

PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **Modelado teórico de láseres de cascada cuántica en el infrarrojo medio**

Apellido y Nombres del director: **ROZAS, Guillermo**

Teléfono: **4847**

Dirección electrónica del director (ingresar una sola dirección): **guillermo.rozas@ib.edu.ar**

Cargo IB: **Jefe de Trabajos Prácticos, Área Ciencias**

¿Propone codirector? : **NO**

Datos Co-director:

Dirección electrónica del codirector (ingresar una sola dirección):

Título máximo alcanzado del codirector (Doctor, Magister, otros) :

Cargo docente del codirector en el IB (no excluyente):

Justifique brevemente el rol del Codirector:

Lugar de realización: **Laboratorio de Fotónica y Optoelectrónica, Gerencia de Física, CAB**

DETALLE TÉCNICO DE LA PROPUESTA

Orientación:

Materia Condensada

Breve descripción: **El interés en el rango espectral del infrarrojo medio (MIR), especialmente importante en aplicaciones de espectroscopía y sensado remoto, ha impulsado durante los últimos años la demanda de fuentes potentes, compactas y sintonizables en este rango, en particular de láseres de cascada cuántica (QCLs). En un láser semiconductor convencional la luz emitida es generada por la recombinación radiativa de electrones de la banda de conducción y huecos de la banda de valencia. En contraste, un QCL es un dispositivo unipolar basado en transiciones electrónicas de una subbanda de conducción confinada a otra en un sistema de pozos cuánticos acoplados, permitiendo en principio controlar por diseño la energía de emisión y hacerla arbitrariamente baja, lo cual los hace muy buenos candidatos para láseres en los rangos MIR y FIR.**

Para que un QCL emita luz, y lo haga de forma eficiente, deben conjugarse correctamente aspectos tanto del diseño como de la fabricación de la estructura semiconductor. La unidad emisora básica de un QCL está formada por una etapa de inyección, una región activa que emite la luz, y una etapa de colección. Esta unidad básica, compuesta típicamente por 3 a 9 pozos cuánticos acoplados, se repite periódicamente de forma tal que, al aplicar un potencial externo, la energía de la etapa de colección de una unidad coincide con la de inyección de la siguiente, permitiendo el transporte de electrones a lo largo de la superred. La ganancia óptica es el resultado de una cuidadosa ingeniería de los estados confinados, sus tiempos de vida media, tasas de dispersión y probabilidades de túnel, que genera la inversión de población entre las dos subbandas láser dentro de la región activa. Esta complejidad hace de los QCLs uno de los desafíos máximos de la manipulación por diseño de estados electrónicos en heteroestructuras y de la tecnología de dispositivos semiconductores.

En vista de los numerosos parámetros implicados y del balance preciso necesario para su

funcionamiento, se requiere de una estrecha correlación entre las propiedades reales de las estructuras una vez fabricadas con las simulaciones de sus propiedades electrónicas, ópticas y de transporte. El objetivo principal del trabajo será desarrollar e implementar numéricamente modelos teóricos que permitan predecir con precisión los estados electrónicos, las propiedades de transporte, y las propiedades ópticas de QCLs en el rango MIR, incluyendo la teoría y los algoritmos de cálculo necesarios. Existirá una cercana interacción con el grupo encargado de la fabricación y caracterización experimental de las muestras, contribuyendo a retroalimentar la relación cálculo-experimento.

La descripción básica de los estados electrónicos de heteroestructuras semiconductoras se realiza en la aproximación de funciones envolventes, incorporando técnicas multi-banda que permiten capturar de forma más precisa los efectos de no-parabolicidades para los estados confinados de mayor energía. Los efectos de cargas netas en la estructura (dopaje) son incorporados a través de la resolución autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger y Poisson. El transporte entre estos estados es considerado actualmente a través de modelos relativamente sencillos y eficientes que consideran tasas de dispersión fijas entre estados (calculadas a distintos niveles de aproximación), reduciendo el sistema a un problema de múltiples ecuaciones lineales acopladas. Una primera parte del trabajo se dedicará entonces a completar la teoría asociada a este tipo de modelos, considerando la forma más eficiente de calcular los potenciales de dispersión necesarios.

Uno de los problemas que se encuentran en los modelos de tasas de dispersión es que los mismos sólo consideran el transporte en forma semi-clásica, descartando completamente los factores de coherencia entre estados. Sin embargo, es sabido que esta descripción totalmente incoherente del transporte no es suficiente para explicar el comportamiento de los QCLs, haciendo predicciones incorrectas de sus propiedades en ciertos casos. En segundo lugar, estudiaremos entonces modelos “híbridos” que incorporen elementos de transporte coherente mediante métodos basado en matrices densidad.

Los programas necesarios para realizar estos cálculos de modelado electrónico de las heteroestructuras serán desarrollados por el grupo de trabajo en una combinación de lenguajes C y Python, con procesamiento en paralelo en CPU. Una vez completada la teoría, el objetivo será la implementación numérica en forma eficiente de los algoritmos, buscando generar un programa de cálculo de transporte cuántico completo. Se explorará además en todos los casos la conveniencia de paralelizar el cálculo sobre procesadores gráficos (GPU).

Metodología principal: Teórico

Metodología secundaria: Computacional

Información adicional: El trabajo será realizado con el apoyo directo del Dr. César Proetto del grupo de Teoría de Sólidos del CAB, quien tiene amplia experiencia en temas de propiedades electrónicas de semiconductores.

Este trabajo estará enmarcado dentro del proyecto global de CNEA en el área de separación isotópica por láser, con el objetivo puntual de producir fuentes de luz en el rango 8-20 μ m. En particular, el desarrollo de este tipo de fuentes de luz es considerado prioritario dentro del Plan Estratégico 2015--2025 de investigación y desarrollo de CNEA, el cual contempla la creación de una línea de estudio y desarrollo de láseres de cascada cuántica (QCL) y fotodetectores infrarrojos de pozos cuánticos (QWIP), con aplicación directa en sus áreas de interés (industria nuclear, energías renovables, nanotecnología, telecomunicaciones).

El trabajo se propone dominar nacionalmente los conocimientos fundamentales de la física presente en nanoestructuras con transiciones inter-subbanda, y el diseño, fabricación y mejora de dispositivos semiconductores que emitan eficientemente en longitudes de onda de interés para CNEA y la industria nacional en general. Si bien en partes de ese rango existen láseres comerciales, ciertas longitudes de

onda de interés para CNEA (en particular 16 μ m) no están disponibles. Por otro lado, siendo una tecnología estratégica, sería ideal que el desarrollo de los mismos sea realizado dentro del país.

¿Propone que el tema sea considerado para suplemento de beca por tema prioritario?SÍ

Justifique porqué su propuesta debe ser considerada como tema prioritario:Este trabajo estará enmarcado dentro del proyecto global de CNEA en el área de separación isotópica por láser, con el objetivo puntual de producir fuentes de luz en el rango 8-20 μ m. En particular, el desarrollo de este tipo de fuentes de luz es considerado prioritario dentro del Plan Estratégico 2015--2025 de investigación y desarrollo de CNEA, el cual contempla la creación de una línea de estudio y desarrollo de láseres de cascada cuántica (QCL) y fotodetectores infrarrojos de pozos cuánticos (QWIP), con aplicación directa en sus áreas de interés (industria nuclear, energías renovables, nanotecnología).

El trabajo se propone dominar nacionalmente los conocimientos fundamentales de la física presente en nanoestructuras con transiciones inter-subbanda, y el diseño, fabricación y mejora de dispositivos semiconductores que emitan eficientemente en longitudes de onda de interés para CNEA y la industria nacional en general. Si bien en partes de ese rango existen láseres comerciales, ciertas longitudes de onda de interés para CNEA (en particular 16 μ m) no están disponibles. Por otro lado, siendo una tecnología estratégica, sería ideal que el desarrollo de los mismos sea realizado dentro del país.

Existe ya un pedido formal por parte del Proyecto LASIE para el desarrollo de un láser de 16 μ m, relevante para la separación isotópica de uranio. El/la becario/a se insertaría dentro del grupo de trabajo que está trabajando en este desarrollo. La CNEA ya cuenta en las instalaciones de Salas Limpias del CAB con un sistema en el estado del arte de crecimiento epitaxial de dispositivos semiconductores. Los conocimientos y diseños que se generen en el marco de este trabajo serían probados en dispositivos fabricados con esta instalación única en Argentina.

Indique Gerente o Jefe de Departamento que avala su petición:Dr. Mariano Gómez Berisso, Gerente de Física, CAB