



UNIVERSIDAD DE GRANADA

Facultad de Ciencias

GRADO EN FÍSICA

Práctica de electrónica física

SIMULACIÓN DE LA ESTRUCTURA DE BANDAS Y PROPIEDADES DE SUPERREDES DE InAs/GaAs

Presentado por:

D. Adrián Camacho Cortés a.k.a. 'Al que ha llamado Valeo'
Dña. Ana Bravo Moreno a.k.a. 'La que quiere ser psicóloga'
D. Joaquín Medina Puntero a.k.a. 'El de Toledo'
D. Pablo Fuentes Chemes a.k.a. 'El que no ha cursado sólido'

Curso Académico 2022/2023

Resumen

En este documento se detalla la investigación sobre la seguridad de la Fabrica de Moneda y Timbre de España, la cual ha sido solicitada por 'El Profesor' en persona. Para este trabajo, se ha usado una herramienta de simulación avanzada; nombre en clave 'Abacus', para estudiar las propiedades emergentes de las *super-lattices*, con el fin de conocer las ventajas que supone emplear este tipo de materiales para la construcción de sensores de infrarrojos. Finalmente, se han estudiado los resultados obtenidos y analizado el posible funcionamiento del sistema de detección de movimiento de las instalaciones.

Índice

1. Introducción	3
2. Fundamento teórico	4
3. Simulador	5
4. Resultados y discusión	6
4.1. InAs/GaAs Superlattice	6
4.1.1. Variación del ancho de la banda intermedia frente al ancho del QD	6
4.1.2. Comportamiento de las bandas con la anchura de la barrera.	7
4.1.3. Formación de la banda intermedia	9
4.1.4. Dependencia del Bandgap frente al ancho de la barrera.	9
4.1.5. Estudio de los estados fundamentales de los QD	11
5. Conclusiones	12
Referencias	14

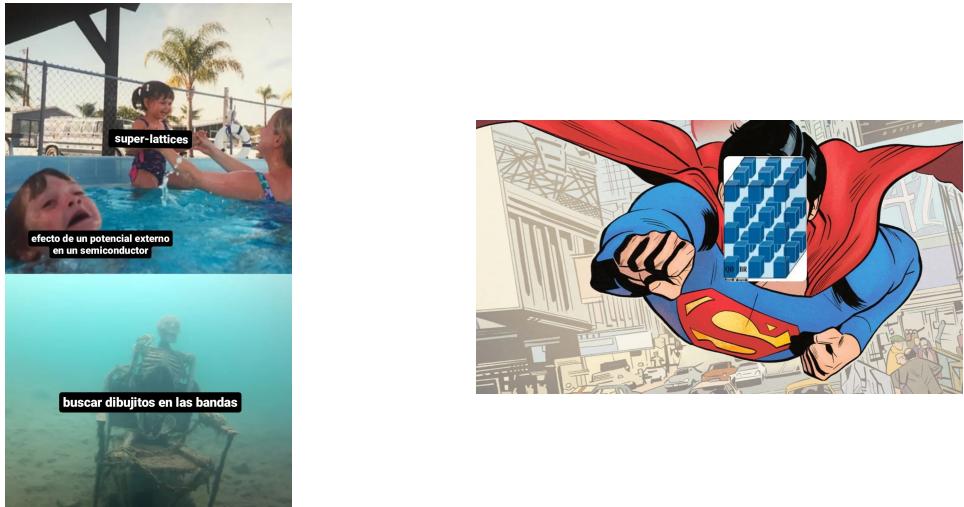
1. Introducción

La casa de la Moneda en España es un edificio conocido por su gran seguridad. Recientemente El Profesor ha recibido una filtración sobre el posible funcionamiento del sistema de detección de movimiento. Para la futura incursión a la instalación necesita de toda la información posible. Debido a la importancia del trabajo y la necesidad de confidencialidad, se ha recurrido a nuestro equipo de jóvenes estudiantes de física, que solemos aceptar trabajos de esta índole para poder pagar los crecientes precios de las copas en G10.



Figura 1: Filtración del sistema de detección de movimiento.

A lo largo del desarrollo de este proyecto se comentó la posibilidad de que este mecanismo estuviese formado por redes ópticas. No obstante, tras sopesarlo (y ser conscientes de que era absurdo), se llegó a la conclusión de que el sistema estaba formado por una *super-lattice* (la cual llamaremos así y no superred, por mantener un poco de seriedad).



Las *super-lattices* (SL) son materiales sintéticos diseñados a partir de dos materiales semiconductores. En estos se dispone una capa de un semiconductor al que llamaremos *host* seguido de una serie de 'puntos' de otro material que se llamará *Quantum Dot* (QD). Esta estructura se repetirá espacialmente de forma periódica. Es esta similitud con las redes convencionales la que le aporta unas propiedades equivalentes. Las SL tienen una periodicidad del orden de magnitud de los nanómetros, superior al de las redes que

forman los sólidos. Esta estructura se repetirá en el espacio de forma análoga a como se forman las redes convencionales, siendo justo esta estructura periódica la que aportará propiedades análogas a las de una red convencional.

A continuación en la Figura 2 se muestra un ejemplo tridimensional de lo que sería una *super-lattice*, donde los cubos azules oscuros representan los QD y la zona azul clara el material *host*.

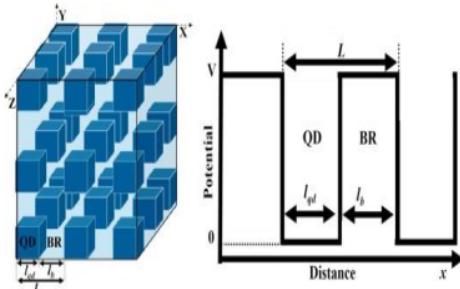


Figura 2: Visualización 3D de una SL, en ella los QD están envueltos en una matriz del material *host* [1].

La construcción de este material debe ser extremadamente precisa, ya que tanto la anchura de los QD como la distancia entre ellos determinarán las propiedades del material resultante. Con este propósito, normalmente se usa un tercer material como base sobre la que se hace crecer la red en sí. Este control permite crear SL de distinta índole, entre ellas materiales ferromagnéticos o superconductores [6].

De esta manera se tendría una estructura cristalina con un potencial periódico que, escogiendo los materiales adecuados, queda a nuestra elección. Esta periodicidad va a tener un gran impacto en el espectro de energía del sistema y por tanto en la forma de las bandas, permitiendo la creación de un material que tenga las propiedades mas óptimas para cada tarea, cosa inalcanzable en las redes cristalinas usuales [1].

2. Fundamento teórico

Como se ha comentado, en una super-lattice se juntan dos semiconductores de diferente gap energético y con una periodicidad mucho mayor que la de ambas redes. Como es de esperar y se observa en la Figura 2, la anchura del pozo vendrá determinada por el QD mientras que la de la barrera por el *host*.

Por otro lado, el siguiente factor determinante es la profundidad del pozo de potencial 2.1. Este no es un parámetro libre, ya que como se observa en [1], viene totalmente determinado por:

$$V_0 = EA_{QD} - EA_{host} \quad (2.1)$$

Donde EA simboliza la afinidad electrónica de los materiales empleados. Tiene sentido que el material con mayor afinidad electrónica actúe como pozo, ya que esta es la propiedad que dicta cómo de fuerte va a atraer el material a los electrones que haya libres, por lo que el material que actúe como pozo debe ser el que más ‘fuerte’ tire de estos, siendo lo ‘fuerte’ que tire la diferencia entre lo ‘fuerte’ que tiren ambos. Si se quiere ser más riguroso, esto está justificado bajo la aproximación del modelo de Anderson [1].



En último lugar queda por determinar el parámetro de la masa de los electrones. En este modelo se están empleando dos materiales distintos, cada uno con su masa efectiva correspondiente; es inmediato que surja la duda de cuál usar. En el trabajo de H.I. Ikeri y A.I. Onyia de 2020 [1] usan un simulador que les permite emplear ambas masas efectivas en cada zona del material, mientras que en el trabajo de Olga L. Lazarenkova y Alexander A. Balandinb de 2001 [3] proponen el uso de la masa efectiva del material *host*. En nuestro caso, debido a que la UGR no tiene dinero como para proporcionarnos un simulador con posibilidad de usar ambas masas, hemos tenido que hacer un apaño. Hemos realizado diferentes simulaciones para el material propuesto en [1]: una SL de InAs/GaAs, usando en primer lugar la masa de InAs; luego la del GaAs, y finalmente una media ponderada de ambas masas, pesada con los diferentes valores de anchura del pozo y de la barrera respectivamente.

Cabe comentar, antes de continuar, algunas propiedades emergentes de las superlattices. Nos ceñimos a las dos de las que se hablará a lo largo de la práctica: la aparición de *minibandas*, y de *bandas intermedias*.

Tanto la banda intermedia como las minibandas son el resultado de un mismo fenómeno. Al crear un material con una periodicidad artificial muy grande, se consiguen bandas con anchos de banda de energía muy pequeños. Estas bandas son llamadas minibandas; se hablará sobre ellas posteriormente con mayor detalle. Como se verá más adelante, a partir de la primera o segunda minibanda se observan gaps de energía más pequeños en comparación al primero. Tal y como se menciona en [4], estas minibandas formarán un continuo y una banda ancha, como en cualquier semiconductor. De esta forma, de manera efectiva, quedará una banda estrecha entre dos bandas anchas: esto es la definición de banda intermedia, y su presencia dotará de grandes propiedades al material.

3. Simulador

Para el estudio del comportamiento de las SL se usará el simulador de Kronnig-Penney, aportado por nanoHUB. En este los parámetros insertados serán el potencial, masa efectiva, anchura de la barrera y del pozo. Cabe tener especial cuidado con el parámetro *W* insertado en el simulador, ya que no es la anchura del pozo sino la suma de la anchura de la barrera y el pozo, como se puede observar en la Figura 3.

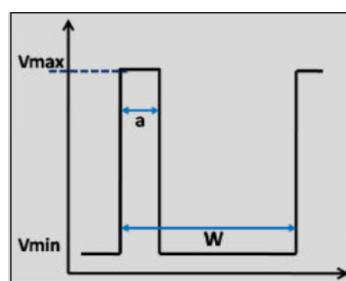


Figura 3: Parámetros geométricos de la simulación en nanoHUB.

4. Resultados y discusión

4.1. InAs/GaAs Superlattice

Se va a estudiar una super-lattice formada por InAs actuando como *Quantum Dot* y GaAs actuando como *host*. Los datos empleados en este análisis se adjuntan en la tabla 1.

m_{GaAs}	m_{InAs}	EA_{GaAs}	EA_{InAs}	V_0
0.067	0.023	4.03 eV [1]	4.9 eV [1]	0.87 eV

Tabla 1: Datos insertados en la simulación.

4.1.1. Variación del ancho de la banda intermedia frente al ancho del QD

Como se ha comentado, simuladores más modernos ofrecen la posibilidad de introducir las masas efectivas de ambos materiales en la simulación, pero no es nuestro caso. Por ello, se ha comenzado realizando un análisis para varias masas efectivas y se ha discutido cuál se ajusta mejor a los datos obtenidos en [1]. Las masas efectivas propuestas son las del material *host*, la del QD y una media ponderada con las distancias de las masas. Estos resultados se adjuntan en la gráfica, habiéndose usado un ancho de la barrera de 2.5nm.

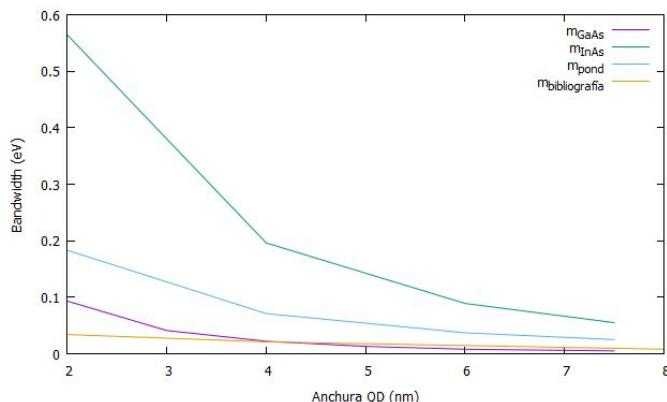


Figura 4: Representación del ancho de la banda intermedia frente a la anchura del QD para distintas masas y para el resultado de [1] .

Se puede apreciar cómo la que aporta un resultado más cercano al de referencia es la correspondiente a la masa del *host*. La decisión que sigue a este hecho, que es tomar la masa efectiva del *host*, se ve reforzada con que en el trabajo mencionado en el Fundamento [3] se haga uso también de esta. Además, es un resultado esperable, debido a que si se observa la Figura 2 es inmediato notar que el QD está totalmente rodeado del *host*. Por lo tanto, aunque el tamaño del QD sea mayor que el de la lámina de *host*, cada cubo de QD se encuentra rodeado por 6 cubos del material *host*. Esto provoca que realizar una media ponderada con el ancho de la barrera o pozo no sea realista, ya que se estaría considerando que por cada QD solo hay un cubo de *host* adyacente. Por todo esto, de ahora en adelante se usará la masa del material *host* como masa efectiva en las simulaciones.

A su vez, también se puede observar que masas mayores dan lugar a un menor ancho de la banda intermedia. Este hecho se puede explicar cualitativamente: cuanto menor sea la masa efectiva, menos energía se necesita para acelerar el electrón, por tanto podrá ocupar un mayor espectro de momentos y por tanto dará lugar a un mayor ancho de banda.

Finalmente, en la gráfica se puede observar como a medida que aumenta la anchura del QD, el ancho de la banda intermedia se ve reducida. Para entender este comportamiento se puede tener en cuenta la expresión de la energía de un pozo cuadrado 4.1:

$$E(n) = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad (4.1)$$

En ella, además de observarse la dependencia de la energía con la masa ya comentada anteriormente, también se observa que los estados de energía decrecen al aumentar el ancho del pozo. Si bien el sistema de una SL no es un pozo cuadrado aislado, si no un conjunto infinito de estos, la tendencia de la energía con el ancho de los mismo debe ser análoga. Mediante esta simple explicación se entiende intuitivamente por qué el ancho de la banda intermedia decrece con la anchura del QD.

4.1.2. Comportamiento de las bandas con la anchura de la barrera.

A continuación se han representado las bandas para un valor fijo de 6.5nm del pozo —ancho del QD—, y varios valores de anchura para la barrera —distancia entre QD—. Debido a que el simulador no deja variar el ancho del pozo como tal, si no el parámetro W , se ha hecho variando ambos parámetros de la simulación a la vez, asegurando que la anchura del pozo sea constante. Los resultados se muestran en la Figura 5.

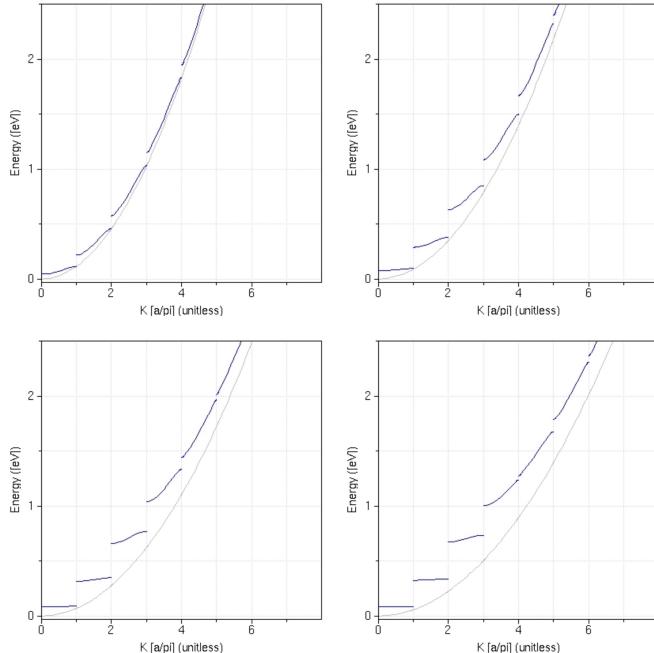


Figura 5: Esquema zonal de bandas de energía del material simulado (azul) y bandas electrón libre (gris) para ancho de pozo de 6.5nm y ancho de barrera de 0.5nm a 3.5nm.

En esta secuencia se puede observar como las bandas con una forma curva e inclinadas se van aplanando conforme aumenta el ancho de la barrera.

Para explicar esto, conviene definir el parámetro P:

$$P \equiv \frac{mL_Q V_0 L_B}{\hbar^2} \quad (4.2)$$

Este factor es una medida de cuan fuertemente está el electrón ligado al cristal. Es interesante apuntar que, de acuerdo con el modelo de Kronig-Penney, se asume que el producto $V_0 L_B$, que tiene relación con la “fuerza” de la barrera de potencial, es finito cuando el potencial $V \rightarrow \infty$ y $L_B \rightarrow 0$. Que el parámetro P tome valores grandes implica que el electrón está muy ligado al potencial, pareciéndose el escenario al de un electrón ligado a un pozo de potencial.

Se puede demostrar que en este límite la energía está cuantizada. Para ello partimos de las ecuaciones de Schrödinger que describen el movimiento de los electrones en cada región del potencial:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_Q^2 \psi(x) = 0, \quad \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k_B^2 \psi(x) = 0 \quad (4.3)$$

cuyas soluciones, tras ser simplificadas (se recomienda ver el artículo [1] para más detalle) quedan como sigue:

$$P \frac{\sin(k_Q L_Q)}{k_Q L_Q} + \cos(k_Q L_Q) = \cos(k L_Q) \quad (4.4)$$

Es ilustrativo reescribir estas soluciones:

$$\sin(k_Q L_Q) = k_Q L_Q \left(\frac{\cos(k L_Q) - \cos(k_Q L_Q)}{P} \right) \quad (4.5)$$

Tomando el caso límite $P \rightarrow \infty$, inmediatamente vemos que $\sin(k_Q L_Q)$ debe ser nulo. Con ello, el factor $k_Q L_Q$ debe ser múltiplo de π . Con ello tenemos la cuantización del número de onda, con lo que la energía queda discretizada. Esta discretización de la energía se manifiesta en que las bandas se aplanan, reduciendo su ancho de banda, tal y como se observa en las gráficas 5.

En términos cualitativos, podemos decir que cuando se reduce el espacio entre los puntos cuánticos, estos ejercen una fuerte fuerza coulombiana sobre sus vecinos. Debido a este acoplamiento entre los puntos cuánticos, las funciones de onda se superponen. El gran número de niveles de energía discretos tan poco espaciados se distribuyen así en bandas similares a las de un material cristalino. También se puede entender desde el punto de vista de las funciones de onda del electrón, tal y como se verá posteriormente en la sección 4.1.4.

De igual manera, cuando el espacio entre puntos es muy grande, las capas del material *host* se vuelven lo suficientemente gruesas como para eliminar el acoplamiento electrónico entre los puntos cuánticos. Al bloquearse el flujo de electrones entre los puntos cuánticos, estos actúan como si estuvieran aislados. Entonces, cada punto cuántico en la matriz existe de manera aislada, y los niveles de energía discretos coinciden con los de los puntos cuánticos individuales. Por lo tanto, la SL se comporta como un punto cuántico aislado.

4.1.3. Formación de la banda intermedia

Como se ha comentado en el fundamento, se genera en el diagrama de bandas una banda intermedia, ya que el gap entre la primera y segunda banda es mayor que el gap que se observa entre el resto de bandas. Esto implica que el resto de bandas se puedan tratar efectivamente como una sola, y esta primera banda hace de banda intermedia.

En las Figura 6 se puede observar una representación de la densidad de estados para 2.5 nm de pozo y 2.5 nm de barrera. En esta se puede observar cualitativamente cómo el primer gap es mayor al resto. Asimismo, se han representado cuantitativamente el valor de los mismos en la Figura 7.

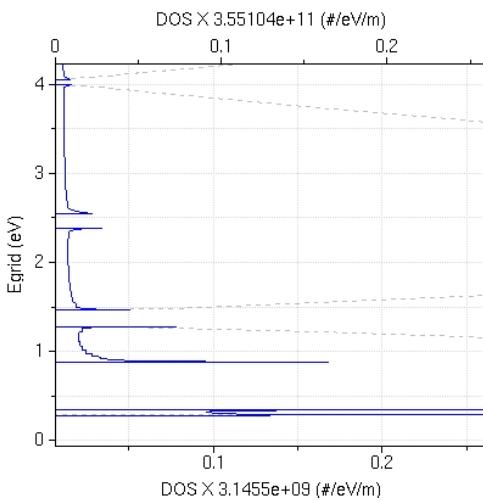


Figura 6: Densidad de estados para un pozo de 2.5nm y barrera de 2.5nm.

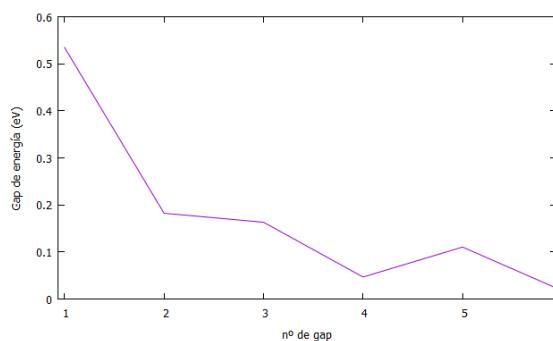


Figura 7: Representación gráfica de los distintos gap de energía.

Podemos dar una explicación a este hecho. A valores mayores de la energía, el efecto del potencial sobre la energía del electrón es menor, con lo que el comportamiento de este se aproxima cada vez más al de un electrón libre, caso en el que no hay gap de energía.

4.1.4. Dependencia del Bandgap frente al ancho de la barrera.

En esta sección se ha simulado la red para varios valores del ancho de la barrera, manteniendo fijo el ancho del QD a 2.5 nm. Se han tomado los datos obtenidos del gap de energía en cada distancia y se han representado en la Figura 8.

En la Figura 8 se puede observar cómo el gap de energía aumenta con el espacio entre QD, estabilizándose y alcanzando un valor prácticamente constante. Por un lado, se puede entender mediante la explicación del apartado 4.1.2 sobre la interacción cулombiana. Por otro lado, puede entenderse desde la perspectiva de la función de onda del electrón. Este comportamiento análogo a una red se produce porque las funciones de onda de electrón en cada pozo no llegan a atenuarse antes de llegar al siguiente, debido al Efecto Túnel. Se forma así una gran onda global del electrón, una onda de Bloch. Si la distancia entre los pozos es lo suficientemente grande, la función de onda del electrón se atenuará antes de llegar al siguiente, y en la práctica se tendrán electrones confinados en

cada pozo, y no una onda de Bloch. En la Figura 9 podemos ver la representación para dos valores de anchura de la barrera.

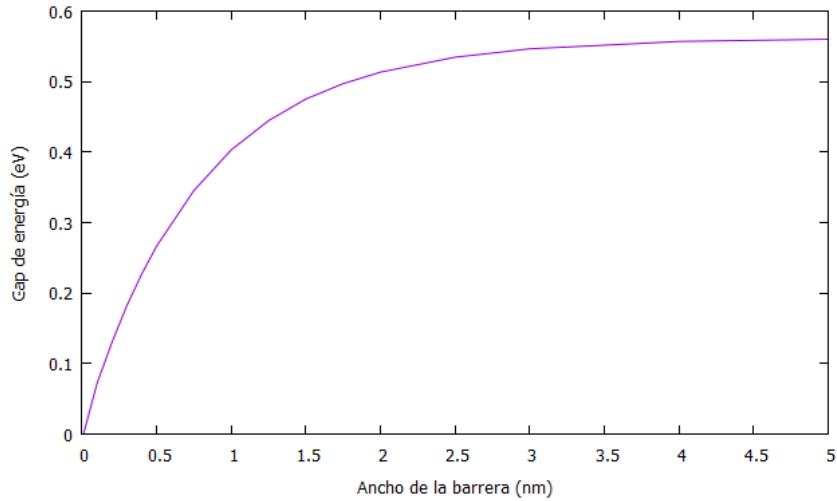


Figura 8: Evolución del gap de energía frente al espaciado entre QD para un ancho de QD de 2.5nm.

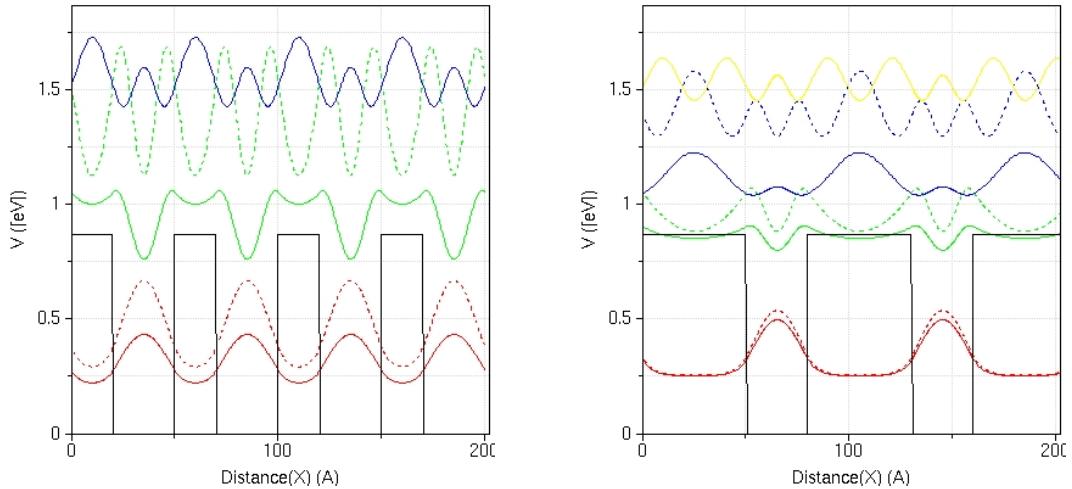


Figura 9: Autofunciones para barrera de 2 y 5 nm respectivamente.

De esta forma, se comienza con un gap de energía pequeño correspondiente a un sistema con una constante de red grande. Esto es porque constantes de red mayores implican una mayor periodicidad y por tanto una mayor longitud de onda en la función de onda de Bloch. Considerando ahora la relación $\lambda = h/p$ se puede observar que la energía cinética será inversamente proporcional a la longitud de onda. Por tanto, a mayores constantes de red, menores gap de energía.

A continuación, se observa que conforme la distancia entre QD aumenta el gap también aumenta, lo cual se opone a lo comentado en el párrafo anterior. Se considera entonces que puede deberse a que conforme aumenta la distancia entre QD, la función de onda en cada pozo se atenúa antes de poder llegar al siguiente pozo, provocando una serie de funciones de ondas confinadas y no una función de onda de Bloch. Debido a

esto, las propiedades de la *superlattice* se desvanecen, y queda un gap de energía en un punto medio entre los materiales padres.

4.1.5. Estudio de los estados fundamentales de los QD

Utilizando la función *Eigen Energy* del simulador estudiamos la energía fundamental de la función de onda que se produce en la SL. En la Figura 10 vemos que la energía se va reduciendo conforme aumenta la anchura del QD, esto significa que la posición de la banda intermedia baja, reduciendo su gap con la banda de inferior y aumentándolo con la banda de superior. Dependiendo del nivel de Fermi podría situarse entre las bandas de valencia y conducción y proporcionar distintas propiedades electrónicas y ópticas.

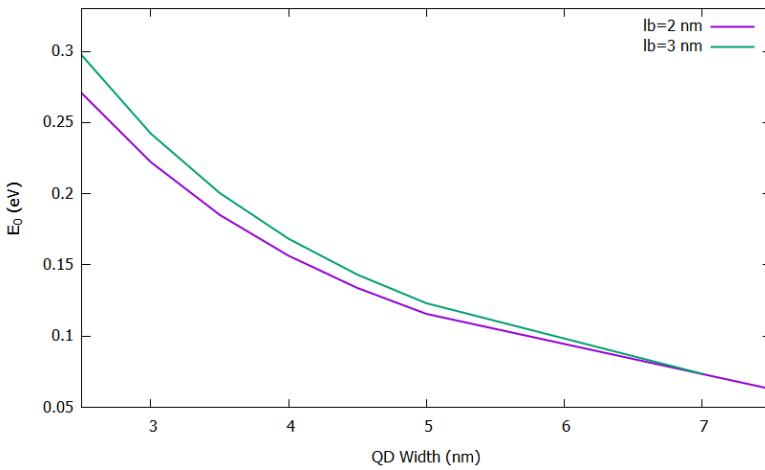


Figura 10: Energía del estado fundamental en función de la anchura del pozo para varias anchuras de la barrera.

Por otro lado, si aumentamos la anchura del QD vemos que aparecen nuevas bandas intermedias. En la Figura 11 vemos como aparecen estados ligados dentro del pozo, con pequeño ancho de banda y notable gap, que corresponden a bandas intermedias de distinta energía.

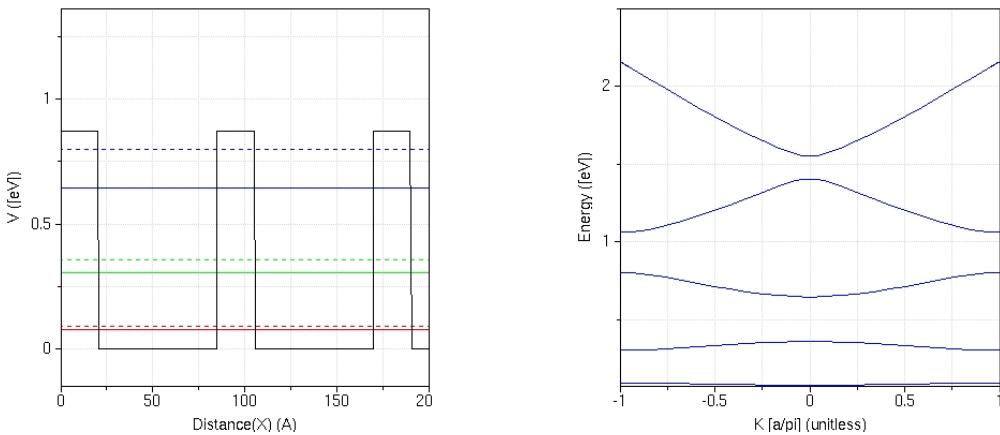
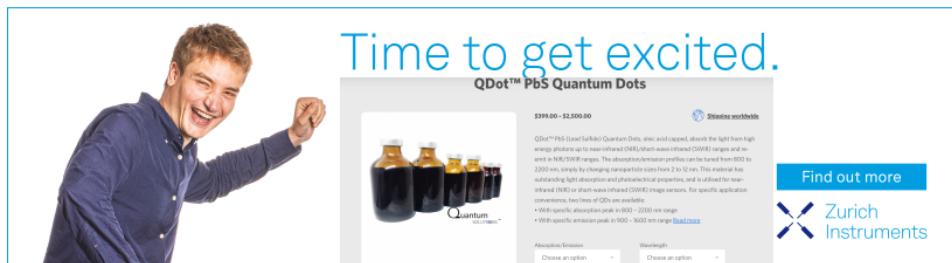


Figura 11: Bandas intermedias para una barrera de 2 nm y QD de 6.5 nm.

¡PAUSA PUBLICITARIA!

ALGUNA VEZ HA PENSADO EN MONTAR UNA SUPER RED EN SU CASA???
ALGUNA VEZ HA QUERIDO DISEÑAR MATERIALES CON GRANDES CAPACIDADES ÓPTICAS Y NO HA SABIDO CÓMO??? LE TRAEMOS LA SOLUCIÓN:

PULSE AQUÍ



5. Conclusiones

A lo largo del documento se ha podido observar como la introducción de periodicidad en el material compuesto por InAs/GaAs da lugar a fenómenos análogos a una red cristalina usual. Ya que para una super lattice, las funciones de onda de los electrones en cada pozo consiguen llegar sin atenuarse al siguiente, llegando a formar una onda de Bloch de una gran periodicidad; como se muestra en la Figura 9

Entre otras cosas, se han podido observar como el ancho de la barrera no puede ser demasiado grande, ya que esto daría lugar a que los electrones quedasen confinados en cada pozo y no se formase una onda de Bloch. Dejando clara la necesidad de formar la red de forma muy preciso y calibrando la anchura de la barrera necesaria para tener las propiedades deseadas.

Tambien se ha observado que la energía del estado fundamental del QD, que corresponde con la interbanda, se va desplazando hacia abajo, acercándose a la banda de valencia, incluso llegando a aumentar el número de bandas intermedias, según aumenta la la anchura del QD. A su vez, el gap de energía de la primera mini banda aumenta con el ancho de la barrera hasta estabilizarse en un valor de energía. Además se ha visto que según aumenta la anchura del potencial las bandas se van aplanando, correspondiéndose esto con la cuantización de los estados ligados que forma cada QD que deja de interactuar con los otros, reduciendo mucho el ancho de banda de las bandas intermedias.

Las longitudes de onda provenientes del Sol pueden interactuar a escala nanométrica con con nuestras componentes tecnológicas. Un prototipo que esta siendo estudiado son las placas solares con bandas intermedias, estas podrían presentar una mayor eficiencia al 31 % que establece el límite calculado por Shockley y Queisser gracias a la absorción de fotones con energía menor a la del gap. [4]

Las placas solares convencionales tienen una relación directa entre voltaje y gap del semiconductor que las compone, los electrones impactados por fotones con cierta longitud de onda saltan a la BC con mínimo la energía del gap, esto produce una perdida del

espectro de radiación que no contribuye a la producción de corriente. Los QD podrían ser capaces de aumentar esta eficiencia gracias a los estados ligados y las mini bandas que permiten el efecto túnel. [4]

Por otro lado, también se han observado mini bandas y como la anchura de estas es menor a la de las bandas usuales; este parámetro resulta de especial interés ya que esta mini banda actuará como banda intermedia en nuestros sistemas y al tener un ancho de banda tan pequeño se podrán excitar electrones con mucha precisión entre bandas.

De hecho, una de las aplicaciones más sonadas de las superlattices son los detectores de infrarrojos. En el campo de la detección de infrarrojos, los detectores basados en superlattices ofrecen ventajas significativas en comparación con otras tecnologías. Existe una mejora en el rendimiento, relacionada con la reducción de la pérdida de electrones excitados ópticamente, y se posibilita que estos dispositivos trabajen a temperaturas más altas, con lo que deja de ser necesario un sistema de refrigeración [5]. El análisis de estos detectores queda fuera del presupuesto, pero se pueden encontrar decenas de artículos en los que se estudian variaciones en los parámetros de las superlattices para lograr un mayor rendimiento del detector, como el artículo *Absorption, carrier lifetime, and gain in InAs-GaAs quantum-dot infrared photodetectors*, por B. Kochman, A.D. Stiff-Roberts, S. Chakrabarti, entre otros [2]. Estos detectores son sin duda los que se encuentran en la fábrica de Moneda y Timbre. La información sobre cómo burlarlos se relaciona directamente con el funcionamiento de los detectores, con lo que también queda fuera de presupuesto. De requerir tal información, será necesaria una renegociación.

Referencias

- [1] Ikeri, H., Onyia, A., y Asogwa, P. (2020, 10). Theoretical modeling and simulation of electronic band structure and properties of inas/gaas superlattice. , 28-37.
- [2] Kochman, B., Stiff-Roberts, A., Chakrabarti, S., Phillips, J., Krishna, S., Singh, J., y Bhattacharya, P. (2003). Absorption, carrier lifetime, and gain in inas-gaas quantum-dot infrared photodetectors. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 39(3), 459-467. doi: 10.1109/JQE.2002.808169
- [3] Lazarenkova, O. L., y Balandin, A. A. (2001, 05). Miniband formation in a quantum dot crystal. *Journal of Applied Physics*, 89(10), 5509-5515. Descargado de <https://doi.org/10.1063/1.1366662> doi: 10.1063/1.1366662
- [4] Mruczkiewicz, M., K?os, J., y Krawczyk, M. (2011, 11). Semiconductor superlattice-based intermediate-band solar cells.. doi: 10.5772/21366
- [5] Piacente, P. J. (s.f.). *Nuevos nanomateriales mejorarán los fotodetectores de infrarrojos*. Descargado de https://www.tendencias21.es/Nuevos-nanomateriales-mejoraran-los-fotodetectores-de-infrarrojos_a10121.html
- [6] Rijnders, G., y Blank, D. H. A. (2005, 1). Build your own superlattice. *Nature*, 433(7024), 369–370. Descargado de <https://doi.org/10.1038/433369a> doi: 10.1038/433369a