

# MODOS VIBRACIONALES EN HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

## Autoría principal

Diosdado Lorenzo Villegas Villegas<sup>1</sup>, Darío Gustavo Santiago Pérez<sup>2</sup>.

## Otros autores

Rolando Pérez Álvarez<sup>3</sup>, Fernando de León Pérez<sup>4</sup>, Carlos Trallero Giner<sup>5</sup>.

## Colaboradores

Dra. C. Leonor Chico Gómez<sup>6</sup>, Dr. C. J. Jesús Arriaga Rodríguez<sup>7</sup>, Dra. C. Zorayda Lazcano Ortiz<sup>7</sup>, Dr. C. Miguel Eduardo Mora Ramos<sup>8</sup>, Dr. C. Rafael Baquero Parra<sup>9</sup>, Dr. C. Gilmar. E. Marques<sup>10</sup>, Lic. Pedro Luis Valdés Negrín<sup>1</sup>.

## Entidad ejecutora principal

<sup>1</sup>Departamento de Física. Facultad de Matemática, Física y Computación. Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.

## Entidades participantes

<sup>2</sup>Departamento de Matemática-Física. Universidad de Sancti Spíritus "José Martí Pérez". Sancti Spíritus. Cuba.

<sup>3</sup>Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca. México.

<sup>4</sup>Centro Universitario de la Defensa de Zaragoza. Zaragoza. España.

<sup>5</sup>Facultad de Física. Universidad de La Habana. La Habana. Cuba.

<sup>6</sup>Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid, Consejo Superior de Investigaciones Científicas. Madrid. España.

<sup>7</sup>Instituto de Física. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Puebla. México.

<sup>8</sup>Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca. México.

<sup>9</sup>Departamento de Física, CINVESTAV. Distrito Federal. México.

<sup>10</sup>Departamento de Física, Universidad Federal de San Carlos. Sao Paulo. Brasil.

## Autor para correspondencia

Dr. C. Diosdado Lorenzo Villegas Villegas.

Departamento de Física. Facultad de Matemática, Física y Computación. Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas.

Carretera a Camajuani km 5 ½. Santa Clara. Villa Clara. Cuba.

Correo electrónico: villegas@uclv.edu.cu (diosdado@ifuap.buap.mx)

## Aporte científico de cada autor al resultado

✓ **Dr. C. Diosdado Lorenzo Villegas Villegas (25%)**: Es el autor fundamental de la parte del trabajo relacionada con el tunelaje de fonones a través de una heteroestructura semiconductor, participando en todas las etapas de la investigación, desde la generación de las ideas, los cálculos y la escritura de los artículos científicos. En particular es autor de una de las tesis de doctorado, tutor de una tesis de licenciatura en Física y coautor de 5 de los artículos que se presentan en este trabajo. Es coautor de 12 de los trabajos presentados en los diferentes eventos científicos.

✓ **Dr. C. Darío Gustavo Santiago Pérez (25%)**: Es el autor fundamental de la parte del trabajo relacionada con la determinación de los modos vibracionales, participando en todas las

etapas de la investigación, desde la generación de las ideas, los cálculos y la escritura de los artículos científicos. En particular es autor de una de las tesis de doctorado, de la tesis de maestría y coautor de 6 de los artículos que se presentan en el trabajo. Es coautor de 9 de los trabajos presentados en los diferentes eventos científicos.

- ✓ **Dr. Cs. Rolando Pérez Álvarez (22%)**: Es cotutor de las dos tesis de doctorado, cotutor de la tesis de maestría y coautor de 10 de los artículos que se presentan en la propuesta. Participó en la revisión e interpretación de los resultados, así como en la escritura de los artículos científicos. Es coautor de 19 de los trabajos presentados en los diferentes eventos científicos.
- ✓ **Dr. C. Fernando de León Pérez (17%)**: Es cotutor de una de las tesis de doctorado, cotutor de la tesis de maestría y coautor de 6 de los artículos que se presentan en la propuesta. Participó en la revisión e interpretación de los resultados, así como en la escritura de los artículos científicos. Es coautor de 10 de los trabajos presentados en los diferentes eventos científicos.
- ✓ **Dr. Cs. Carlos Trallero Giner (11%)**: Es cotutor de una de las tesis de doctorado y coautor de 2 de los artículos que se presentan en la propuesta. Participó en la revisión e interpretación de los resultados, así como en la escritura de los artículos científicos. Es coautor de 6 de los trabajos presentados en los diferentes eventos científicos.

## Resumen

En este trabajo se estudian los modos vibracionales tanto en el masivo como en heteroestructuras semiconductoras. Partiendo de las ecuaciones clásicas de la dinámica de la red se plantea el problema general de las oscilaciones considerando la interacción hasta un número determinado de vecinos y se escriben las ecuaciones en las principales direcciones de alta simetría. Se reportan los valores numéricos de las constantes de fuerza y las relaciones de dispersión para materiales con estructura diamante, zinc blenda y wurtzita. En el caso de las heteroestructuras se aplica un modelo fenomenológico continuo de onda larga al estudio de los modos vibracionales de nanohilos cilíndricos revestidos. Se determina el acoplamiento de los modos, la dependencia de la frecuencia con el vector de onda, las dimensiones del sistema y la influencia sobre los modos vibracionales de los esfuerzos que surgen en la interfaz.

El modelo fenomenológico de onda larga se aplica para estudiar el transporte de fonones a través de una heteroestructura semiconductor. A partir de la ecuación de continuidad del sistema se obtiene un tiempo característico, análogo al tiempo de estancia para electrones; así como una relación analítica general entre los tiempos de transmisión y reflexión y el tiempo de estancia. Las propiedades básicas de la matriz de transferencia y la equivalencia de los tiempos de transmisión y reflexión son derivadas teóricamente partiendo de principios generales; tales como la invarianza ante la inversión en el tiempo y la invariancia ante la reflexión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía.

Se investiga un fenómeno análogo al efecto Hartman y se propone una posible explicación del mismo sobre la base de la saturación de la energía vibracional almacenada en la región de la barrera. Se introduce el concepto de impedancia generalizada y su posible aplicación en el cálculo de las amplitudes de las ondas en las diferentes regiones que conforman a una estructura arbitraria. Se realizan cálculos numéricos y analíticos para fonones acústicos y ópticos. En particular, se validan los

resultados teóricos y experimentales para el caso de un reflector de Bragg distribuido fabricado de Silicio poroso.

Los resultados de esta propuesta han sido publicados en 11 revistas arbitradas de circulación internacional y expuestos en 20 eventos de participación internacional. Además, han contribuido a la formación de recursos humanos los cuales se resumen en dos tesis de doctorados, una tesis de maestría y una tesis de grado. Avalan los resultados obtenidos diversos reconocimientos nacionales (3), la obtención de tres premios CITMA provinciales y destacados miembros de la comunidad científica nacional (2).

Este trabajo es útil para el diseño de nuevos dispositivos fonónicos.

## **Comunicación Corta**

### **I-Introducción**

En los últimos años la ciencia de los fonones acústicos ha experimentado una fuerte renovación hacia nuevos conceptos y objetivos para la ingeniería espacial y espectral de ondas acústicas en sólidos [1]. La nanofonónica ha surgido como una nueva ciencia encargada de estudiar las propiedades vibracionales y térmicas de los dispositivos de escalas nanométricas; así como su interacción con los electrones y fotones.

Los fonones, el cuanto de las vibraciones de la red se manifiesta prácticamente en todos los fenómenos ópticos, eléctricos y térmicos dentro de los semiconductores y otros materiales. La reducción del tamaño de los dispositivos electrónicos por debajo del recorrido libre medio de los fonones crea una nueva situación para la interacción y propagación de los fonones. Por un lado, esto complica la eliminación del calor de los dispositivos de baja escala. Por otra parte, abre una nueva oportunidad al espectro de la ingeniería de fonones en los materiales nanoestructurados y un mejoramiento en la operación de los nanodispositivos[2].

En este trabajo se utiliza el modelo fenomenológico del continuo en el límite de longitud de onda larga para estudiar el comportamiento de los fonones acústicos y ópticos en diferentes sistemas físicos.

### **II-Modelos fenomenológicos**

Los modelos fenomenológicos son ampliamente utilizados para el cálculo de los estados

vibracionales en heteroestructuras de diversos materiales semiconductores. La idea general de los mismos consiste en resolver las ecuaciones del movimiento, estimando los parámetros que aparecen en la matriz dinámica con ajuste al experimento. El conocimiento de los modos de oscilación es esencial para entender las propiedades acústica, óptica y de transporte de tales sistemas. Entre los enfoques más productivos para investigar las características de estas excitaciones se encuentran los modelos fenomenológicos continuos. En este trabajo nosotros nos adscribimos al modelo fenomenológico completo propuesto originalmente por Trallero y colaboradores [3].

### **III-Nanohilos semiconductores**

Unido al estudio de las propiedades dinámicas del sólido, es muy importante el estudio de las heteroestructuras construidas a partir de estos. En los últimos años ha despertado interés el estudio de los nanohilos semiconductores. Con el avance de los métodos de crecimiento de estas estructuras, se ha abierto un amplio rango de aplicaciones en el desarrollo de compuertas lógicas, foto sensores, diodos emisores de luz y sensores biológicos, entre otras. Un caso especial son los nanohilos revestidos en otro material ("core/shell"). Estos nanohilos core/shell han sido estudiados en varias parejas de materiales, lo cual hace que tenga gran importancia la caracterización de estas heteroestructuras.

La aplicación del modelo fenomenológico continuo[3]permite un análisis detallado de los modos ópticos acoplados y desacoplados, en nanohilos revestidos con simetría cilíndrica [4]. Este permite considerar el efecto de los esfuerzos sobre los modos longitudinales (LO) y transversales ópticos (TO) tanto en el nanohilo como en el revestimiento en un sistema del tipo GaAs/GaP. El desdoblamiento entre los modos LO y los modos TO determinado por este método, puede ser usado para obtener información estructural del nanohilo y el revestimiento, mediante la comparación con reportes experimentales de espectroscopia Raman e infrarrojo. Empleando resultados experimentales se obtiene la relación entre los parámetros de Grüneisen longitudinal y transversal.

#### **IV-Tunelaje de fonones de longitud de onda larga**

El tunelaje de fonones a través de una heteroestructura semiconductor ha sido estudiado ampliamente [5].En general, las principales limitaciones relacionadas con el cálculo del tiempo de tunelaje de fonones a través de una heteroestructura semiconductor son:

- No existe una definición de los tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor (tiempos de transmisión, reflexión, interferencia y estancia).No se ha encontrado una relación analítica entre los diferentes tiempos de tunelaje.
- No se ha planteado la hipótesis de la existencia de un fenómeno análogo al efecto Hartman para electrones en el tunelaje de fonones y de hecho no se ha dado ninguna explicación al respecto.

Para desarrollar todo el formalismo matemático de los tiempos de tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor se parte de la densidad Lagrangiana correspondiente a la densidad Hamiltoniana equivalente[3,6].

Para la solución estacionaria de la ecuación del movimiento, el flujo de la densidad de energía no depende de las coordenadas espaciales y temporales; es decir el flujo es constante a través de toda la región ocupada por la estructura. Luego, partiendo de la ecuación de continuidad de la energía del sistema se obtiene un tiempo característico para el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor no polar arbitraria [7]. Este tiempo es matemáticamente análogo al tiempo de estancia definido en el tunelaje de electrones [8].

El estado del tiempo de estancia se considera bien establecido; sin embargo, no es evidente establecer como el tiempo de estancia se distribuye entre los diferentes canales de dispersión de forma única. Este problema se resuelve si se tiene en cuenta la analogía formal existente entre los problemas de dispersión de electrones y fonones. Empleando el método desarrollado en [9], se obtiene por primera vez una relación analítica entre los tiempos de interferencia, transmisión, reflexión y estancia [7]; así como una interpretación del sentido físico de estos tiempos.

Las propiedades físicas generales tales como la invarianza ante la inversión temporal y la invarianza ante la inversión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía permiten obtener las propiedades de la matriz de transferencia y la equivalencia entre los tiempos de transmisión y reflexión en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga [10].

### **V-El efecto Hartman (EH)**

Un fenómeno relacionado con el problema del tiempo de tunelaje es el llamado EH [11]. Resulta que en el límite de barreras opacas los tiempos de fase y estancia se saturan. La saturación consiste en que el tiempo de tunelaje se hace independiente del ancho de la barrera, lo cual implica que en principio se pudieran encontrar velocidades superlumínicas.

El EH fue estudiado en el dominio de la acústica en el rango de los MHz [12]. Sin embargo, en el contexto de la nanofonónica un primer estudio de este fenómeno es realizado por Villegas y colaboradores [13]; donde se discuten las condiciones físicas bajo las cuales el tiempo de tunelaje de los fonones de longitud de onda larga a través de heteroestructuras se hace independiente del tamaño del sistema, un fenómeno equivalente al EH. En el caso de una barrera de fonones se obtiene un límite asintótico para el tiempo de transmisión. Una explicación satisfactoria de este fenómeno se obtiene tomando en cuenta la saturación de la energía vibracional almacenada en la región de la barrera. Un estudio de la dependencia del tiempo de tunelaje del tamaño del sistema (número de períodos de la superred) muestra que este tiempo presenta un comportamiento superlumínico dependiendo si el fonón se encuentra dentro de una banda o dentro de un gap [13]. El fenómeno anteriormente descrito y el EH son fenómenos relacionados aunque no son idénticos; y ha sido predicho al estudiar el tiempo de fase de partículas masivas y no masivas [14].

### **Conclusiones**

La aplicación del modelo fenomenológico continuo permite un análisis detallado de los modos ópticos acoplados y desacoplados, en nanohilos revestidos con simetría cilíndrica; así como el comportamiento de otras heteroestructuras semiconductoras tales como, superredes semiconductoras, reflectores de Bragg distribuidos, etc.

Nosotros obtenemos una expresión para el tiempo de estancia en el caso del tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor y derivamos una expresión analítica que relaciona a este tiempo con los tiempos de interferencia, transmisión y reflexión. Partiendo de principios generales tales como la

invarianza ante la inversión temporal y la invarianza ante la inversión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía se derivan las propiedades de la matriz de transferencias y la equivalencia entre los tiempos de tunelaje.

En este trabajo se reportan las condiciones bajo las cuales aparece un fenómeno análogo al efecto Hartman durante el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor. Una posible explicación de este fenómeno está basada en la saturación de la energía vibracional almacenada dentro de la estructura.

## Referencias

- [1] N. D. Lanzillotti-Kimura, A. Fainstein, B. Jusserand, A. Lemaître, O. Mauguin y L. Largeau. "Acoustic phonon nanowave devices based on aperiodic multilayers: Experiments and theory", *Phys. Rev. B* 76, 174301 (2007).
- [2] A. Balandin.: "Nanophononics: Phonon Engineering in Nanostructures and Nanodevices", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* 5, 1015–1022 (2005).
- [3] C. Trallero-Giner, F. Garcia-Moliner, V. R. Velasco, y M. Cardona: "Analysis of the phenomenological models for long-wavelength polar optical modes in semiconductor layered systems", *Phys. Rev. B* 45, 11944 (1992). C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez, and F. Garcia-Moliner, *Long Wave Polar Modes in Semiconductor Heterostructures*, Elsevier Science (1998).
- [4] Darío G. Santiago-Pérez, C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez, L. Chico, R. Baquero and G. E. Marques: "Uncoupled optical phonons in core/shell GaAs/GaP nanowires: strain effects", *Journal of Applied Physics*, 112, 084322 (2012). Darío G. Santiago-Pérez, C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez, Leonor Chico: "Polar optical phonons in core-shell semiconductor nanowires", *Physica E*, 56, 151–159 (2014).
- [5] S. Mizuno y S. Tamura: "Theory of acoustic-phonon transmission in finite-size superlattice systems", *Phys. Rev. B* 45, 734 (1992). S. Mizuno y S. Tamura: "Transmission and reflection times of phonon packets propagating through superlattices", *Phys. Rev. B* 50, 7708 (1994).
- [6] F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez: "Long-wavelength nonpolar optical modes in semiconductor heterostructures: Continuum phenomenological model", *Phys. Rev. B* 61, 4820 (2000).
- [7] D. Villegas, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez: "Tunneling time of long-wavelength phonons through semiconductor heterostructures", *Phys. Rev. B* 71, 035322 (2005).
- [8] E. H. Hauge y J. A. Stvneng: "Tunneling times: a critical review", *Rev. Mod. Phys.* 61, 917 (1989).
- [9] E. H. Hauge, J. P. Falck, y T. A. Fjeldly.: "Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers", *Phys. Rev. B* 36, 4203 (1987).
- [10] Z. Lazcano, P. L. Valdés Negrín, D. Villegas, J. Arriaga and R. Pérez-Álvarez; "Tunneling times of acoustic packets through a distributed Bragg reflector", *Nanoscale Research Letters*, 9, 449 (2014).
- [11] T. E. Hartman: "Tunneling of a wave packet", *J. Appl. Phys.* 33, 3427 (1962).

- [12] S. Yang, J. H. Page, Z. Liu, M. L. Cowan, C. T. Chan, y P. Sheng: "Ultrasound Tunneling through 3D Phononic Crystal", Phys. Rev. Lett. 88, 104301 (2002).
- [13] D. Villegas, F. de León-Pérez y R. Pérez-Álvarez: "Tunneling time for phonons: dependence on the systems size", Phys. Status Solidi B 242, 1767 (2005).
- [14] P. Pereyra: "Closed Formulas for Tunneling Time in Superlattices", Phys. Rev. Lett. 84, 1772 (2000).

## Publicaciones

1. Z. Lazcano, P. L ValdésNegrín, D. Villegas, J. Arriaga and R. Pérez-Álvarez; "**Tunneling times of acoustic packets through a distributed Bragg reflector**",Nanoscale Research Letters, **9**, 449 (2014).
2. Darío G.Santiago-Pérez, C.Trallero-Giner, R.Pérez-Álvarez, LeonorChico: "**Polar optical phonons incore-shell semiconductor nanowires**",Physica E, **56**, 151–159 (2014).
3. Darío G. Santiago-Pérez, C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez, L. Chico, R. Baquero and G. E. Marques: "**Uncoupled optical phonons in core/shell GaAs/GaP nanowires:strain effects**", Journal of Applied Physics,**112**, 084322 (2012).
4. Darío G. Santiago-Pérez, and R. Pérez-Álvarez: "**Vibrational properties of cubic-III nitrides: Force constants study**",Physica B, **405**, 4776 (2010).
5. Darío G. Santiago-Pérez: "**Oscilaciones de la red de nitruros cúbicos**". Revista electrónica Nova Scientia, Vol. 1 (1), No.2, 54 (2009).
6. D. Villegas, F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez: "**Longwave phonon tunnelling using an impedance concept**",PIERS Online, Vol. 4, No.2, 227(2008).
7. Darío G. Santiago- Pérez, F. de León-Pérez, R. Pérez-Álvarezand Miguel E. Mora-Ramos, "**Force constants and dispersion relations in GaN**",PIERS Online. Vol. 4, No. 2, 187 (2008).
8. Darío G. Santiago-Pérez, F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez: "**Forces constants and dispersion relations for the zinblende and diamond structures revisited**",Revista Mexicana de Física, **52**, 2 (2006).
9. D. Villegas, F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez: "**Tunneling time of long-wavelength phonons through semiconductor heterostructures**",Physical Review B **71**, 035322 (2005).
10. D. Villegas, F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez: "**Tunneling time for phonons: dependence on the system's size**",Physica Status Solidi (b) **242**, 1767(2005).
11. D. Villegas, F. de León-Pérezand R. Pérez-Álvarez: "**Gaussian superlattice for phonons**", Microelectronics Journal **36**, 411 (2005).