

# Efectos del desorden estructural sobre el cambio en el índice de refracción de un sistema $\delta$ -dopado simple en GaAs

H. Noverola Gamas<sup>a</sup>, F. Martínez Solís<sup>a</sup>, and O. Oubram<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Carretera Cunduacán-Jalpa de Méndez Km. 1 Col. La Esmeralda, Cunduacán, 86680, México. e-mail: noverola86@gmail.com*

<sup>b</sup>*Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa 62209, Cuernavaca, Morelos, México. e-mail:oubram@uaem.mx*

Received 19 October 2023; accepted 9 February 2024

Partiendo de la teoría de masa efectiva y el modelo de Thomas-Fermi (TF) se ha establecido el perfil de potencial para un sistema tipo delta-dopado simple en Arseniuro de Galio (GaAs) tipo  $n$ . Resolviendo la ecuación de Schrödinger asociada al sistema, se han calculado los autovalores y las autofunciones del perfil de potencial, determinando así su estructura electrónica. Con ayuda de la teoría de Matriz Densidad se ha determinado el cambio en el índice de refracción (CIR) lineal y no lineal del sistema. De tal manera que, añadiendo un término de desorden en el sistema ( $\zeta$ ), es posible calcular numéricamente los cambios en la estructura electrónica y las propiedades ópticas no lineales. Se ha determinado que con valores de  $\zeta$  alrededor del 10 % asociado a la densidad de impurezas ( $N_{2D}$ ), el cambio en el índice de refracción lineal y no lineal no sufre cambios significativos. Por otro lado, cuando se incrementa el desorden en la densidad de impurezas introducidas en el material semiconductor, el comportamiento de la propiedad óptica se pierde por completo. Finalmente, notamos que al introducir desorden en la intensidad del laser, la propiedad óptica no sufre cambios. El presente estudio teórico podría predecir el efecto del desorden estructural sobre el comportamiento del CIR en los dispositivos basados en delta dopados al momento de su síntesis.

*Descriptor:* Dopaje delta; óptica no lineal; arseniuro de galio; desorden estructural; cambio en el índice de refracción.

Starting from the effective mass theory and the Thomas-Fermi (TF) model, the potential profile for a simple delta-doped type system in  $n$ -type Gallium Arsenide (GaAs) has been established. By solving the Schrödinger equation associated with the system, the eigenvalues and eigenfunctions of the potential profile have been calculated, thus determining its electronic structure. With the help of the Density Matrix theory, the change in the linear and nonlinear refraction index (CIR) of the system has been determined. In such a way that, by adding a disorder term in the system ( $\zeta$ ), it is possible to numerically calculate the changes in the electronic structure and the nonlinear optical properties. It has been determined that with values of  $\zeta$  around 10 % associated with the density of impurities ( $N_{2D}$ ), the change in the linear and nonlinear refraction index does not undergo changes significant. On the other hand, when the disorder in the density of impurities introduced into the semiconductor material increases, the behavior of the optical property is completely lost. Finally, we note that by introducing disorder in the laser intensity, the optical property does not suffer changes. The present theoretical study could predict the effect of structural disorder on the behavior of the CIR in delta-doped devices at the time of their synthesis.

*Keywords:* Delta doping; nonlinear optics; gallium arsenide; structural disorder; change in the refractive index.

DOI: <https://doi.org/10.31349/RevMexFis.70.041001>

## 1. Introducción

En el pasado reciente, para la física de semiconductores ha tomado gran interés el estudio de los llamados sistemas de baja dimensión [1]. El aumento en la atención de estas estructuras se debe a la importancia que tienen éstas en el diseño y fabricación de dispositivos semiconductores entre los que destacan los diodos, fotodetectores, transistores, celdas solares y láseres [2-6]. Algunos ejemplos de estos sistemas son estructuras que contienen puntos cuánticos, alambres cuánticos y pozos cuánticos (quantum dots, quantum wires y quantum wells, respectivamente) [1,7-9]. Particularmente, los pozos cuánticos son estructuras de gran importancia debido a sus aplicaciones en dispositivos semiconductores a base de Silicio (Si), Germanio (Ge), Arseniuro de Galio (GaAs), Seleniuro de Zinc (ZnSe), entre otros [10].

En relación a la síntesis de los pozos cuánticos, éstos pueden ser construidos al realizar una ‘hetero-unión’ entre diferentes materiales. Una forma sencilla de imaginar una heterounión es pensar en un ‘sándwich’ entre diferentes materiales. Una de las heterouniones más conocidas sea la del Al-GaAs/GaAs/AlGaAs la cual genera un pozo cuántico rectangular [11]; por otro lado, como resultado, se obtiene un gas bidimensional de electrones con una alta movilidad en sus portadores de carga, el cual está confinado en un potencial de naturaleza electrostática. Los sistemas con dopaje delta fueron introducidos por Wood [12] y tomaron gran interés en la comunidad científica debido al incremento en la movilidad de los portadores de carga respecto a los materiales con dopaje tradicional en bulto. Cabe destacar que el dopaje delta consiste en la sustitución parcial de elementos en una capa de ancho atómico en el material 3D, la cual genera un perfil de potencial en forma de ‘V’.

A raíz de las investigaciones sobre dopaje de una sola capa delta se comenzó a estudiar el dopaje delta doble, el cual generó gran interés debido a sus propiedades de traspunte electrónico. Por ejemplo, Carns *et al.* estudiaron la movilidad de los portadores de carga en Silicio con dos capas delta. En ese trabajo reportaron que esta propiedad de transporte mejoraba significativamente respecto al sistema de una sola capa cuando la distancia de separación intercapas era alrededor de los 200 Å [13]. Por su parte, Gurtovoi y colaboradores trabajaron con un sistema doble-delta dopado en GaAs en el que determinaron una optimización para la conductividad eléctrica cuando la distancia entre capas resultó ser de 200Å [14]. Años más tarde, Rodríguez-Vargas y colaboradores determinaron teóricamente los sistemas doble capa en GaAs tipo  $p$  y Si tipo  $n$  proponiendo expresiones para la movilidad de los portadores de carga [15,16].

Para visualizar claramente las ideas previamente mencionadas, se le recomienda al lector ver la representación esquemática bidimensional de Ploog [17] y la representación en tres dimensiones por Scappucci *et al.* [18] de los sistemas delta dopados. Es importante recalcar, que para este tipo de estructuras, el término ‘delta’ no proviene de la forma matemática de la función Delta de Dirac, sino más bien de considerar un material 3D como una gran cantidad de capas 2D consecutivas, en las que teóricamente, solo se dopa fuertemente una de estas capas bidimensionales.

El confinamiento cuántico de los electrones libres en los deltas dopados produce la formación de subbandas discretas y, por tanto, induce transiciones entre las subbandas en la banda de conducción. Este comportamiento ha permitido muchos avances tecnológicos en dispositivos optoelectrónicos de alta velocidad y alta sensibilidad, como fotodetectores, detector de infrarrojos, moduladores, etc. [19-23]. En particular, la inclusión de los delta dopados en estructuras cuánticas de baja dimensión tiene un gran potencial para la tecnología de terahercios (THz) [24-27]. Por esta razón, varios estudios se han centrado en las propiedades ópticas de los sistemas con pozos cuánticos delta dopados por sus grandes aplicaciones potenciales y para dispositivos optoelectrónicos [28,29,22]. Por ejemplo, se demostró que el dopaje y los campos eléctricos y magnéticos modifican las propiedades ópticas en una estructura cuántica AlGaAs/GaAs formada por un  $\delta$ -dopado y triple pozos cuánticos [28]. Asimismo, se investigó el efecto no resonante de un láser intenso sobre las propiedades ópticas no lineales, relacionadas entre subbandas, en un  $\delta$ -dopado doble tipo  $n$  asimétrico en el GaAs [29]. Los resultados numéricos revelaron que las propiedades ópticas estudiadas se ven significativamente afectadas por el intenso campo láser no resonante y las impurezas bidimensionales. En este contexto, se ha estudiado la influencia de los átomos de impureza donantes y la distancia de separación entre pozos en un  $\delta$ -dopado doble tipo  $n$  simétricos sobre las propiedades ópticas relacionadas manifestadas por las transiciones inter-subbandas para el GaAs [22]. Se demostró que con y sin la presencia de un átomo de impureza donante, el coeficiente de absorción sufre un importante corrimiento al rojo, así como

una disminución significativa en su magnitud. Otra investigación teórica sobre las propiedades de absorción óptica de los  $\delta$ -FET han revelado que el voltaje de contacto induce un aumento en la amplitud y un corrimiento al rojo del espectro de la absorción. Por el contrario, la barrera hidrostática induce un desplazamiento del espectro hacia el azul con un aumento en la amplitud del pico [23]. Una evidencia experimental ha demostrado una mejora significativa en la fotodetección a bajas temperaturas con la inclusión de un pozo  $\delta$ -dopado en fotodetectores infrarrojos de Silicio/Germanio (Si/Ge) [19].

Sin embargo, para fabricar y diseñar un sistema avanzado de bajas dimensiones a gran escala es obligatorio tener en cuenta el desorden estructural presente en los nanodispositivos. Además de esto, las propiedades físicas y los fenómenos relacionados, como las propiedades ópticas, se rigen por el tipo y la intensidad del desorden [30-35].

Por ejemplo, en la Ref. [30] se exploró el efecto del desorden, para la intensidad de láser aplicado, la densidad de impurezas y un campo eléctrico externo aplicado, sobre el coeficiente de absorción lineal, no lineal y total. Consecuentemente, los cambios en la densidad de impurezas ya sea en el bulto (3D) o en una sola capa (2D) repercute fuertemente en propiedades optoelectrónicas tales como el coeficiente de absorción y el cambio del índice de refracción. Lo anterior se debe principalmente a los efectos que tiene tal desorden en el fondo del potencial atractivo, que a su vez genera diferencias en las energías propias del sistema [30]. En este trabajo se analizan los valores del desorden en la densidad de impurezas y la intensidad del láser a partir de las cuales se conserva o se pierde el comportamiento característico del cambio en el índice de refracción del material. Así que en el presente trabajo exploramos una simulación numérica del efecto que tiene el desorden para  $N_{2D}$  sobre el cambio en el índice de refracción lineal, no lineal y total en un sistema delta dopado tipo  $n$  en una matriz de GaAs.

Nuestro trabajo se encuentra desglosado de la siguiente forma: la Sec. 2 muestra la metodología empleada, basada en la teoría de Masa Efectiva, la aproximación de Thomas-Fermi y la aproximación de Matriz Densidad. La Sec. 3 explora los resultados que hemos obtenido referentes al cambio en el índice de refracción lineal, no lineal y total para el sistema delta dopado simple con dopaje tipo  $n$  en GaAs. Asimismo, se presentan los cálculos de la desviación estándar del promedio de dicha propiedad respecto al número de interacciones (número de experimentos numéricos) realizadas, con el fin de verificar la cantidad mínima necesaria para considerar en cada caso. Finalmente, la Sec 4 nos muestra las conclusiones del presente trabajo.

## 2. Metodología

La estructura electrónica, así como propiedades optoelectrónicas no lineales (como el cambio en el índice de refracción), se pueden determinar conociendo los autovalores y funciones propias de la solución de la ecuación de Schrödin-

ger (ES) asociada al sistema, esto se calcula para los portadores de carga (electrones en este caso). La ES, en unidades efectivas, tiene la forma:

$$-\frac{d^2\psi}{dz^2} + V\psi = E\psi. \quad (1)$$

En la Ec. (1) todos los parámetros involucrados son adimensionales. El carácter dimensional de cada parámetro se retoma al multiplicar por un factor de la energía de Rydberg del sistema ( $Ry = 5.8341$  meV) o del radio de Bohr efectivo ( $a_0 = 98.72$  Å). Partiendo de la teoría de masa efectiva y de la aproximación de Thomas-Fermi, es posible establecer el perfil del potencial electrostático al que estarán sujetos los portadores de carga en nuestra estructura semiconductor, caso similar a lo mostrado en las Refs. [36-38]. De esta manera, las propiedades

del estado base del sistema se pueden escribir en términos de la densidad de los portadores de carga [39]. Consecuentemente, el potencial para un sistema con dopaje delta simple se escribe (en unidades efectivas) como [38]:

$$V(z) = -\frac{\alpha^2}{(\alpha|z| + z_0)^4}, \quad (2)$$

donde  $\alpha = 2/15\pi$  y  $z_0 = \alpha^3/(15\pi N_{2D})^{1/5}$ . Es claro que  $\alpha$  es una constante, mientras que  $z_0$  depende de la densidad bidimensional de impurezas en el sistema.

Por otro lado, partiendo de la teoría Matriz Densidad es posible determinar el cambio en el índice de refracción lineal ( $\Delta n^{(1)}$ ) y no lineal ( $\Delta n^{(3)}$ ) para un pozo cuántico simétrico con las siguientes relaciones [40,41]:

$$\Delta n^{(1)}(\omega)/n_r = \frac{1}{2n_r^2\epsilon_0} \left( \frac{m^*k_B T}{L\pi\hbar^2} \right) \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_f)/k_B T]} \right\} \frac{\Delta E - \hbar\omega}{(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2}, \quad (3)$$

$$\Delta n^{(3)}(\omega, I)/n_r = -\frac{1}{2n_r^2\epsilon_0} \left( \frac{I}{2\epsilon_0 n_r c} \right) \left( \frac{m^*k_B T}{L\pi\hbar^2} \right) \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E_i)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E_f)/k_B T]} \right\} \frac{|M_{fi}|^2}{[(\Delta E - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2]^2}. \quad (4)$$

En las expresiones anteriores,  $\omega$  representa la frecuencia del fotón incidente en el sistema,  $n_r$  es el índice de refracción,  $\epsilon_0$  la permitividad eléctrica,  $m^*$  es la masa efectiva de los electrones en el semiconductor,  $k_B$  es la constante de Boltzmann,  $T$  representa la temperatura y  $L$  es el ancho efectivo del pozo cuántico. Ahora bien, respecto a las energías involucradas en las Ecs. (3) y (4),  $E_F$  representa la Energía de Fermi,  $E_i$  es la energía del estado inicial mientras que  $E_f$  es la energía del estado final, de tal forma que  $\Delta E = E_f - E_i$ . Por otro lado,  $\tau_{in}$  representa el tiempo de relajación intersubbanda (0.14 ps para nuestros cálculos [42]). Además, en la Ec. (4), podemos observar un cambio en el signo respecto al término lineal, además de que también existe una dependencia de la intensidad del láser  $I$  y del cuadrado de los elementos de matriz  $|M_{fi}|$ , el cual se define como [42]:

$$|M_{fi}| = |q| \int_{-L/2}^{L/2} \phi_f^\dagger z \phi_i dz. \quad (5)$$

En la Ec. (5),  $\phi_i$  ( $\phi_f$ ) representa la función de onda del estado inicial (final) que es solución a la ecuación de Schrödinger asociada al pozo cuántico del sistema  $\delta$ -dopado, mientras que  $q$  es la carga del electrón. Es importante aclarar que las Ecs. (3) y (4) describen las propiedades ópticas citadas en un perfil de potencial simétrico. En nuestro sistema,  $M_{ii} = M_{ff} = 0$  debido a que integramos sobre una región simétrica el producto de funciones que resulta ser impar. Por otro lado, en el límite de bajas temperaturas (donde  $T$  tiende a cero) podemos reescribir las Ecs. (3) y (4) de una forma más compacta, además, si dividimos cada una de estas ecuaciones entre el término lineal del cambio del índice de refracción del sistema de referencia el cual estará representado en las ecuaciones con un súper índice  $\delta$  se obtiene

$$\Delta n_{Rel}^{(1)}(\omega) = \frac{|M_{fi}|^2 \Delta E_{fi} (\Delta E_{fi} - \hbar\omega) / [(\Delta E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2]}{|M_{10}^\delta|^2 \Delta E_{10}^\delta (\Delta E_{10}^\delta - \hbar\omega) / [(\Delta E_{10}^\delta - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2]}, \quad (6)$$

$$\Delta n_{Rel}^{(3)}(\omega, I) = -\Delta n_{Rel}^{(1)} \left\{ \frac{(\frac{2I}{\epsilon_0 n_r c}) |M_{fi}|^2}{[(\Delta E_{fi} - \hbar\omega)^2 + (\hbar/\tau_{in})^2]} \right\}. \quad (7)$$

En la Ec. (6), el subíndice '10' indica que se ha determinado dicho parámetro para la transición entre el estado base (0) y el primer estado excitado (1). Así que el índice de refracción relativo total ( $\Delta n_{Rel}^{Tot}$ ) lo podemos expresar como:

$$\Delta n_{Rel}^{(Tot)}(\omega, I) = \Delta n_{Rel}^{(1)}(\omega) + \Delta n_{Rel}^{(3)}(\omega, I). \quad (8)$$

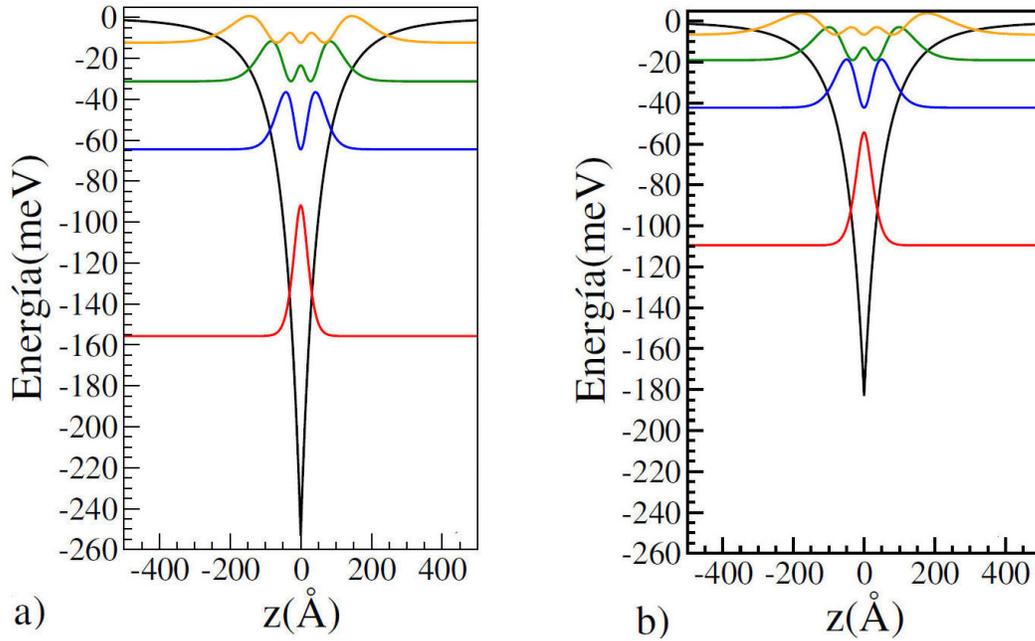


FIGURE 1. Perfil de potencial, niveles energéticos y cuadrados de las funciones de onda respectivas. Las densidades de impurezas en el plano dopante corresponden para la figura de la izquierda a)  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y en la figura de la derecha b)  $N_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ .

En el presente trabajo realizaremos el análisis del efecto del desorden, denotado por  $\zeta$ , en las propiedades ópticas no lineales de un sistema dopado delta en GaAs. Para ejemplificar esta idea, nos permitiremos explicarla pensando que tenemos únicamente cinco configuraciones en las que se ha considerado un desorden del 10%, es decir  $\zeta = 0.1$ . Así, podemos partir de un sistema en el que  $N_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Por tanto, con  $\zeta=0.1$ , estamos considerando que se ha introducido un desorden máximo del 10% en la densidad de impurezas en el plano dopante, por lo tanto nuestras cinco configuraciones posibles podrían tener un mínimo de  $N_{2D} = 4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y un máximo posible de  $N_{2D} = 5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , de esta manera nosotros calcularemos el cambio en el índice de refracción, usando la ecuación para cada uno de los cinco pozos delta dopados, donde al azar se le ha asignado un valor de  $4.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \leq N_{2D} \leq 5.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Posteriormente, para las cinco configuraciones calculamos el promedio del cambio en el índice de refracción. El experimento numérico anterior lo realizaremos desde 1 hasta 4000 configuraciones diferentes manteniendo constante el desorden. Finalmente, en el presente trabajo se realizarán los experimentos numéricos como se expuso previamente, para diferentes  $\zeta$  con desorden sobre  $N_{2D}$  y la intensidad del láser  $I$ .

### 3. Resultados

En el presente trabajo se ha considerado un sistema  $\delta$ -dopado simple en una estructura de GaAs tipo  $n$ . De tal forma que los parámetros usados en nuestros cálculos son: la densidad de impurezas bidimensionales del sistema de referencia  $N_{2D}^{Ref} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , la constante dieléctrica del sis-

tema  $\epsilon_0 = 12.5$  y la masa libre de los portadores de carga  $m_e^* = 0.067m_0$ , donde  $m_0$  es la masa del electrón en el vacío.

La Fig. 1 muestra el perfil de potencial para un sistema  $\delta$ -dopado simple en el que la densidad de impurezas ionizadas en el plano dopante es a)  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y b)  $N_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Es muy claro que una mayor densidad de impurezas origina un fondo del pozo mayor, lo anterior se debe al número de impurezas ionizadas que se ubican en el plano dopante, generando un potencial electrostático más atractivo. En esta figura, se observa a) un fondo de potencial cercano a los -260 meV mientras que para b) es alrededor de los -180 meV. El hecho de que el fondo del potencial sea más bajo, claramente influye en el estado base, el cual pasa de unos -110 meV para el sistema de referencia, a unos -155 meV cuando se ha aumentado en un 50%  $N_{2D}$ . Es muy importante mencionar la diferencia energética entre el estado base y el primer estado excitado, siendo  $\Delta E$  equivale a unos 90 meV para a), y aproximadamente unos 60 meV en el sistema de referencia. Cabe mencionar que las variaciones en  $\Delta E$  tienen un fuerte efecto sobre en el cambio del índice de refracción, tal y como se puede notar en las Ecs. (3) y (4).

En la Fig. 2 podemos observar a detalle el cambio en el índice de refracción; las gráficas de a) y b) corresponden al sistema  $\delta$ -dopado en el que  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , mientras que para c) y d)  $N_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Además, las dos figuras de la izquierda, a) y c), representan únicamente a los términos lineales de cada caso, mientras que b) y d) indican los términos totales (término lineal más el término no lineal). En todos los casos, la transición se considera entre el estado base y el primer estado excitado del sistema  $\delta$ -dopado para el GaAs tipo  $n$ . En esta figura, se han tomado cuatro

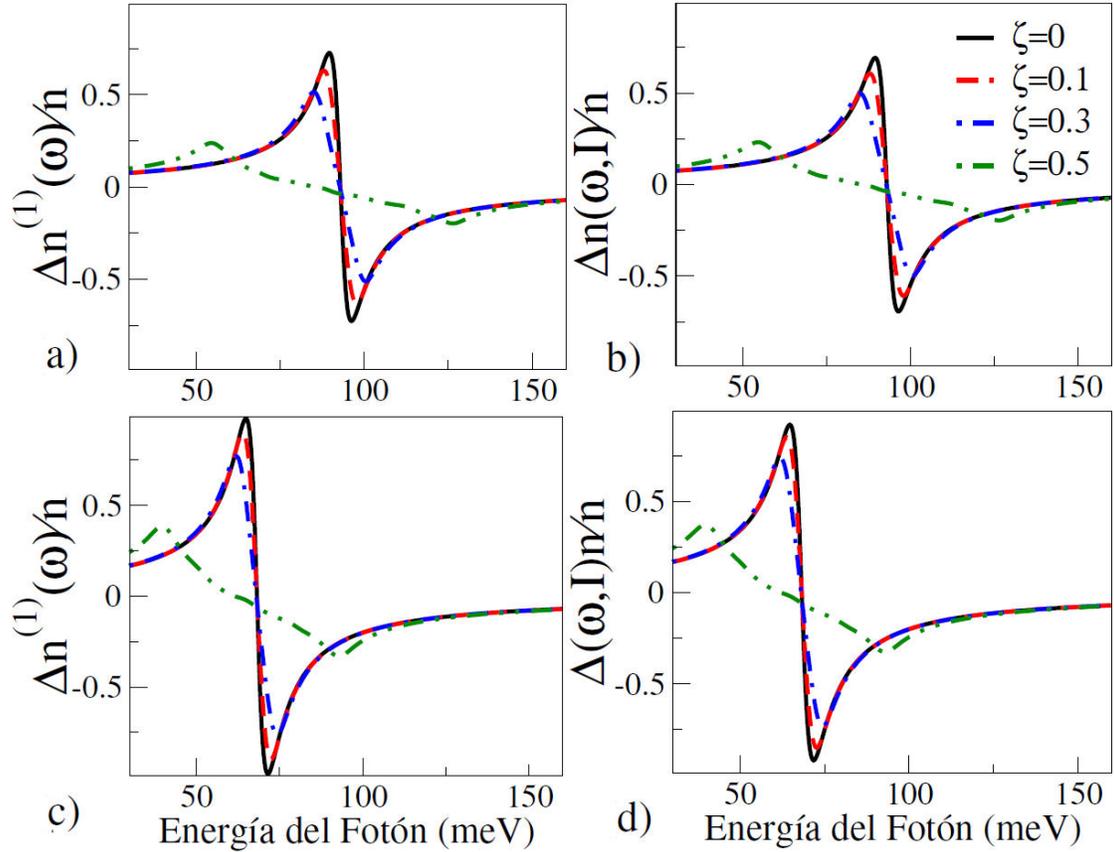


FIGURE 2. Cambio total en el índice de refracción para la transición intersubbanda de los estados 1-0, como función de la energía del fotón incidente, con desorden en la densidad bidimensional para el pozo cuántico  $\delta$ -dopado. Las dos imágenes superiores corresponden a  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y las dos inferiores a  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Diferentes intensidades de desorden en la densidad bidimensional  $\zeta_{N_{2d}} = 0, 0.05, 0.1, \text{ y } 0.5$  se han considerado para los casos lineal en a), c) y total b), d). En este caso, la intensidad del láser es  $I=0.1 \text{ MW/cm}^2$ .

intensidades diferentes de desorden en la densidad bidimensional de impurezas  $\zeta_{N_{2D}} = 0, 0.05, 0.1, \text{ y } 0.5$ . Es muy importante mencionar que la línea continua color negro, representa los casos en el que no hay desorden. Como se observa, a medida en el que se incrementa el desorden (desde un 10% hasta 50%), un cambio significativo ocurre en la amplitud de esta propiedad óptica no lineal, la cual se ve ligeramente modificada cuando  $\zeta_{N_{2D}}$  es pequeño (10%) o moderados (30%), pero se ve fuertemente afectada con desordenes grandes (50%). Es interesante notar que en estructuras con altos desordenes de la densidad bidimensional ( $\zeta_{N_{2D}} = 0.5$ ) la forma característica de la función  $\Delta n$  se pierde por completo. El efecto anterior es muy notorio, ya que para los tres primeros casos considerados de  $\zeta_{N_{2D}}$ , se puede observar como el 'cero' (punto en el que  $\Delta n$  pasa de positivo a negativo, en la literatura también se le llama 'nodo') no cambia su ubicación; sin embargo en  $\zeta_{N_{2D}} = 0.5$  no se puede apreciar con claridad el valor de la energía del fotón para el cual se forma el nodo. Además, como es de esperarse, el nodo de las dos gráficas inferiores se ubican alrededor de los 70 meV, mientras que para a) y b) se ubican cerca de los 90 meV. Lo anterior se debe principalmente a la diferencia energética entre los estados base y primer excitado de cada configuración.

Resulta importante realizar una comparación entre el  $\delta$ -dopado con los pozos cuánticos rectangulares. Uno de los primeros trabajos en estudiar los cambios en el índice de refracción es el de Kuhn *et al.* [40]. En este trabajo los autores trabajan con densidades de portadores de unos  $3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  y anchos de pozos ( $L$ ) de entre 70 y 100 Å. Con éstos parámetros se obtienen que los nodos (o ceros) del cambio en el índice de refracción toma valores alrededor de 0.1 a 0.13 eV, donde la modulación de las propiedades ópticas no lineales radica principalmente en el ancho del pozo rectangular y su profundidad. En nuestro trabajo es claro que la modulación de  $\Delta n$  radica principalmente en la densidad de los portadores de carga, el cual modifica fuertemente el fondo del pozo cuántico, tal y como lo muestra la figura dos, con densidades de portadores que van de los  $5\text{-}7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  se genera un corrimiento del nodo que va de 0.1 eV a poco menos de 0.75 eV. Es claro que la modulación de las propiedades ópticas en los sistemas delta depende principalmente de la densidad de portadores bidimensionales, mientras que en los pozos rectangulares depende de dos parámetros.

En la Fig. 3 examinamos los efectos introducidos por el desorden sobre la intensidad del láser, el cual es representado con  $\zeta_I$ , y se le han asignado  $\zeta_I = 0, 0.05, 0.1, \text{ y } 0.5$ ; en este

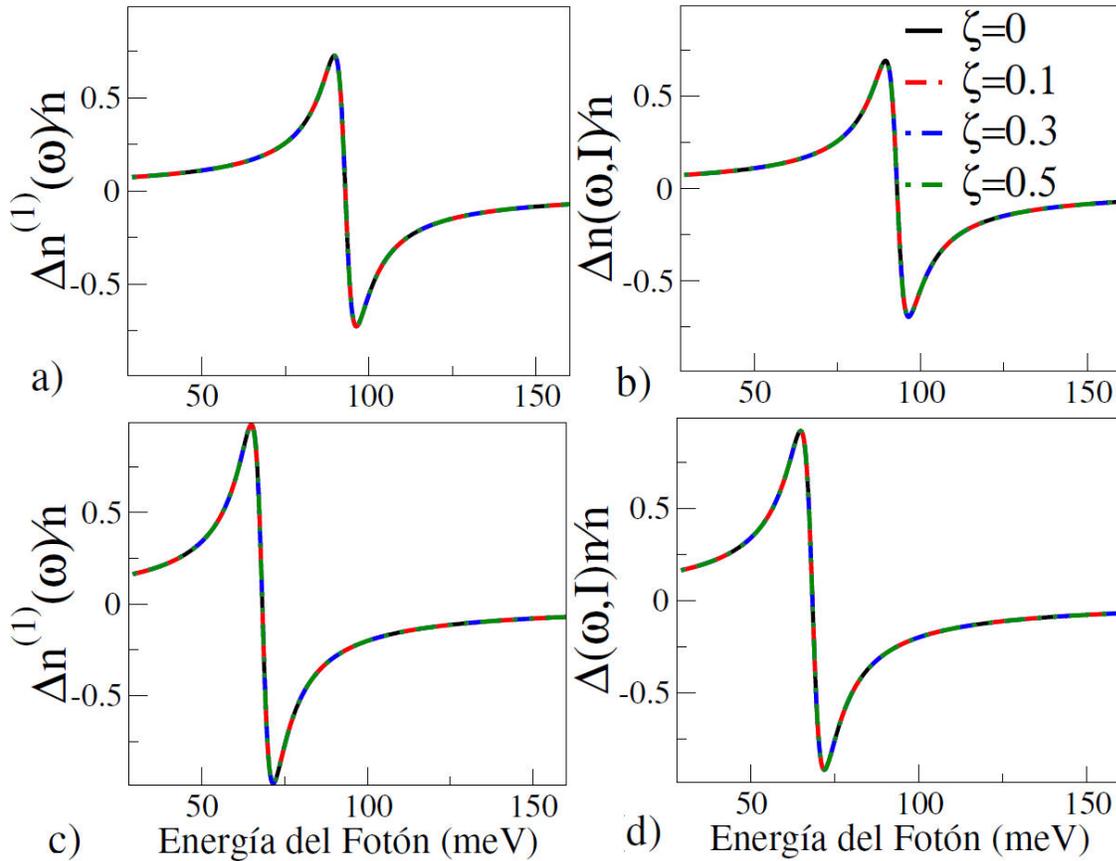


FIGURE 3. El efecto del desorden en la intensidad del láser incidente sobre el cambio en el índice de refracción, se observa en dos concentraciones de impurezas para los casos lineal (a) y (c), además del caso total (b) y (d); lo anterior para la transición intersubbanda (1-0), como una función de la energía del fotón incidente. Se han tomado diferentes magnitudes en el desorden, representado por  $\zeta_I = 0, 0.1, 0.3, 0.5$ . En todos los casos, hemos considerado que la intensidad del láser sea  $I = 0.1 \text{ MW/cm}^2$ , además de que  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ( $N_{2d} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) corresponde a la primera (segunda) fila.

caso es sumamente interesante remarcar que sin importar el valor del desorden, la densidad de impurezas ionizadas o si se trata del término lineal o total de  $\Delta n$ , no se presentan cambios significativos para las propiedades ópticas. En primer lugar, podemos asegurar que el desorden en  $I$  no se verá reflejado en los términos lineales, ya que  $\Delta n_{Rel}^{(1)}$  no depende explícitamente de la intensidad del láser. Sin embargo, como notamos en la Ec. (7), el término no lineal sí depende de  $I$ , y por ende también el término total. En el caso de los términos totales (b y d), la propiedad óptica no lineal no sufre cambios debido a que se ha considerado el promedio de  $\Delta n_{Rel}^{Tot}$ , que tal como se abordó en la metodología, al tomar al menos 100 configuraciones (manteniendo constante el desorden, por ejemplo  $\zeta_I = 0.1$ ) y determinar el promedio con diferentes  $I$ , no se encuentran cambios significativos. Lo anterior se debe principalmente a que el término no lineal es pequeño comparado al término lineal además de que éste depende linealmente de  $I$ .

La Fig. 4 muestra la desviación estándar ( $\sigma$ ) para el promedio del cambio en el índice de refracción respecto al número de configuraciones desordenadas. En a) podemos ver el caso en el que  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , mientras que para

b)  $N_{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ . Comenzando con la figura de la izquierda, es claro que mientras aumentamos el número de configuraciones desordenadas, existe una tendencia de que la desviación estándar se comporte como una constante. Así en a) para el caso donde  $\zeta = 0.1$ , alrededor de las 1000 configuraciones nuestro  $\sigma$  se ‘estabiliza’ en torno a 0.22; esto quiere decir que para este caso, después de mil configuraciones tiene sentido determinar el promedio del cambio en el índice de refracción. En esta misma figura notamos que a mayor desorden, la tendencia de estabilizar la desviación estándar se logra a mayor número de arreglos, con aproximadamente las 1500 configuraciones para  $\zeta = 0.3$  y cerca de las 2500 para  $\zeta = 0.5$ . Por otro lado en b), donde la densidad bidimensional de impurezas es menor, la desviación estándar tiende a comportarse como una recta horizontal con menor número de configuraciones. Lo anterior lo atribuimos al hecho de que a mayor densidad de impurezas, el fondo del pozo es mayor, lo que origina un cambio significativo en la diferencia de energías entre el estado base y el primer excitado, así como en el solapamiento de las funciones de onda de dichos estados (medidos por  $|M_{fi}|$ ), que finalmente repercute sobre el índice de refracción. Es muy interesante remarcar como la

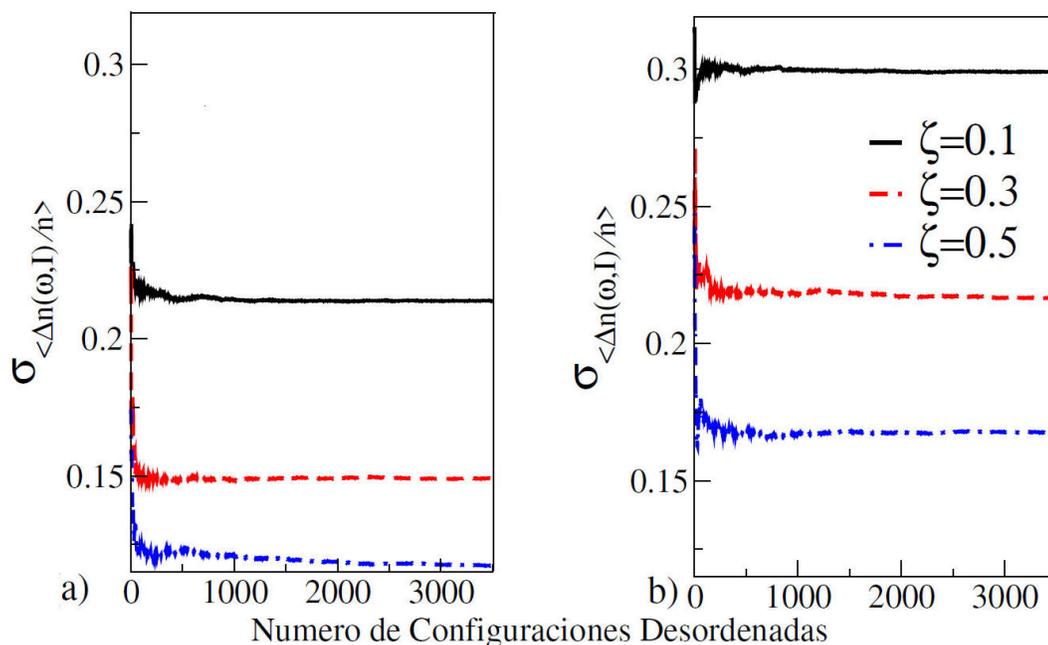


FIGURE 4. Desviación estándar del cambio del índice de refracción promedio en función del número de configuraciones desordenadas. Se han considerado tres valores de desorden ( $\zeta = 0, 0.1, 0.3$  y  $0.5$ ). Aquí, la columna izquierda (derecha) corresponde a  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ( $N_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ), los demás parámetros empleados son los mismos usados en la Fig. 2.

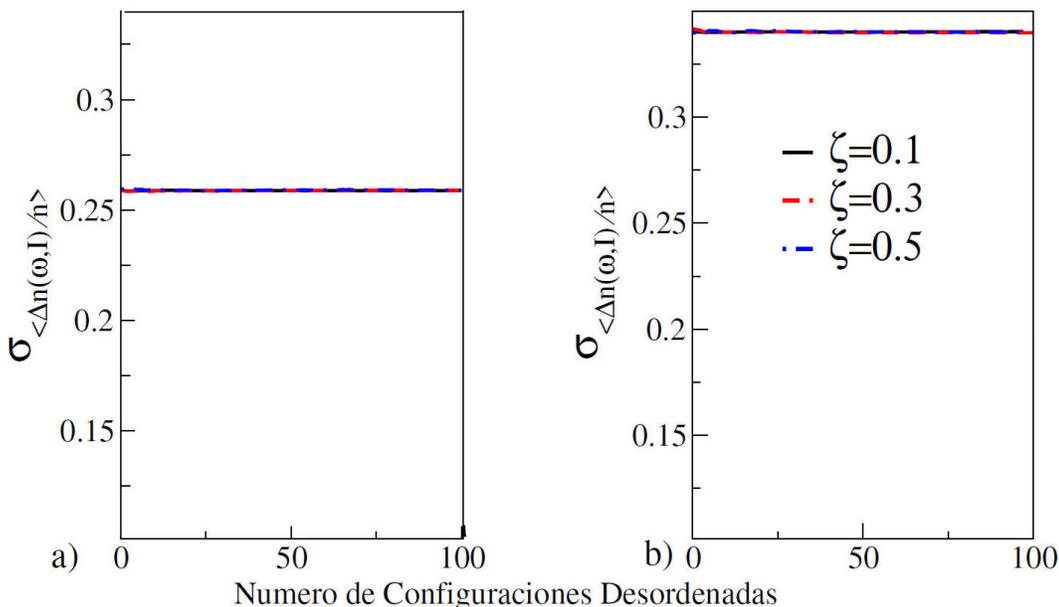


FIGURE 5. La desviación estándar del promedio en el cambio del índice de refracción como función del número de configuraciones desordenadas, asociadas a la intensidad del láser ( $\zeta = 0.1, 0.3$  y  $0.5$ ). Aquí, la columna de la izquierda (derecha) corresponde a la densidad  $N_{2D} = 7.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  ( $N_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ).

desviación estándar nos da la medida de la dispersión de los valores respecto a la media, en el caso del pozo más profundo tenemos una dispersión menor de datos.

La desviación estándar como función del número de configuraciones desordenadas se muestra en la Fig. 5a). A la derecha se muestra el caso de una densidad bidimensional en el plano dopante de referencia ( $N_{2D} = 5.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ) y

a la izquierda un sistema con una densidad 50% mayor. Si nos enfocamos en la a) es claro que no existe cambio aparente para  $\sigma$  sin importar el número de configuraciones ni el porcentaje de desorden introducido en la intensidad del láser ( $\zeta_I$ ). Lo anterior es de esperarse, ya que como hemos observado en la Fig. 3, el cambio en el índice de refracción no sufre cambios aparentes. El mismo comportamiento puede

ser observado en b). Finalmente, las curvas de la desviación estándar, vistas como una medida la dispersión respecto a la media, son menores para el caso donde es mayor densidad bidimensional, mismo comportamiento que se analizó en la Fig. 4.

#### 4. Conclusión

En el presente trabajo se ha planteado el perfil de potencial para un sistema delta dopado simple con desorden en la densidad de impurezas y la intensidad del láser del fotón incidente. Partiendo de la teoría de masa efectiva y la teoría Matriz Densidad se ha expresado el cambio en el índice de refracción lineal, no lineal y total para la estructura del pozo cuántico a base de GaAs tipo  $n$ . Usando dos valores diferentes para la densidad de impurezas en el plano dopante, se ha estudiado el efecto de introducir desorden en la densidad de impurezas ( $\zeta_{N_{2D}}$ ) y en la intensidad del láser ( $\zeta_I$ ). Para el desorden  $\zeta_{N_{2D}}$  al rededor del 10%, el cambio en el índice de refracción no se ve gravemente afectado para ninguna de las dos densidades de impurezas consideradas, sin embargo, en ambos casos cuando el desorden es mucho mayor (al rededor del 50%) se pierde totalmente la característica forma de la

propiedad óptica. Por otro lado, en relación al desorden introducido a la intensidad del láser, la propiedad óptica total no sufre cambios aparentes, lo anterior es debido a que únicamente el término no lineal depende de  $I$ , el cual resulta ser pequeño respecto al término lineal para los parámetros de nuestros cálculos, además de que existe una dependencia lineal entre  $\Delta n$  e  $I$ . El presente experimento numérico lo hemos realizado con diferentes cantidades de iteraciones, de forma tal, que hemos determinado el número de iteraciones mínimas necesarias usando la desviación estándar de la función asociada al cambio en el índice de refracción. Resulta interesante que cuanto mayor es  $N_{2D}$ , un número mayor de iteraciones es necesaria, lo anterior lo atribuimos a que al aumentar la densidad de impurezas en la capa dopante, el fondo del pozo se hace más bajo, separando las energías entre el estado base y el primer estado excitado. Nuestra investigación es especialmente importante para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos que incluyen dopaje tipo delta ya que hemos podido determinar el efecto del desorden estructural sobre las propiedades del cambio en el índice de refracción, sabiendo que la elaboración de éstos no está libre del desorden, que en esencia puede alternar las propiedades ópticas y de transporte en semiconductores.

1. A. Ganguly, and R. Goswami, Low dimensional materials in nanoelectronics, in: Nanoelectronics: Physics, Materials and Devices, (Elsevier, 2023), pp. 173-192. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-91832-9.00010-5>.
2. I. C. Cheric, and S. Mohammadi, Double quantum-well nanotube tunneling field-effect transistor, *Materials Science in Semiconductor Processing* **142** (2022) 106514. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.106514>.
3. H. Liu, C. Song, A. Spring Thorpe, and J. Cao, Terahertz quantum-well photodetector, *Applied physics letters* **84** (2004) 4068, <https://doi.org/10.1063/1.1751620>.
4. L.-E. Cai *et al.*, Effect of barrier thickness on photoelectric properties of InGaN/GaN asymmetric multiple quantum-well structure light-emitting diode, *AIP Advances* **12** (2022) 065007, <https://doi.org/10.1063/5.0087666>.
5. B. Roy, M. A. Billaha, R. Dutta, and D. Mukherjee, Analysis of dark current and detectivity of CdS/ZnSe based multiple quantum well photodetector for mid-infrared applications, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **147** (2023) 115614, <https://doi.org/10.1016/j.physe.2022.115614>.
6. S. Emin, S. P. Singh, L. Han, N. Satoh, and A. Islam, Colloidal quantum dot solar cells, *Solar Energy* **85** (2011) 1264, <https://doi.org/10.1016/j.solener.2011.02.005>.
7. Y.-M. Duan, and X.-C. Li, Nonlinear optical rectification of GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub> quantum dots with Hulthén plus Hellmann confining potential, *Chinese Physics B* **32** (2023) 017303, <https://doi.org/10.1088/1674-1056/ac70bf>.
8. C. Duque *et al.*, Impurity-related linear and nonlinear optical response in quantum-well wires with triangular cross section, *Journal of luminescence* **143** (2013) 304, <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2013.04.048>.
9. H. Noverola-Gamas, L. M. Gaggero-Sager, and O. Oubram, Model of n-type quadruple  $\delta$ -doped GaAs quantum wells, *The European Physical Journal B* **93** (2020) 1, <https://doi.org/10.1140/epjb/e2019-100412-7>.
10. L. I. Berger, Semiconductor materials, (CRC press, 2020).
11. K. Inoue, H. Sakaki, J. Yoshino, and T. Hotta, Self-consistent calculation of electronic states in AlGaAs/GaAs/AlGaAs selectively doped double-heterojunction systems under electric fields, *Journal of applied physics* **58** (1985) 4277, <https://doi.org/10.1063/1.335563>.
12. C. Wood, G. Metzger, J. Berry, and L. Eastman, Complex free-carrier profile synthesis by atomic plane doping of MBE GaAs, *Journal of Applied Physics* **51** (1980) 383, <https://doi.org/10.1063/1.327383>.
13. T. Carns, X. Zheng, and K. Wang, Enhancement of Si hole mobility in coupled delta-doped wells, *Applied physics letters* **62** (1993) 3455, <https://doi.org/10.1063/1.109047>.
14. V. Gurtovoi, V. Valyaev, S. Y. Shapoval, and A. Pustovit, Electron transport properties of double delta-doped GaAs structures grown by low-pressure metalorganic chemical vapor deposition, *Applied physics letters* **72** (1998) 1202, <https://doi.org/10.1063/1.121013>.
15. I. Rodríguez-Vargas, L. M. Gaggero-Sager, and V. Velasco, Thomas-Fermi-Dirac theory of the hole gas of a double p-type  $\delta$ -doped GaAs quantum wells, *Surface science* **537** (2003) 75, [https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(03\)00546-6](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(03)00546-6).

16. I. Rodríguez-Vargas, and L. Gaggero-Sager, Subband and transport calculations in double n-type  $\delta$ -doped quantum wells in si, *Journal of applied physics* **99** (2006) 033702, <https://doi.org/10.1063/1.2168024>.
17. K. Ploog, Delta- $(\delta)$  doping in mbe-grown gaas: concept and device application, *Journal of Crystal Growth* **81** (1987) 304, [https://doi.org/10.1016/0022-0248\(87\)90409-x](https://doi.org/10.1016/0022-0248(87)90409-x).
18. G. Scappucci *et al.*, Bottom-up assembly of metallic germanium, *Scientific reports* **5** (2015) 12948, <https://doi.org/10.1038/srep12948>.
19. C.-H. Lin *et al.*,  $\delta$ -doped mos ge/si quantum dot/well infrared photodetector, *Thin Solid Films* **508** (2006) 389, <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2005.06.109>.
20. M. Lachab *et al.*, Mbe growth and transport properties of silicon  $\delta$ -doped gaas/alas quantum well structures for terahertz frequency detection, *Journal of crystal growth* **312** (2010) 1761, <https://doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2010.02.018>.
21. C. Duque *et al.*, About possible thz modulator on the base of delta-doped qws, *Superlattices and Microstructures* **87** (2015) 5, <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2015.07.048>.
22. K. Rodríguez-Magdaleno, A. Turkoglu, F. Ungan, M. Mora-Ramos, and J. Martínez-Orozco, Donor impurity atom effect on the inter-subband absorption coefficient for symmetric double n-type  $\delta$ -doped gaas quantum well, *Superlattices and Microstructures* **156** (2021) 106988, <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2021.106988>.
23. O. Oubram, O. Navarro, I. Rodríguez-Vargas, L. M. Gaggero-Sager, and H. Noverola, Controlling the optical absorption properties of  $\delta$ -fets by means of contact voltage and hydrostatic pressure effects, *Superlattices and Microstructures* **127** (2019) 157, <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.11.062>.
24. V. Akimov *et al.*, Study of delta-doped quantum wells (2022).
25. H. Schneider, and H. C. Liu, Quantum well infrared photodetectors (2007).
26. H. Wang *et al.*, Broadband bias-tunable terahertz photodetector using asymmetric gaas/algaas step multi-quantum well, *Applied Physics Letters* **113** (2018) 171107, <https://doi.org/10.1063/1.5046881>.
27. H. Liu *et al.*, Terahertz quantum well photodetectors, *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* **14** (2008) 374, <https://doi.org/10.1109/JSTQE.2007.910710>.
28. R. Restrepo, L. Castano-Vanegas, J. Martínez-Orozco, A. Morales, and C. Duque, Mid-infrared linear optical transitions in  $\delta$ -doped algaas/gaas triple-quantum well, *Applied Physics A* **125** (2019) 31, <https://doi.org/10.1007/s00339-018-2321-y>.
29. H. Sari *et al.*, Nonlinear optical properties of asymmetric n-type double  $\delta$ -doped gaas quantum well under intense laser field, *The European Physical Journal B* **90** (2017) 162, <https://doi.org/10.1140/epjb/e2017-80210-9>.
30. H. Noverola-Gamas, L. M. Rojas, S. Azalim, and O. Oubram, Disorder effect on intersubband optical absorption of n-type  $\delta$ -doped quantum well in gaas, *Journal of Physics: Condensed Matter* **35** (2023) 405602, <https://doi.org/10.1088/1361-648X/ace2a4>.
31. H. Bao, and X. Ruan, Optical absorption enhancement in disordered vertical silicon nanowire arrays for photovoltaic applications, *Optics letters* **35** (2010) 3378, <https://doi.org/10.1364/OL.35.003378>.
32. I. Friel, C. Thomidis, and T. Moustakas, Well width dependence of disorder effects on the optical properties of algan/gan quantum wells, *Applied physics letters* **85** (2004) 3068, <https://doi.org/10.1063/1.1804253>.
33. A. Saffarzadeh, and L. Gharaee, Optical absorption spectrum in disordered semiconductor multilayers, *Journal of Applied Physics* **107** (2010) 104322, <https://doi.org/10.1063/1.3428476>.
34. S. Melkoud, A. Nafidi, and D. Barkissy, Effect of wells thicknesses disorder on quantum magnetotransport properties in GaAs/AlxGal-xAs multi-quantum wells near wavelength infrared detectors, *Micro and Nanostructures* **163** (2022) 107138, <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2021.107138>.
35. A. Sasaki, M. Kasu, T. Yamamoto, and S. Noda, Proposal and experimental results of disordered crystalline semiconductors, *Japanese journal of applied physics* **28** (1989) L1249, <https://doi.org/10.1143/JJAP.28.L1249>.
36. I. Rodríguez-Vargas, and L. M. Gaggero-Sager, Subband structure comparison between n-and ptype double delta-doped gaas quantum wells, *Rev. Mex. Fis.* **50** (2004) 614,
37. H. Noverola-Gamas, L. M. Gaggero-Sager, and O. Oubram, Nonlinear optical properties in n-type quadruple  $\delta$ -doped gaas quantum wells, *Chinese Physics B* **31** (2022) 044203, <https://doi.org/10.1088/1674-1056/ac248e>.
38. L. Ioriatti, Thomas-fermi theory of  $\delta$ -doped semiconductor structures: Exact analytical results in the high-density limit, *Physical Review B* **41** (1990) 8340, <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.8340>.
39. S. Lundqvist, and N. H. March, Theory of the inhomogeneous electron gas, Springer (Science & Business Media, 2013).
40. K. J. Kuhn, G. U. Iyengar, and S. Yee, Free carrier induced changes in the absorption and refractive index for intersubband optical transitions in alxgal-xas/gaas/alxgal-xas quantum wells, *Journal of Applied Physics* **70** (1991) 5010, <https://doi.org/10.1063/1.349005>.
41. H. Noverola-Gamas, L. M. Gaggero-Sager, and O. Oubram, Hydrostatic pressure and interlayer distance effects on nonlinear optical properties in n-type double delta-doped gaas quantum wells, *Physica Scripta* **95** (2020) 095813, <https://doi.org/10.1088/1402-4896/abb10f>.
42. D. Ahn, and S.-I. Chuang, Calculation of linear and nonlinear intersubband optical absorptions in a quantum well model with an applied electric field, *IEEE Journal of Quantum Electronics* **23** (1987) 2196, <https://doi.org/10.1109/JQE.1987.1073280>.