

SOBRE LOS EVENTOS QUE SE DESATAN CUANDO LA LUZ INCIDE SOBRE UNA NANOESTRUCTURA

ABOUT THE EVENTS TRIGGERED WHEN THE LIGHT IMPINGES ON A NANOSTRUCTURE

**Álvaro L. Morales¹, Carlos M. Duque¹, Ricardo L. Restrepo²,
Miguel E. Mora-Ramos³, Carlos A. Duque¹**

¹ Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

² Escuela de Ingeniería de Antioquia-EIA, Medellín, Colombia

³ Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, CP 62209 Cuernavaca, Morelos, México

(Recibido: Octubre/2015. Aceptado: Enero/2016)

Resumen

La interacción de la radiación con la materia es un hecho cotidiano en la naturaleza, se pueden recordar fenómenos como la fotosíntesis, interacción de la luz solar con las plantas para generar alimento y la generación de la vitamina D en nuestra piel. Con la formación de sistemas masivos, galaxias, estrellas, planetas, en los albores del universo, se establece la radiación electromagnética, la cual se caracteriza por contener ondas con longitudes desde los kilómetros, ondas de radio, hasta longitudes menores que 10^{-12} m, rayos gama, pasando por la radiación visible detectada por nuestra retina. En este artículo divulgativo, dirigido al público en general, basado en la investigación de Duque et al [1], se va a tratar acerca de los conceptos involucrados en la interacción de la luz con nanoestructuras semiconductoras.

Palabras Clave: Interacción luz-materia, Excitones, Pozos cuánticos, Absorción óptica.

Abstract

The interaction of radiation with matter is an everyday event in nature, we can recall phenomena such as photosynthesis, sunlight interaction with plants to produce food and the generation of vitamin D in our skin. With the formation of massive systems, galaxies, stars, planets, in the early universe, electromagnetic radiation was established, which is characterized by containing wavelengths from the kilometer radio

waves to shorter lengths 10-12 m, gamma rays, through visible radiation detected by the retina. In this informative article, for the general public, based on the work by Duque et al [1], the objective is to describe the concepts involved in the interaction of light with semiconductor nanostructures.

Keywords: Light-matter interaction, Excitons, Quantum wells, Optical absorption.

Introducción

En los albores del universo, aproximadamente 300000 años después de la gran explosión, ocurrió lo que se llama el desacople de la radiación y la materia debido a que el descenso de la temperatura permitió la formación de los átomos y que la radiación de fondo cesara de interactuar con la materia, consultar <http://www.einsteinonline.info> [2]. Con la subsecuente formación de sistemas masivos, galaxias, estrellas, planetas, se establece el espectro electromagnético. Se puede imaginar, basados en estos hechos, que la interacción de la radiación con la materia es muy diversa y ocupa todos los espacios investigados por la ciencia y la técnica. A manera de ilustración se mencionan algunos desarrollos modernos como la imagenología de resonancia magnética, aplicaciones de rayos X, el sistema de posicionamiento global (GPS), comunicaciones mediante fibras ópticas, etc.

En el mundo actual ha cobrado una importancia fundamental la investigación en estructuras nanométricas de materiales debido a las múltiples aplicaciones y en la potencialidad de obtener nuevas aplicaciones soñadas por la humanidad, como son nuevas formas de diagnosticar y tratar las enfermedades disminuyendo el impacto traumático sobre el paciente, novedosas formas de comunicación más eficientes y seguras, computadores cuánticos basados en las propiedades del espín, el cual es una propiedad intrínseca de las partículas que forman la materia como el electrón, el protón y el neutrón. Además, el desarrollo de técnicas para viajes largos en el universo, y muchas otras que el lector conozca promocionadas por los medios de comunicación.

En este artículo divulgativo, basado en el estudio realizado por Duque et al [1] y referencias allí incluidas, se va a tratar acerca de la interacción de la luz, en el rango del infrarrojo, con nanoestructuras semiconductoras del tipo pozos cuánticos. Para comprender la interacción luz-materia es necesario describir los estados energéticos que aparecen en estos sistemas debido al confinamiento geométrico, las funciones de onda que corresponden a cada estado de energía, y el resultado final de la interacción de la luz con las heteroestructuras. Estos sistemas consisten en varias capas (Figura 1), con tamaño nanométrico, de diferentes materiales semiconductores que presentan propiedades únicas como las que se describen más adelante.

Específicamente, la heteroestructura que vamos a describir es un pozo cuántico, la Figura 1 define este sistema, de InGaN, nitruro de indio y galio, entre barreras de GaN, nitruro de galio, al cual se le aplica una presión hidrostática y un campo eléctrico externo. Hemos usado este material debido a la importancia que ha adquirido en los últimos años para el diseño de nuevos dispositivos optoelectrónicos, que se ha logrado obtener de manera más pura, con concentraciones intrínsecas menores de electrones, lo que ha permitido doparlo con impurezas aceptoras. Este logro ha llevado el año 2014 al otorgamiento del premio nobel en Física a tres investigadores japoneses, Akasaki, Amano, y Nakamura [3]. Más adelante se describirá en detalle cada una de las características de este pozo cuántico para que el lector comprenda mejor la física planteada en este trabajo. La heteroestructura es irradiada con luz de energía en el rango de 100 meV (mili-electrón voltios) cuya longitud de onda es de 12400 nm o 0.0124 mm, situada en la región del infrarrojo. Se estudiará como es el proceso de absorción de esta energía y como se afecta el proceso con la aplicación de la presión hidrostática y el campo eléctrico.

Descripción del modelo

La Figura 1, izquierda, muestra el pozo cuántico, el cual se obtiene usando métodos de crecimiento por capas. Las capas se crecen en la secuencia mostrada, con espesores del orden de nanómetros, y el resultado desde el punto de vista de la energía de un electrón en la nanoestructura se describe en la parte derecha de la Figura 1, donde la flecha gruesa vertical es la escala de energías y la flecha horizontal gruesa es la dirección de crecimiento de la heteroestructura.

La porción central del diagrama de energías constituye el pozo cuántico y corresponde al material InGaN, el cual posee una banda prohibida, o gap, señalado por la flecha vertical delgada, más pequeño que el material de las barreras de GaN. El gap es una región de energías prohibidas, para los portadores de carga, que separa el tope de la banda de valencia y el fondo de la banda de conducción, y ningún electrón, o hueco, puede tener energías en ese rango. InGaN este material se obtiene a partir del GaN introduciéndole una pequeña concentración de indio In y de esta forma se reduce su gap.

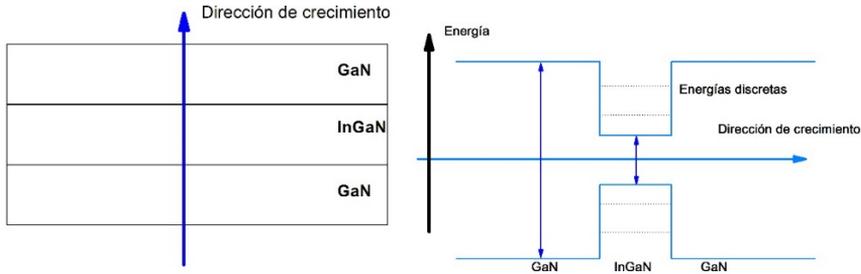


FIGURA 1. Al lado izquierdo se describe el crecimiento de la heteroestructura por el método de capas. A la derecha se describe la distribución de energías de la heteroestructura, mostrando el pozo cuántico que se forma debido a la diferencia entre los gap de ambos materiales.

Los huecos son portadores de carga que residen en la banda de valencia de los semiconductores y poseen la misma carga y espín de los electrones pero su masa es diferente, ellos también contribuyen a la corriente eléctrica del semiconductor. En este modelo la masa de los portadores se considera como una masa efectiva que incluye la interacción de estos con la red con lo cual se simplifican los cálculos. Los electrones se encuentran en la banda de conducción del semiconductor. Los portadores, electrones y huecos, que se encuentren en esta región central de energías correspondiente a InGaN, excepto en el gap, quedan atrapadas, o confinadas debido a que tienen una energía menor que las energías que definen el gap correspondiente al material GaN. Los electrones y huecos se pueden originar en esta región, InGaN, por introducción de impurezas donadoras o aceptoras, por generación térmica, o por inyección desde la región de las barreras. Las partículas allí atrapadas no pueden escapar de esta región porque no tienen la energía suficiente para saltar a la región por encima del nivel superior de las barreras, las energías que limitan el gap del GaN; por supuesto, si se les da energía suficiente las podemos sacar de su confinamiento. La situación de confinamiento energético, que muestra la Figura 1, adicionado al pequeño espacio disponible, en la dirección de crecimiento, lleva, de acuerdo a la mecánica cuántica, a la aparición de nuevos estados discretos de energía dentro del rango de energía del pozo. En la Figura 1, derecha, se señalan dos estados de energía de electrones, parte superior o banda de conducción, y dos estados de energía de huecos, parte inferior o banda de valencia.

En este estudio se construye un modelo de la situación que deseamos investigar, con este fin, se considera un electrón en un estado energético en la parte superior, ver la Figura 2, que es la banda de conducción en la región del pozo, y un hueco en un estado energético en la parte inferior, que es la banda de valencia. Este par de portadores de carga, el electrón, con carga negativa, y el hueco, con carga positiva interactúan debido a la ley de Coulomb que describe la atracción de dos cargas de signo opuesto. Este par de portadores interactúan como una sola partícula a la que se conoce como un excitón. Este sistema es muy importante en semiconductores y tiene mucha influencia en sus

propiedades ópticas, especialmente a temperaturas bajas. La Figura 2 muestra, además, los números cuánticos que describen los estados de energía para los portadores.

Las propiedades del excitón van a variar con el ancho del pozo, la altura de las barreras, la presión hidrostática y el campo eléctrico; y además, las propiedades ópticas también dependerán de las mismas variables. En este pozo el confinamiento es solo en la dirección de crecimiento; por lo tanto la presión hidrostática actúa hacia la derecha en el borde izquierdo del material InGaAs y actúa hacia la izquierda en el borde derecho del material. El propósito de este estudio es investigar estas propiedades básicas y ópticas con el fin de plantear posibles aplicaciones de este sistema, pozo cuántico de InGaN.

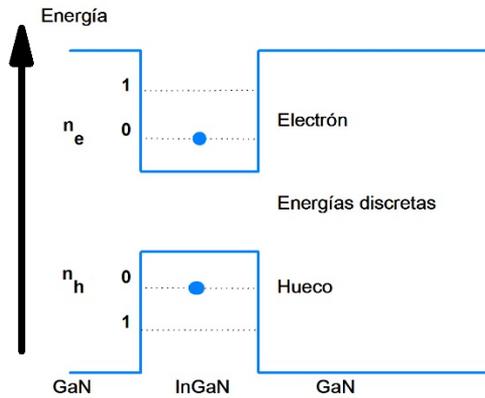


FIGURA 2. Se muestran los números cuánticos de electrones y huecos, n_e y n_h , los niveles cuantizados, y un electrón y un hueco que constituyen el excitón objeto de este estudio.

Teoría para calcular las propiedades de las heteroestructuras

En mecánica cuántica las cantidades físicas son las mismas de la mecánica clásica, pero adquieren la forma de operadores diferenciales o multiplicativos. La ley básica para tratar las heteroestructuras es la ecuación de Schrödinger de la mecánica cuántica,

$$H\varphi = E\varphi \quad (1)$$

donde H es el operador Hamiltoniano del excitón, el cual corresponde a la energía total del sistema, suma de la energía cinética y la energía potencial;

φ es la función de onda del excitón, la cual describe el movimiento del excitón; y E los autovalores de la energía para el excitón, los cuales dan cuenta de las

energías discretas que puede adquirir este sistema. Las Figuras 1 y 2 muestran cualitativamente las energías discretas que se deben obtener. H es un operador diferencial, ya que la energía cinética es un operador diferencial, y la ecuación de Schrödinger es una ecuación diferencial.

El Hamiltoniano del excitón se construye como la suma de las energías del par electrón-hueco, estas incluyen las energías cinética del electrón, E_{ce} , y el hueco, E_{ch} , la energía potencial del confinamiento en el pozo para ambas partículas, V_e y V_h , la energía Coulombiana de atracción entre ellas, $E_{atraccion}$, y la energía de interacción con el campo eléctrico externo, E_{campo} . La presión hidrostática se incluye indirectamente a través de los cambios que se inducen en la masa efectiva de electrones y huecos y en la constante dieléctrica, la cual es una cantidad que controla la generación de cargas eléctricas inducidas por un campo eléctrico externo.

$$H = E_{ce} + E_{ch} + V_e + V_h + E_{atraccion} + E_{campo} \cdot \quad (2)$$

El método usado en este estudio para resolver la ecuación (1), que es una ecuación diferencial ya que E_{ce} , E_{ch} son operadores diferenciales, consiste en definir una base completa de funciones, de acuerdo a la mecánica cuántica, que permita calcular las funciones de onda que sean soluciones para la ecuación (1) como combinaciones lineales de esta base cuyas funciones son ortogonales y normalizadas. Esta se implementa en forma muy simple considerando un problema más sencillo como es un pozo con barreras infinitas, o impenetrables, el cual proporciona una base de funciones sinusoidales, dentro de este pozo infinito se encuentra el pozo cuántico de InGaAs, Figura 3, el cual se considera con barreras finitas.

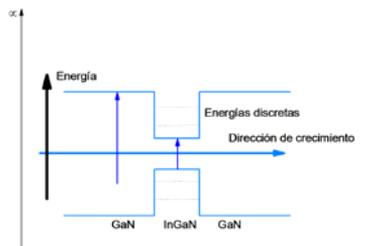


FIGURA 3. Las líneas verticales externas indican los límites de un pozo con barreras infinitas que sirve para definir el conjunto completo de funciones y dentro de este pozo se encuentra el sistema de InGaAs, con barreras finitas.

A continuación, se expande la función de onda φ , de la ecuación 1, en términos del conjunto completo de funciones sinusoidales. Esta expansión es uno de los aspectos fundamentales de la ley expresada en la ecuación 1, la ecuación o ley

de Schrödinger. Generalmente, en la expansión se consideran del orden de 200 a 300 términos. Los coeficientes de la expansión son las incógnitas que se obtienen resolviendo la ecuación diferencial.

Realmente este procedimiento, de usar un conjunto completo de funciones, permite transformar la ecuación 1, ecuación diferencial, a un conjunto de ecuaciones lineales homogéneas cuyas incógnitas son los coeficientes de la expansión. Finalmente, se obtienen las funciones de onda φ y las autoenergías E de la ecuación 1, para el pozo de InGaN/GaN.

A continuación se expone en forma más detallada el procedimiento seguido para resolver la ecuación 1. Para ello, se combinan dos metodologías. En un primer paso se reduce el Hamiltoniano, ecuación 2, a solo los cuatro primeros términos y la ecuación de Schrödinger resultante se resuelve convirtiéndola a una ecuación homogénea como se explicó arriba, con funciones de onda φ y autovalores E^{n_e, n_h} , ver la figura 2, donde n_e, n_h son los números cuánticos que caracterizan los estados de energía. Por ejemplo, $E^{0,0}$ representa la energía de un exciton con un electrón en el estado fundamental, en la banda de conducción, y un hueco en el estado fundamental, en la banda de valencia; en este paso, no se ha considerado aun la interacción Coulombiana electrón-hueco y de esta forma la energía del excitón es la sumas de las energías de cada partícula.

Para incluir los demás términos del Hamiltoniano, y así obtener la solución completa al problema planteado, se usa el método variacional, que consiste en proponer una forma aproximada para la función de onda, por ejemplo, $\psi = \varphi e^{-\lambda r}$, una función tipo átomo de hidrógeno, y minimizar el valor esperado de la energía, $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$ para obtener el parámetro λ [4]. Se usa una función tipo hidrogenoide porque un pozo con un par electrón-hueco llevados a coordenadas relativas y de centro de masa es análogo a un átomo de hidrógeno y además los resultados teóricos reproducen razonablemente bien los resultados experimentales. Esta metodología es necesaria en este caso ya que el potencial de Coulomb en la ecuación 2, $E_{atraccion}$, tiene influencia a distancias muy grandes y se necesitarían muchos términos en la expansión de la función de onda, del orden de miles, para obtener un resultado apropiado.

El proceso de absorción, mostrado en la Figura 4, consiste en que el pozo cuántico cuando este se encuentra en el estado $E^{0,0}$, Figura 4 izquierda, es irradiado con luz infrarroja, y esta energía es tomada por el excitón para pasar al estado $E^{1,1}$, Figura 4 derecha.

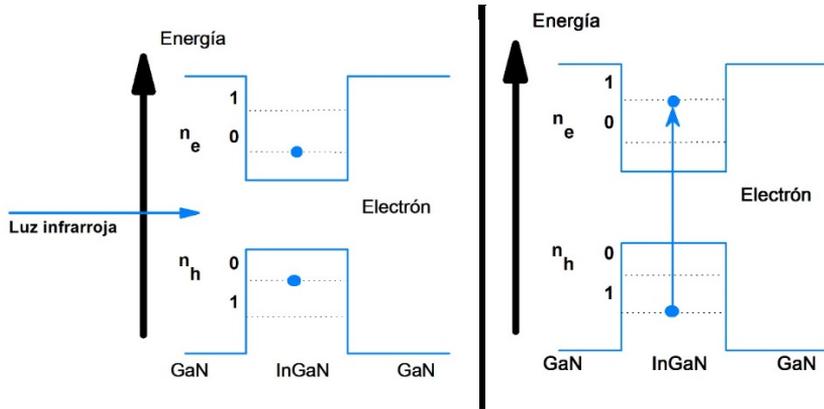


FIGURA 4. A la izquierda se muestra el proceso inicial de excitación del par electrón-hueco, donde el pozo cuántico es irradiado con fotones de longitud de onda en el infrarrojo, y el excitón se encuentra en el estado $n_e, n_h = 0$. A la derecha, durante el proceso final, el excitón absorbe la radiación y pasa al estado excitado $n_e, n_h = 1$

Resultados y discusión

La figura 5 muestra los autovalores en función de la presión aplicada y las densidades de probabilidad $\varphi\varphi^* = |\varphi|^2$, que es la cantidad fundamental de la mecánica cuántica para relacionar la función de onda con el mundo real. $|\varphi|^2$ representa densidad la probabilidad, sin incluir la interacción Coulombiana, de que un electrón o hueco se encuentren dentro del pozo cuántico en cierta posición z . Por ejemplo, en la Figura 5, vemos como al aumentar la presión los autovalores de la energía del electrón disminuyen, mientras que, los autovalores del hueco aumentan, para el estado fundamental (0,0).

En este momento se tiene la información necesaria, las funciones de onda y las energías cuánticas del pozo de InGaAs, para calcular la absorción de luz por el pozo. Esencialmente lo que se calcula es el coeficiente de absorción el cual está relacionado a la razón entre la intensidad de la luz absorbida por el pozo sobre la intensidad de la luz incidente sobre el mismo. El cálculo cuántico del coeficiente de absorción da como resultado que este depende de la probabilidad de transición entre los estados (0,0) y (1,1), Figura 4; además, se incluye la absorción no lineal que depende de la intensidad de la luz incidente, para la cual se ha usado un valor de $5 \times 10^{10} \text{ W m}^{-2}$. La no linealidad significa que para estos valores de la intensidad incidente, la intensidad transmitida no es directamente proporcional a la intensidad incidente. El coeficiente de absorción en este caso va a depender de la concentración de iones de In, del ancho del pozo cuántico, de la presión hidrostática, y del campo eléctrico aplicado. Como es de esperarse todos estos factores cambian los valores de las energías

cuánticas; por lo tanto, el proceso de cálculo debe repetirse para cada valor de los parámetros mencionados.

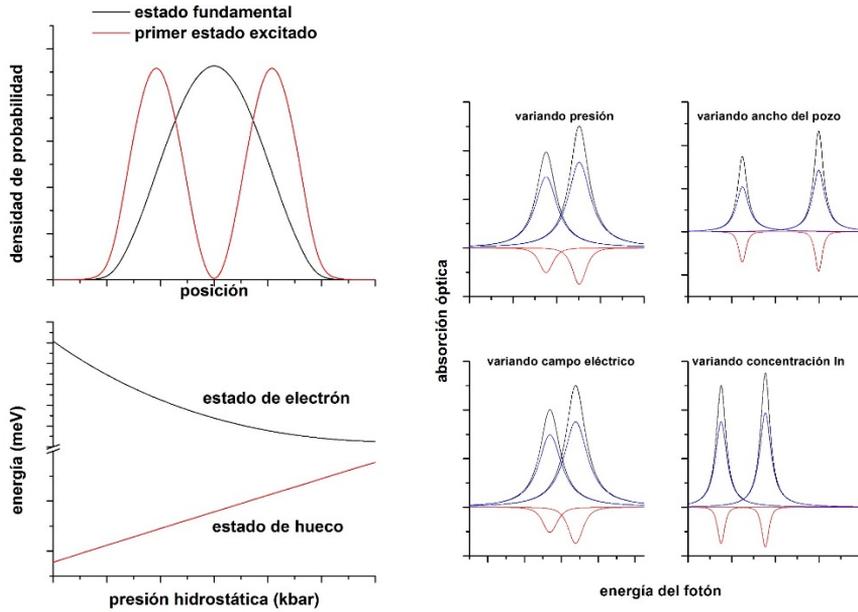


FIGURA 5. Arriba, hacia la izquierda, se encuentran las funciones de onda para los estados del excitón $(0,0)$ y $(1,1)$; abajo, izquierda, se muestran los autovalores de energía del electrón y el hueco en función de la presión hidrostática. Las gráficas de la derecha muestran el coeficiente de absorción para diferentes parámetros enunciados en el texto.

Parámetros fijos				Parámetros variables
Figura 5 arriba-izquierda	$x = 0.2$	$F = 0$	$L = 7\text{nm}$	La presión aumenta de derecha a izquierda
Figura 5 arriba-derecha	$x = 0.2$	$F = 0$	$P = 0$	El ancho del pozo aumenta de izquierda a derecha
Figura 5 abajo-izquierda	$x = 0.2$	$P = 0$	$L = 7\text{nm}$	El campo eléctrico aumenta de izquierda a derecha
Figura 5 abajo-derecha	$F = 0$	$P = 0$	$L = 7\text{nm}$	La concentración de In aumenta de izquierda a derecha

TABLA 1. Parámetros usados en este estudio. Donde x representa la concentración de átomos de In, F es la magnitud del campo eléctrico aplicado, L es el ancho del pozo y P es la presión hidrostática.

La figura 5 gráfica de la derecha (5D) y la Tabla 1 muestran los resultados del coeficiente de absorción para diferentes parámetros, el eje vertical es el coeficiente de absorción y el eje horizontal representa la energía de la radiación incidente. La Tabla 1 muestra los parámetros que se fijaron para el cálculo y el parámetro que se varió para cada caso.

En los resultados representados en la figura 5D, columna de la izquierda, la presión (curva arriba) y el campo eléctrico (curva abajo), estos parámetros se incrementan hacia la izquierda. En ambos casos, al aumentar el parámetro el pico de absorción ocurre a energías del fotón incidente menores; en el lenguaje técnico, que aquí se aplica a la región del infrarrojo, se dice que se presenta un corrimiento al rojo. En los otros casos, disminución del ancho de izquierda a derecha, segunda columna arriba, y aumento de la cantidad del metal indio, de izquierda a derecha, ocurre un desplazamiento del pico de absorción hacia mayores energías, un corrimiento al azul.

Es importante observar que una vez que se construye el pozo cuántico, con cierta longitud L y concentración de In x , sus propiedades se pueden cambiar por aplicación de agentes externos tales como la presión hidrostática y el campo eléctrico. Esto permite sintonizar el pico de absorción a una energía deseada con el fin de usar el pozo cuántico en diferentes dispositivos. La combinación de diferentes parámetros mostrados en la Tabla 1 permite cambiar el pico de absorción del sistema y este hecho es importante para diseñar aplicaciones de estas heteroestructuras.

Por ejemplo, este pozo cuántico se puede utilizar como un detector de fotones en el infrarrojo, las energías que se han usado en este trabajo están en el rango 20-100 meV. Si tenemos una molécula tóxica que emite radiación de 60 meV y queremos detectar su presencia en diferentes ambientes, construimos el fotodetector de pozo cuántico en el infrarrojo (QWIP, por sus siglas en inglés); esto es, construimos un pozo cuántico con el conjunto de parámetros adecuados de la tabla 1 y de la figura 5D, para que el pico de absorción sea de 60 meV. Así, cuando la radiación que incide sobre el fotodetector, y que contiene la componente de 60 meV, esta componente es absorbida y genera electrones en la banda de conducción y huecos en la banda de valencia los cuales son recogidos, como una fotocorriente, por un circuito externo. Esto quiere decir que, la absorción se mide como una corriente eléctrica y de esta forma sabemos que la radiación de 60 meV está presente.

Este tipo de detectores ya se usa comercialmente en cámaras infrarrojas con usos en medicina, industria, seguridad, exploración astronómica, etc.

Conclusiones

Se ha descrito, en forma conceptual, el método teórico de calcular propiedades de un pozo cuántico de InGaAs y como es su respuesta a una radiación externa. Se ha descrito también como se puede usar esta estructura en aplicaciones.

Agradecimientos

Los autores agradecen a las instituciones Colombianas CODI-Universidad de Antioquia (Estrategia de Sostenibilidad de la Universidad de Antioquia y proyectos: "On the way to development of new concept of nanostructure-based THz laser" y "Propiedades ópticas de impurezas, excitones y moléculas en puntos cuánticos autoensamblados"), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales-Universidad de Antioquia (CAD y ALM proyecto de dedicación exclusiva 2015-2016), y El Patrimonio Autónomo Fondo Nacional de Financiamiento para la Ciencia, la Tecnología y la Innovación, Francisco José de Caldas. Proyecto EIA-UdeA (Efectos de láser intenso sobre las propiedades ópticas de nanoestructuras semiconductoras de InGaAsN/GaAs y GaAlAs/GaAs) que es parcialmente financiado por la Escuela de Ingeniería de Antioquia.

Referencias

- [1] C. M Duque, A. L Morales, M. E Mora-Ramos, and C. A Duque, *Phys. Status Solidi B*, 252(4), 670 (2015)
- [2] http://www.einsteinonline.info/elementary/cosmology/early_univers_e [consultada en marzo 2015]
- [3] http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2014/advanced-physicsprize2014_2.pdf [consultada agosto 4-2015]
- [4] L. de la Peña, *Introducción a la mecánica cuántica*, Ed: Fondo de Cultura Económica de España, p 964 México (2006)