por medio de la ecuación. (8) como:

$$\begin{aligned} \delta E = E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}) - 2\frac{V_0}{\zeta} + \sqrt{\frac{3V_0^2}{2\zeta^2} + \frac{V_0\hbar^2}{\zeta m_e} \left(\frac{\xi}{a}\right)^2} + \sqrt{\frac{3V_0^2}{2\zeta^2} + \frac{V_0\hbar^2}{\zeta m_{hh}} \left(\frac{\xi}{a}\right)^2} - \\ \frac{8}{3}m_e \left(\frac{eF}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{4m_e E_{0e}} \text{erf} \left(a \sqrt{\frac{2m_e E_{0e}}{\hbar^2}} \right) - \left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_e E_{0e}\pi}} \right) \exp \left[\frac{-2a^2 m_e E_{0e}}{\hbar^2} \right] \right) \right)^2 \\ - \frac{8}{3}m_{hh} \left(\frac{eF}{\hbar} \left(\frac{\hbar^2}{4m_{hh} E_{0hh}} \text{erf} \left(a \sqrt{\frac{2m_{hh} E_{0hh}}{\hbar^2}} \right) - \left(\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_{hh} E_{0hh}\pi}} \right) \exp \left[\frac{-2a^2 m_{hh} E_{0hh}}{\hbar^2} \right] \right) \right)^2 \end{aligned} \quad (16)$$

3. Comparación del modelo con resultados experimentales

La diferencia entre el parámetro de red del InAs y el GaAs es de aproximadamente el 7%, generando una deformación intrínseca en el ternario InGaAs. Este nivel considerable de deformación debe tenerse en cuenta en las simulaciones teóricas. La corrección de la banda de energía puede ser dada por

$$\Delta E = -2a \left[\frac{C_{11}-C_{12}}{c_{11}} \right] \varepsilon - b \left[\frac{C_{11}+2C_{12}}{c_{11}} \right] \varepsilon \quad (17)$$

donde a es el potencial de deformación hidrostática, b es el potencial de deformación de esfuerzo cortante, C_{11} y C_{12} son las constantes elásticas, y ε es la deformación por compresión. Por lo tanto, considerando la deformación intrínseca, la energía de banda prohibida del ternario $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ a una temperatura T viene dada por la expresión:

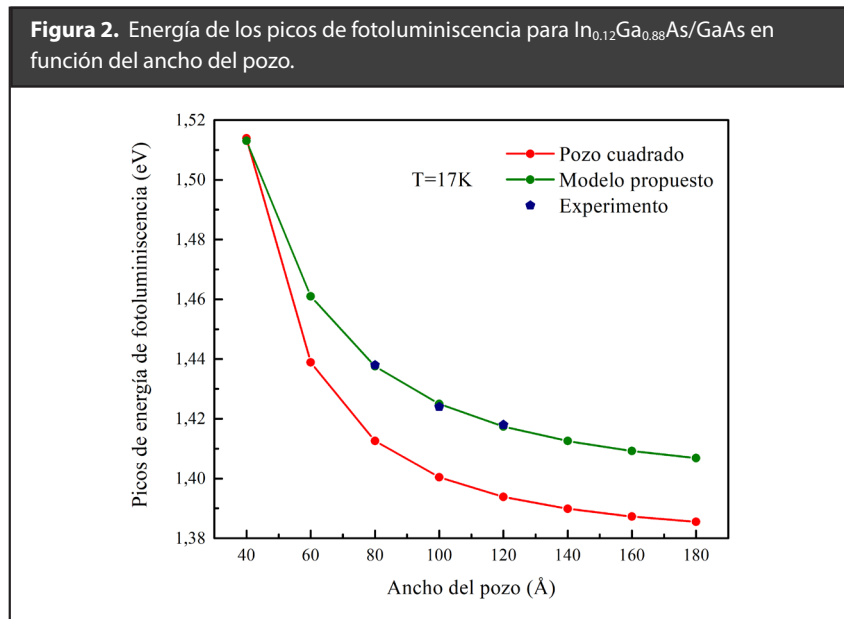
$$E_g = E_g^0 + \Delta E - \frac{\alpha + T^2}{\beta + T} \quad (18)$$

donde E_g^0 es la energía de banda prohibida a 2 K del material $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sin deformación en función de la composición de indio. Los parámetros dependientes de la composición correspondientes a los cálculos de la energía de banda prohibida del ternario $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Variación de los parámetros InGaAs en función de la fracción In, ver Vurgaftman et al. (2001).

Cantidad	Variación con x
Energía de banda prohibida: E_g^0 (eV)	$1,519-1,579x+0,477x^2$
Masa efectiva del electrón: m_e (m_0)	$0,067-0,05x+0,009x^2$
Masa efectiva del hueco: m_{hh} (m_0)	$0,35+0,129x-0,145x^2$
a: potencial de deformación de tensión hidrostática (eV)	$-7,17+2,09x$
b: potencial de deformación de cizallamiento (eV)	$-2+0,2x$
C_{11} Constante elástica (TPa)	$1,221-0,3881x$
C_{12} Constante elástica (TPa)	$0,566-0,1134x$
Tensión de compresión: ε	$0,0717x$
Parámetros ajustables de Varshni: α (meV/K)	$0,5405-0,2645x$
Parámetros ajustables de Varshni β (K):	$204-111x$

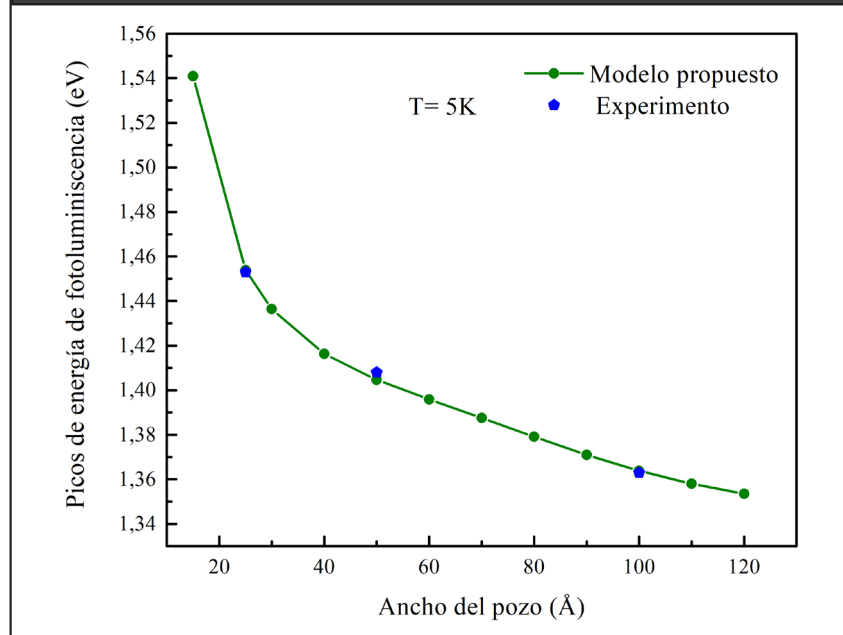
Para comparar correctamente los valores teóricos con los datos experimentales PL, el pico de energía teórica sin considerar el efecto del campo eléctrico, está dado por la ecuación (7) (δE_{PL}). En la figura 2 se ubican las posiciones de pico de fotoluminiscencia de tres pozos cuánticos simples de $\text{In}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}/\text{GaAs}$ en 1.438, 1.424 y 1.418 eV para 80, 100 y 120 nm (pentágonos azules) reportados por Srinivasan et al. (2001). Los círculos rojos representan las energías calculadas de transiciones sin la segregación de In. Como se puede observar en la figura 2, las energías de pico experimentales se encuentran desplazadas a energías más altas que los valores predichos por el modelo del pozo cuadrado. Cuando se tiene en cuenta la segregación, se observa que los puntos experimentales están estrechamente relacionados con el cálculo del modelo (puntos verdes).



Nuestro estudio se basa en la comparación de los espectros PL con las energías de transición sujeto a un potencial eléctrico uniforme. Con la finalidad de comparar los resultados obtenidos de nuestro modelo, se consideraron los trabajos realizados por: Rojas-Ramírez et al. (2008); Hiyazuma et al. (1999) y Martini et al. (2010).

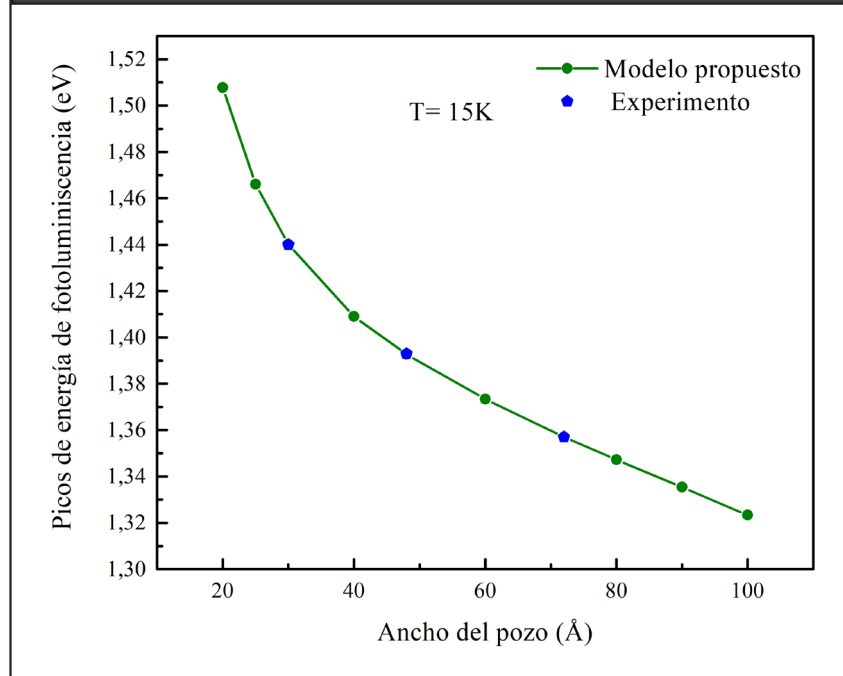
Rojas-Ramírez et al. (2008) estudiaron las propiedades de fotoluminiscencia PL de pozos cuánticos de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ crecidas por MBE en sustratos de Silicio (311). La estructura consistía en tres pozos cuánticos de 100, 50 y 25 Å de espesor. En la figura 3 se muestran las posiciones experimentales de fotoluminiscencia realizada a una temperatura de 5K de QW's individuales de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ crecidos sobre sustratos de Si (311); las energías de los picos de PL están localizados en 1,363, 1,408 y 1,453 eV los cuales corresponden a la emisión de los QW's de 100, 50 y 25 Å respectivamente. La tensión incorporada en el QW de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ induce un campo eléctrico con una intensidad de $1,12 \times 10^7$ V/m. También se graficó la energía de pico teórica del PL como una función del ancho del QW dado por la ecuación (16). Se observa que, empleando el modelo para este pozo, nuestros cálculos teóricos de las transiciones e-hh se acoplan notablemente con la emisión observada de PL. El campo eléctrico interno en el QW obtenido de los ajustes es de $3,15 \times 10^7$ V/m utilizando una concentración nominal de In del 20%. La magnitud del campo eléctrico reportada está en concordancia con el campo eléctrico teórico en el QW de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$.

Figura 3. Energía de los picos de fotoluminiscencia a 5K para QWs de $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ sobre sustratos de Si (311) en función del ancho del pozo. Los pentágonos azules representan los valores experimentales obtenidos mediante la técnica de fotoluminiscencia para las energías de transición e-hh. Los puntos verdes representan los valores teóricos obtenidos, considerando un campo eléctrico de $3,15 \times 10^7$ V/m.



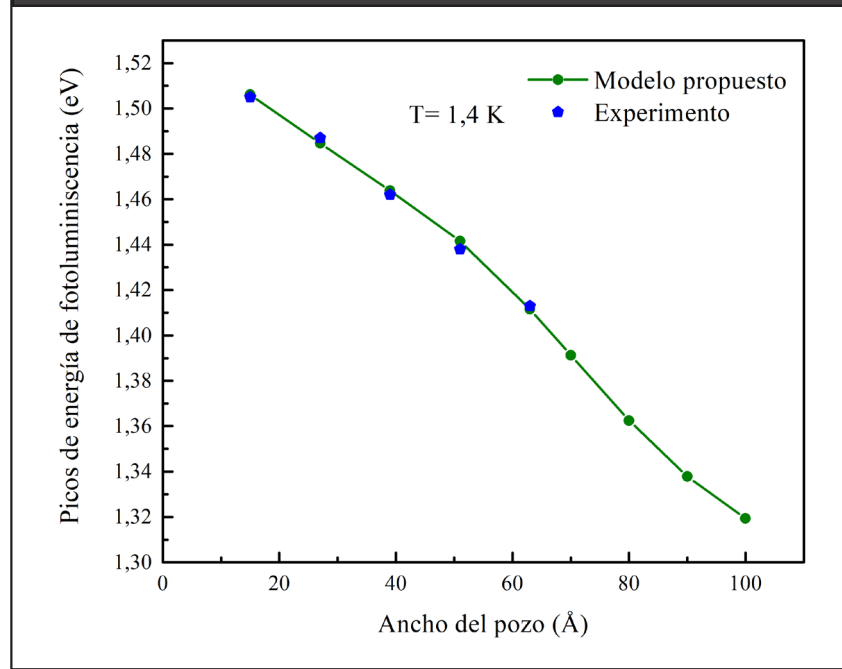
Hiyazuma et al. (1999) reportaron medidas de fotoluminiscencia a 15K de pozos cuánticos de $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}/\text{GaAs}$ sobre sustratos de GaAs (100) crecidos por la técnica de MBE. Ellos reportan tres picos: 861 nm (1,440 eV), 890 nm (1,393 eV) y 914 nm (1,357 eV) que corresponden a pozos cuánticos de ancho 3,0, 4,8 y 7,2 nm respectivamente. En la figura 4 se muestran las posiciones experimentales de fotoluminiscencia de estos picos y la energía de pico teórica del PL como una función del ancho del QW dado por la ecuación (16). Se observa también, que estos cálculos teóricos de las transiciones e-hh se acoplan notablemente bien con la emisión observada de PL. Para este pozo el campo eléctrico obtenido de los ajustes es de $2,05 \times 10^7$ V/m. Los valores de campo son valores típicos obtenidos a partir de la interfaz capa de sustrato-buffer de GaAs como lo reportado por Chan et al. (1998), Dickey et al. (1998), y Sun y Towe (1994).

Figura 4. Energía de los picos de fotoluminiscencia a 15K para QWs de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ sobre substratos de GaAs (100) en función del ancho del pozo. Los pentágonos azules representan los valores experimentales obtenidos mediante la técnica de fotoluminiscencia para las energías de transición e-hh. Los puntos verdes representan los valores teóricos obtenidos, considerando un campo eléctrico de $2,05 \times 10^7$ V/m.



Martini et al. (2010) crecieron una muestra por la técnica de MBE. La muestra consistió en una capa amortiguadora de 12500 Å de GaAs de espesor obtenida a 600 °C. La estructura completa consistió en cinco pozos cuánticos (QWs) de $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}$ de diferentes espesores de 63, 51, 39, 27, y 15 Å crecidos a 530 °C y rodeados por barreras de GaAs de 500 Å de espesor crecido a 600 °C. En la misma muestra, hay tres QWs GaAs de diferentes espesores de 150, 70 y 35 Å crecidos a 580 °C y rodeados por barreras $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ de 500 Å de espesor crecidos a 587 °C. Los valores obtenidos de los picos de fotoluminiscencia en los QWs de $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}/\text{GaAs}$ de espesores 15, 27, 39, 51 y 63 Å, fueron 1,505, 1,487, 1,462, 1,438 y 1,413 eV respectivamente. Cada pico se identifica con la correspondiente energía de transición entre los estados base de los electrones y los huecos pesados. La medida de fotoluminiscencia fue realizada a 1,4 K. En la figura 5 se muestran las posiciones experimentales de fotoluminiscencia de estos picos, así como la energía de pico teórica del PL como una función del ancho del QW dado por la ecuación (16). Nuevamente se observa que nuestros cálculos teóricos de las transiciones e-hh se acoplan notablemente bien con la emisión observada de PL. Para este pozo el campo eléctrico obtenido de los ajustes es de $7,79 \times 10^7$ V/m.

Figura 5. Energía de los picos de fotoluminiscencia a 1,4 K para QWs de $\text{In}_{0,16}\text{Ga}_{0,84}\text{As}/\text{GaAs}$ en función del ancho del pozo. Los pentágonos azules representan los valores experimentales obtenidos mediante la técnica de fotoluminiscencia para las energías de transición e-hh. Los puntos verdes representan los valores teóricos obtenidos, considerando un campo eléctrico de $7,79 \times 10^7 \text{ V/m}$.



4. Conclusiones

Se ha desarrollado un modelo el cual predice un cambio de la energía en pozos cuánticos, teniendo en cuenta el efecto de la segregación superficial y el campo eléctrico interno. Para esto, se ha considerado un potencial simétrico tipo Cauchy. Se encontró que la elección del pozo propuesto es bastante útil para estudiar la sensibilidad de la segregación superficial en el pozo cuántico y, por lo tanto, en la energía de transición entre los estados base del electrón y del hueco pesado. Picos experimentales de energía de fotoluminiscencia de pozos cuánticos de $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ fueron ajustados dentro de este modelo en función del espesor del pozo, y se encontró una buena concordancia entre las energías de transición teórica y experimental. El modelo fue aplicado al caso de segregación de indio en pozos cuánticos de $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$ para campos eléctricos internos moderados. Los cálculos de la energía de transición entre el electrón confinado y hueco en función del ancho del pozo y la composición están de acuerdo con los picos medidos de energía de PL para diferentes temperaturas. La magnitud del campo eléctrico interno obtenido del modelo está en concordancia con el reportado.

5. Agradecimientos

Huberney Celemín Sánchez expresa su agradecimiento a la Oficina Central de Investigación de la Universidad del Tolima por el soporte financiero.

6. Referencias

- Ahn, D.; Chuang, S. L. (1986). Variational calculations of subbands in a quantum well with uniform electric field: Gram-Schmidt orthogonalization approach. *Applied Physics Letters*, 49(21), pp. 1450–1452. <https://doi.org/10.1063/1.97299>
- Bastard, G.; Mendez, E. E.; Chang, L. L.; Esaki, L. (1983). Variational calculations on a quantum well in an electric field. *Physical Review B*, 28(6), pp. 3241–3245. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.28.3241>
- Bonef, B.; Catalano, M.; Lund, C.; Denbaars, S. P.; Nakamura, S.; Mishra, U. K.; Kim, M. J.; Keller, S. (2017). Indium segregation in N-polar InGaN quantum wells evidenced by energy dispersive X-ray spectroscopy and atom probe tomography. *Applied Physics Letters*, 110(14), pp. 143101. <https://doi.org/10.1063/1.4979786>
- Chan, C. H.; Chen, Y. F.; Chen, M. C.; Lin, H. H.; Jan, G. J.; Chen, Y. H. (1998). Photoreflectance spectroscopy of strained-layer (111)B InGaAs/GaAs quantum well diodes. *Journal of Applied Physics*, 84(3), pp. 1595–1601. <https://doi.org/10.1063/1.368229>
- Chenini, L.; Aissat, A.; Ammi, S.; Vilcot, J. P. (2021). Investigation of temperature, well width and composition effects on the intersubband absorption of InGaAs/GaAs quantum wells. *Lecture Notes in Electrical Engineering*, 681, pp. 325–332. https://doi.org/10.1007/978-981-15-6259-4_34
- Deng, Z.; Jiang, Y.; Wang, W.; Cheng, L.; Li, W.; Lu, W.; Jia, H.; Liu, W.; Zhou, J.; Chen, H. (2014). Indium segregation measured in InGaN quantum well layer. *Scientific Reports*, 4, pp. 6734. <https://doi.org/10.1038/srep06734>
- Dickey, S. A.; Majerfeld, A.; Sánchez-Rojas, J. L.; Sacedón, A.; Muñoz, E.; Sanz-Hervás, A.; Aguilar, M.; Kim, B. W. (1998). Direct determination of the piezoelectric field in (111) strained InGaAs/GaAs multiple quantum well p-i-n structures by photoreflectance. *Microelectronic Engineering*, 43–44, pp. 171–177. [https://doi.org/10.1016/S0167-9317\(98\)00160-9](https://doi.org/10.1016/S0167-9317(98)00160-9)
- Dong, H.; Sun, J.; Ma, S.; Liang, J.; Lu, T.; Liu, X.; Xu, B. (2016). Influence of substrate misorientation on the photoluminescence and structural properties of InGaAs/GaAsP multiple quantum wells. *Nanoscale*, 8(11), pp. 6043–6056. <https://doi.org/10.1039/C5NR07938A>
- G. Gonzalez de la Cruz. (2004). The Influence of surface segregation on the optical properties of semiconductor quantum wells. *Journal of Applied Physics*, 96(7), pp. 3752–3755. <https://doi.org/DOI:10.1063/1.1789628>
- Gonzalez de la Cruz, G.; Arenas, A. C.; Herrera, H. (2005). Internal electric-field and segregation effects on luminescence properties of quantum wells. *Journal of Applied Physics*, 98(2). <https://doi.org/10.1063/1.1954889>
- Hiyamizu, S.; Ohno, Y.; Higashiwaki, M.; Shimomura, S. (1999). In_{0.15}Ga_{0.85}As/GaAs quantum wire structures grown on (553)B GaAs substrates by molecular beam epitaxy. *Journal of Crystal Growth*, 201(202), pp. 824–827.
- Loykaew, A.; Usher, B. F.; Jones, R. T.; Pigram, P. J. (2013). A Novel Sample Structure for the Measurement of Indium Segregation Profiles in GaAs/InGaAs/GaAs Heterostructures. *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, 3(3), pp. 191–197. <https://doi.org/10.7763/IJAPM.2013.V3.204>
- Martínez-Rendón, V.; Castaño-Uribe, C.; Giraldo-Martínez, A.; González-Pereira, J. P.; Restrepo-Arango, R. L.; Morales-Armburu, Á. L.; Duque-Echeverri, C. A. (2016). Potencial de Morse como perfil de pozos cuánticos semiconductores. *Revista EIA*, 12(3), pp. 85–94. <https://doi.org/10.24050/reia.v12i2.966>
- Martini, S.; Manzoli, J. E.; Quivy, A. A. (2010). Study of the influence of indium segregation on the optical properties of InGaAs/GaAs quantum wells via split-operator method. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*, 28(2), pp. 277–283. <https://doi.org/10.1116/1.3301612>
- Massabuau, F. C.-P.; Rhode, S. L.; Horton, M. K.; O’Hanlon, T. J.; Kovács, A.; Zielinski, M. S.; Kappers, M. J.; Dunin-Borkowski, R. E.; Humphreys, C. J.; Oliver, R. A. (2017). Dislocations in

- AlGaIn: Core Structure, Atom Segregation, and Optical Properties. *Nano Letters*, 17(8), pp. 4846–4852. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b01697>
- Mehrtens, T.; Müller, K.; Schowalter, M.; Hu, D.; Schaadt, D. M.; Rosenauer, A. (2013). Measurement of indium concentration profiles and segregation efficiencies from high-angle annular dark field-scanning transmission electron microscopy images. *Ultramicroscopy*, 131, pp. 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2013.03.018>
- Muraki, K.; Fukatsu, S.; Shiraki, Y. (1992). Surface segregation of In atoms during molecular beam epitaxy and its influence on the energy levels in InGaAs/GaAs quantum wells. *Applied Physics Letters*, 61(5), pp. 10.1063/1.107835.
- Muraki, K.; Fukatsu, S.; Shiraki, Y.; Ito, R. (1992). Surface segregation of In atoms during molecular beam epitaxy and its influence on the energy levels in InGaAs/GaAs quantum wells. *Applied Physics Letters*, 61(5), pp. 557–559. <https://doi.org/10.1063/1.107835>
- Rojas-Ramírez, J. S.; Goldhahn, R.; Moser, P.; Huerta-Ruelas, J.; Hernández-Rosas, J.; López-López, M. (2008). Temperature dependence of the photoluminescence emission from In_xGa_{1-x}As quantum wells on GaAs(311) substrates. *Journal of Applied Physics*, 104(12), pp. 1–6. <https://doi.org/10.1063/1.3043578>
- Schowalter, M.; Rosenauer, A.; Gerthsen, D. (2006). Influence of surface segregation on the optical properties of semiconductor quantum wells. *Applied Physics Letters*, 88(11), pp. 111906. <https://doi.org/10.1063/1.2184907>
- Shan, R.; Liu, Y.; Guo, J.; Wang, G.; Xu, Y. (2016). Growth and characterization of high strain InGaAs/GaAs quantum well by molecular beam epitaxy. 10157, pp. 101573F. <https://doi.org/10.1117/12.2247398>
- Smith, D. L.; Mailhot, C. (1988). Piezoelectric effects in strained-layer superlattices. *Journal of Applied Physics*, 63(8), pp. 2717–2719. <https://doi.org/10.1063/1.340965>
- Song, K.-M.; Kim, J.-M.; Kang, B.-K.; Yoon, D.-H.; Kang, S.; Lee, S.-W.; Lee, S.-N. (2012). Characteristics of indium incorporation in InGaIn/GaN multiple quantum wells grown on a-plane and c-plane GaN. *Applied Physics Letters*, 100(21), pp. 212103. <https://doi.org/10.1063/1.4720507>
- Srinivasan, T.; Muralidharan, R.; Mehta, S. K.; Jain, B. P.; Singh, S. N.; Jain, R. K.; Kumar, V. (2001). Characterisation of molecular beam epitaxy-grown InGaAs multilayer structures using photoluminescence. *Vacuum*, 60(4), pp. 425–429. [https://doi.org/10.1016/S0042-207X\(00\)00223-2](https://doi.org/10.1016/S0042-207X(00)00223-2)
- Sun, D.; Towe, E. (1994). Strain-Generated Internal Fields in Pseudomorphic (In, Ga)As/GaAs Quantum Well Structures on {111} GaAs Substrates. *Japanese Journal of Applied Physics*, 33(Part 1, No. 1B), pp. 702–708. <https://doi.org/10.1143/JJAP.33.702>
- Vurgaftman, I.; Meyer, J. R.; Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, 89(11 I), pp. 5815–5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>
- Wu, S.; Huang, Z.; Liu, Y.; Huang, Q.; Guo, W.; Cao, Y. (2009a). The effects of indium segregation on the valence band structure and optical gain of GaInAs/GaAs quantum wells. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, 41(9), pp. 1656–1660. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2009.05.019>
- Wu, S.; Huang, Z.; Liu, Y.; Huang, Q.; Guo, W.; Cao, Y. (2009b). The effects of indium segregation on exciton binding energy and oscillator strength in GaInAs/GaAs quantum wells. *Superlattices and Microstructures*, 46(4), pp. 618–626. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2009.06.001>
- Yildirim, H.; Tomak, M. (2006). Optical absorption of a quantum well with an adjustable asymmetry. *The European Physical Journal B*, 50(4), pp. 559–564. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2006-00182-1>