

#### UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS INSTITUTO DE FÍSICA FÍSICA TEÓRICA

#### MODELO NO LINEAL DE TRANSPORTE DEL ESPÍN

T E S I S QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA:

### JUAN CARLOS SANDOVAL SANTANA

TUTOR PRINCIPAL: DR. ALEJANDRO KUNOLD BELLO UAM-AZCAPOTZALCO MIEMBROS DEL COMITE TUTORIAL: DR. MANUEL TORRES LABANSAT INSTITUTO DE FÍSICA UNAM DR. PEDRO PEREYRA PADILLA UAM-AZCAPOTZALCO

MÉXICO, D. F. MARZO 2013



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

#### DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A mis padres y hermanos... Las huellas de las personas que cominaron juntas, nunca se olvidan.

## Agradecimientos

Por haberme dado la oportunidad de ser parte de su equipo de trabajo, agradezco al Dr. Alejandro Kunold Bello, Dr. Manuel Torres Labansat y Dr. Pedro Pereyra Padilla.

Gracias al Dr. Gerardo García Naumis, Dr. Pablo de la Mora, Dr. Moises Martínez Mares, Dr. José Luis Cardoso Cortés, Ing. María Dalia Marín Núñez, Ing. Victor Guadalupe Ibarra Sierra, por los comentarios hechos sobre este trabajo, que ayudaron al mejoramiento del mismo.

Por el apoyo, confianza, amistad y cariño que me han brindado, agradezco a Refugio Sandoval, Leonida Santana, Marco Antonio, Freddy Jahir, Gustavo y Aarón .

## Abstract

In this work, we show a theoretical study of the photoluminescence in dilute nitride GaAsN alloys semiconductors. We present a bidimentional nonlinear transport model composed of electrons, holes and deep paramagnetics centers rate equations under the influence of a continuous wave light source at room temperature. We study the rate of the photoluminescence of circularly polarized light to the photoluminescence of linearly polarized light as a function of power. We also study the photoluminescence behavior in the presence of an external magnetic field in Voigt geometry. We show that electrons, holes and spin currents play a crucial role in the recombination of charge carriers and, particularly, in the behaviour of the photoluminescence. Our model is able to reproduce qualitatively and quantitatively with good accuracy the most important features of photoluminescence experiments. We discover that the conduction band electrons spin polarization have a peculiar behavior in the presence of a magnetic field in the Voigt geometry due to the Hanle effect. The observed behavior corresponds to the superposition of two Lorentizians. These are related with the depolarization of the deep paramagnetic centers and conduction band electrons. We show that the diffusion of free electrons depletes the spin lifetime. The most important result of this work is that the spin dependent recombination ratio is considerably diminished by diffusion phenomena.

### Resumen

En este trabajo presentamos un estudio teórico de la fotoluminiscencia en semiconductores a base de GaAsN. El modelo no lineal de transporte por difusión presentado es bidimensional y está formado por ecuaciones de balance para electrones, huecos y centros paramagnéticos, ante la aplicación de una onda continua a temperatura ambiente. Estudiamos la razón entre la fotoluminiscencia bajo la influencia de luz circularmente y linealmente polarizada en función de la potencia. También estudiamos el comportamiento de la fotoluminiscencia en presencia de un campo magnético externo en configuración de Voigt. Mostramos que las corrientes de difusión de electrones, huecos y espín, juegan un papel muy importante en la recombinación de portadores de carga y en particular en la fotolumniscencia. El modelo es capaz de reproducir cualitativa y cuantitativamente los resultados experimentales. Hallamos que la fotoluminiscencia en función del campo magnético externo tiene un perfil Lorentziano en la configuración de Voigt, debido al efecto Hanle. El comportamiento de la polarización corresponde a la superposición de dos Lorentzianas que están relacionadas con la despolarización de los centros paramagnéticos y de los electrones libres. Mostramos que el tiempo de vida del espín de los electrones en la banda de conducción es modificado por los fenómenos de difusión. El más relevante de los resultados de esta tesis es que la tasa de recombinación dependiente del espín es condiserablemente disminuida por los fenómenos de difusión.

# Índice general

Abstract			
Resumen			
1.	Introducción	1	
2.	Recombinacion Dependiente del Espin2.1.Bombeo óptico2.2.Reglas de selección2.3.Trampas paramagnéticas2.4.Polarización lineal2.5.Polarización circular	<b>6</b> 7 9 11 12	
3.	<ul> <li>Modelo de transporte del espín</li> <li>3.1. Ecuaciones de balance para electrones, huecos y trampas</li> <li>3.2. Ecuaciones de balance para la polarización del espín en la BC y trampas</li></ul>	<b>15</b> 15 18 21	
4.	<ul> <li>Caso estacionario</li> <li>4.1. Estado estacionario sin corrientes</li></ul>	<b>25</b> 25 28	
5.	Resultados	33	
6.	Conclusiones	44	
Ар	Apéndices		
A.	Unidades	47	
B.	Relaciones importantes	49	

#### Bibliografía

51

# Introducción

La espintrónica o también llamada magnetoelectrónica, utiliza al espín de los electrones de modo similar como se utiliza la carga eléctrica en los dispositivos electrónicos. Desde la perspectiva de la memoria magnética la importancia de la espintrónica está asociada a la posibilidad de variar la imantación con corrientes eléctricas y la de producir corrientes polarizadas de espín como consecuencia de la imantación. Los dispositivos basados en el transporte del espín todavía presentan varios retos técnicos como la eficiente inyección de corrientes polarizadas de espín [1] y el aumento del tiempo de vida del espín de los portadores de carga, debido a la rápida despolarización de los electrones en los semiconductores magnéticos.

Uno de los métodos comúnmente utilizados para generar corrientes polarizadas, es el tránsito de electrones a través de capas magnéticas; sin embargo, la inyección a través de metales ferromagnéticos y semiconductores magnéticos diluidos [1, 2] está restringida a bajas eficiencias y bajas temperaturas por el corto tiempo de vida del espín. Otro método plausible es el bombeo óptico en semiconductores [3] pero los fotones polarizados emitidos por la muestra, son difíciles de detectar en el régimen de excitación resonante necesario para alcanzar un alto grado de polarización. Algunos otros métodos como los puntos cuánticos [4], los nanotubos de carbono [5] y materiales multiferróicos [6] están limitados por las bajas temperaturas, bajas eficiencias y campos magnéticos intensos.

Trabajos recientes han demostrado que la sustitución de pequeñas cantidades de Nitrógeno en los sitios de aniones en semiconductores como InGaAs y GaAs [7]

#### 1. INTRODUCCIÓN

modifica drásticamente las propiedades ópticas y electrónicas de estos materiales que son importantes para la aplicación de dispositivos optoelectrónicos. Se ha encontrado una reducción en la banda prohibida de energía en las aleaciones In-GaAsN y GaAsN. Para el caso de GaAsN, el N mueve al Ga a los intersticios de la red formando estados isoelectrónicos localizados, que son resonantes con la banda de conducción y están fuertemente unidos a los varios estados de esta banda [8, 9, 10, 11]. Estos estados localizados también son llamados trampas paramagnéticas o centros de recombinación. Estas trampas son responsables de la polarización de los electrones en la banda de conducción y son la causa de que ocurra la recombinación dependiente del espín (SDR, por sus siglas en inglés Spin Dependent Recombination) entre las bandas de conducción (BC) y valencia (BV), a través de las trampas paramagnéticas. Los centros paramagnéticos son el corazón de la SDR ya que los electrones de la BC que se recombinan a través de ellos deben tener una orientación del espín opuesta para no violar el principio de exclusión de Pauli[12]. El descubrimiento de la SDR se debe al primer experimento de detección óptica de resonancia magnética (ODMR por sus siglas en inglés, Optically Detection Magnetic Resonance) llevada acabo por Geschmind et al. [13, 14] en 1959. La configuración de los estados electrónicos excitados de espín de estos experimentos fueron manipulados con resonancia electrónica del espín (ESR por sus siglas en inglés, Electron Spin Resonance), lo que permitió determinar una tasa de cambio en el proceso de recombinación que se observó através de mediciones de fotoluminiscencia. El mecanismo de la SDR consiste en los siguientes pasos. Primero, los electrones de la BC son atrapados en los centros paramagnéticos formando, junto con los electrones de las trampas, pares de electrones. En los 70's Lepine et al. [15, 16] encontraron que existe una mayor probabilidad de que se formen singuletes que tripletes por lo que un electrón de la BC sólo se asocia con una trampa cuyo electrón tenga espín antiparalelo. Segundo, uno de los electrones apareados en las trampas se recombina con un hueco dejando un electrón no apareado en la trampa paramagnética. La primera parte del proceso se produce en menos tiempo que la segunda; los centros son rápidamente saturados y se polarizan en la misma dirección que los electrones de la BC, esto impide la recombinación de electrones de la banda de conducción polarizados en una dirección dada y favorece la recombinación de los electrones polarizados en la dirección contraria [17]. Esta recombinación ha sido observada en diferentes sistemas como Silicio dislocado [18, 19], Silicio amorfo[19, 20] y en centros paramagnéticos profundos en GaAs. [21, 22]. Los dispositivos de GaAs dopados con N, pueden proporcionar los medios para superar las limitaciones en el filtrado y la detección de espín polarizados a temperatura ambiente en ausencia de campos magnéticos, esto se debe a que los semiconductores nitrurados alcanzan durante mayor tiempo altos grados de polarización, a diferencia de los semiconductores magnéticos a bajas temperaturas e intensos campos magnéticos.

Después de la primera observación, hecha por Lepine *et al.* [15, 23], de los efectos relacionados con la conductividad debido a la recombinación dependiente del espín, el número de modelos cualitativos aumentó debido a la creciente evidencia experimental en varios materiales semiconductores. En 1973 Weisbuch y Lampel [24] presentaron un trabajo teórico y experimental sobre la SDR y la orientación óptica en Ga<sub>0.6</sub>Al<sub>0.4</sub>As a temperatura de 77 K. En este trabajo muestran que la orientación óptica y la SDR producen una polarización de espín de los electrones en estado estacionario de alrededor del 70 %, esto lo obtuvieron haciendo que los electrones fotogenerados y los centros de recombinación fueran polarizados por medio de bombeo óptico con luz circularmente polarizada. El modelo teórico que utilizaron esta basado en tres hipótesis:

- 1. El tiempo de vida de los electrones en la BC está completamente controlado por la recombinación a través de los centros paramagnéticos.
- 2. La recombinación sólo se lleva acabo cuando el espín del electrón en la BC es antiparalelo al espín del centro paramagnético (ver Figura 1.1).
- Los centros paramagnéticos no están polarizados en ausencia de luz, llegan a polarizarse por la interacción con los electrones fotogenerados.



**Figura 1.1:** Dinámica que se lleva acabo entre las bandas y los centros de recombinación, propuesta por Weisbuch *et al.* [24]. Los electrones generados en la banda de conducción caen en las trampas paramagnéticas, cuando sus espines son antiparalelos a los espínes de los electrones en las trampas.

A partir de las tres hipótesis mencionadas, Weisbuch *et al.* [24] escribieron las siguientes ecuaciones de balance:

$$\frac{\partial n_{\pm}}{\partial t} = g_{\pm} - \frac{n_{\pm}}{\tau_{\pm}} - \frac{(n_{\pm} - n_{\mp})}{2T_1}, \qquad (1.1)$$

donde  $n_{\pm}$  son las densidades de electrones con espín hacia arriba  $(n_{+})$  y hacia abajo  $(n_{-})$ ;  $g_{\pm}$  son las tasas de creación de electrones con espín hacia arriba  $(g_{+})$ y hacia abajo  $(g_{-})$ . Las tasas de recombinación de los electrones en los centros paramagnéticos  $\frac{1}{\tau_{\pm}}$  son proporcionales al número de centros con espín opuesto al

#### 1. INTRODUCCIÓN

electrón recombinado  $N_{\mp}$ , donde  $\tau_{\pm}$  es el tiempo de vida de los electrones con espín hacia arriba  $(\tau_{+})$  y hacia abajo  $(\tau_{-})$ . El término  $\frac{(n_{\pm}-n_{\mp})}{2T_{1}}$  es el promedio de la polarización del espín en la BC, donde  $T_{1}$  es el tiempo de relajación del espín de los electrones fotogenerados, este término de polarizacón está fuertemente relacionado con la SDR y con la polarización media que se pueda generar.

En 2005 Kalevich *et al.* [21, 25] realizaron trabajos tanto experimentales como teóricos sobre la SDR en aleaciones de GaAsN, utilizaron bombeo óptico en muestras de GaAS<sub>1-x</sub> N<sub>x</sub> (donde x=2.1, 2.7 y 3.4 % es la concentración) a temperatura ambiente. Encontraron un aumento del 40-45 % de la fotoluminiscencia al utilizar luz circularmente polarizada, este aumento esta determinado por la densidad de electrones polarizados en la BC. El aumento de la fotoluminiscencia persiste durante 2 ns, simultáneamente el total de electrones con cierta polarización de espín en la banda de conducción decae aproximádamente en 150 ps. Estos resultados son explicados por la captura dependiente del espín de los electrones de la BC en los centros paramagnéticos. Su modelo de ecuaciones es no lineal y unidiemsional.

En 2009 F. Zhao et al. [26] llevaron acabo un estudio sobre la fotoconductividad dependiente del espín en semiconductores no magnéticos a temperatura ambiente, inicidieron luz en muestras de GaAsN, encontrando un aumento del 40% en la fotoconductividad al cambiar de luz lineal por luz circularmente polarizada. En 2011 Kunold et al. [17], relizaron un estudio detallado sobre la dependencia de la fotoconductividad con el proceso de SDR en muestras de GaAsN, incluyendo en el modelo la densidad de corriente de espín propuesta por Dyakonov, considerando sólo los efectos de conrriente de arrastre. Los resultados mostrados son de gran importancia para la espintrónica, ya que demostraron que los semiconductores nitrurados tienen un gran potencial para la generación de corrientes de espín a temperatura ambiente. El desarrollo de un modelo para describir la generación de corrientes polarizadas en aleaciones de GaAsN es de vital importancia; sin embargo en los trabajos anteriores no han tomado en cuenta los fenomenos de difusión de los portadores de carga y sólo consideran el problema unidimensional. Creemos que la difusión de portadores de carga juegan un papel crucial en la creación de corrientes polarizadas y en el tiempo de vida del espín de los electrones en la BC. Por lo que en este trabajo desarrollamos un modelo bidimensional considerando las corrientes de difusión. En el capítulo 2 se explica la técnica de bombeo óptico, las reglas de selección y trampas paramagnéticas que son puntos importantes de la SDR, además se ejemplifican dos casos de la recombinación, cuando se usa: luz linealmente polarizada y circularmente polarizada. En el capítulo 3 se presenta un modelo que explica la SDR, así como la producción de polarización de electrones en semiconductores convencionales nitrurados. Este modelo es no lineal y esta compuesto por las ecuaciones de balance para los portadores de carga, las componentes de espín de los electrones y términos de corriente de difusión para electrones y huecos. En el cuarto capítulo se aplica el modelo en dos situaciones en estado estacionario, en el primero omitimos las corrientes de difusión y en el segundo incluimos dichas corrientes . En el quinto capítulo se comparan los resultados obtenidos en ausencia y presencia de corrientes de difusión.

# 2

## Recombinacion Dependiente del Espin

La SDR se da entre los electrones de la banda de conducción y las trampas paramagnéticas cuya energía se encuentra dentro de la banda prohibida del semiconductor. Los centros paramagnéticos poseen un electrón desapareado con cierta orientación del espín de tal suerte que el paso de los electrones dependerá de la orientación relativa de su proyección de espín y la del electrón ligado a los centros de recombinación. Para explicar el proceso de recombinación dependiente del espín es importante considerar cuatro puntos:

- La generación de electrones en la banda de conducción con proyección de espín establecida.
- Las reglas de selección que rigen la SDR entre las bandas de conducción y valencia.
- La función que desempeñan las trampas paramagnéticas en el proceso de recombinación dependiente del espín.
- El papel que juega la polarización de la luz en la SDR.

Una vez que se hayan atendido los cuatro puntos anteriores, a continuación ejemplificamos dos casos para la SDR, cuando se usa luz linealmente polarizada y cuando se incide luz circularmente polarizada.

### 2.1. Bombeo óptico

La técnica de bombeo óptico es una forma conveniente de estudiar la recombinación dependiente del espín en semiconductores con impurezas. En está se utiliza la luz para llevar a los electrones de un nivel bajo de energía (banda de valencia) a uno más alto (banda de conducción). La cantidad de electrones excitados con cierta proyección de espín dependerá de la frecuencia, polarización e intensidad de la luz incidente. Durante el bombeo óptico con luz linealmente polarizada se obtienen poblaciones iguales de electrones fotogenerados en la banda de conducción con espín hacia arriba y hacia abajo por lo que la polarización total de espín es nula. Por el contrario, al incidir luz circularmente polarizada a la izquierda  $\sigma^-$  sobre el semiconductor se obtiene 75 % de electrones fotogenerados en la banda de conducción con el espín orientado en la misma dirección que el eje de incidencia de la luz 25 % en la dirección contraria. Cuando se bombea con luz circularmente polarizada a la derecha  $\sigma^+$  se obtiene 75 % de la población de electrones con espín hacia arriba (21, 22, 24, 27]. Por lo tanto, en polarización circular existe una diferencia entre la densidad de electrones con espín hacia arriba y hacia abajo, tal que la polarización total del espín en la banda de conducción será diferente de cero.

#### 2.2. Reglas de selección

La diferencia entre las poblaciones de electrones con espín hacia arriba y hacia abajo obtenidas por medio de la estimulación con luz circularmente polarizada se debe a las reglas de selección particulares que rigen las transiciones permitidas entre la banda de valencia y la de conducción en el GaAs.

En la Figura (2.1) se muestra la estructura de bandas de un semiconductor a base de GaAs.  $E_g$  es el ancho de la banda de energía prohibida (gap) y  $\Delta_{SO}$  es la energía de acoplamiento de espín-órbita. La banda de conducción es doblemente degenerada ya que los electrones que se encuentran en ella pueden tener dos orientaciones diferentes del espín  $S = \frac{1}{2}$  con proyecciones  $S_z = \pm \frac{1}{2}$ . En la Figura (2.1) puede verse que la banda de valencia del GaAs se subdivide en tres bandas: la banda de huecos pesados (HP), la banda de huecos ligeros (HL) y la banda de huecos *split-off* (SO). En todos los semiconductores cúbicos centrados en las caras el punto más alto de todas las bandas de valencia, se encuentra localizado en la primera zona de Brillouin  $(\vec{k} = 0, 0, 0)$ ; en ésta existe mayor probabilidad de que se den las transiciones entre las bandas. En este punto las bandas de huecos ligeros y pesados tienen degeneración cuadruple. Esto se debe a que los huecos pesados tienen  $J = \frac{3}{2}$  con proyecciones  $J_z = \pm \frac{3}{2}$  y los huecos ligeros tienen  $J = \frac{3}{2}$  con proyecciones  $J_z = \pm \frac{3}{2}$  y los huecos ligeros tienen  $J = \frac{3}{2}$  con proyecciones  $J_z = \pm \frac{1}{2}$ .



**Figura 2.1:** Estructura de bandas del GaAs. Esta consiste en las bandas de conducción, valencia de huecos pesados (HP), huecos ligeros (HL), huecos *Split-off* (SO).

Las reglas de selección son consecuencia de la conservación del momento angular. En la absorción de un fotón polarizado circularmente éste transfiere un momento angular  $L_z = \pm 1$  al electrón con cierta proyección de espín por lo que sólo puede haber transiciones de  $\Delta L_z = \pm 1$ . En la Figura 2.2 se muestra un diagrama de las transiciones permitidas entre los estados de la banda de valencia y conducción. En está pueden verse las transiciones inducidas por luz circularmente polarizada hacia la izquierda en azul mientras que las circularmente polarizadas hacia la derecha son de color verde. La fuerza de oscilador se indica con un número al lado de cada transición. Por ejemplo, la transición de  $J_z = 3/2$  a  $S_z = 1/2$  tiene una fuerza de oscilador de 1. Esto quiere decir que la primera



transición es tres veces más probable que la segunda.

Figura 2.2: Diagrama de las reglas de selección entre la BC y la BV

Si un electrón en la banda de valencia absorbe la energía  $\hbar \nu$  de un fotón circularmente polarizado a la izquierda ( $\sigma^{-}$ ) con  $L_z = 1$ , sólo puede efectuar las siguientes transiciones:

- De los huecos ligeros J<sub>z</sub> = -<sup>1</sup>/<sub>2</sub> a la banda de conducción S<sub>z</sub> = <sup>1</sup>/<sub>2</sub>.
   De los huecos Split-off J<sub>z</sub> = -<sup>1</sup>/<sub>2</sub> a la banda de conducción S<sub>z</sub> = <sup>1</sup>/<sub>2</sub>.
   De los huecos pesados J<sub>z</sub> = -<sup>3</sup>/<sub>2</sub> a la banda de conducción S<sub>z</sub> = -<sup>1</sup>/<sub>2</sub>.

Por otra parte si un electrón absorbe la energía de un fotón  $\hbar\nu$  con polarización circular a la derecha  $\sigma^+$  con  $L_z = -1$ , solamente pueden ocurrir las transiciones siguientes:

- De los huecos ligeros J<sub>z</sub> = <sup>1</sup>/<sub>2</sub> a la banda de conducción S<sub>z</sub> = -<sup>1</sup>/<sub>2</sub>.
   De los huecos Split-off J<sub>z</sub> = <sup>1</sup>/<sub>2</sub> a la banda de conducción S<sub>z</sub> = -<sup>1</sup>/<sub>2</sub>.
   De los huecos pesados J<sub>z</sub> = <sup>3</sup>/<sub>2</sub> a la banda de conducción S<sub>z</sub> = <sup>1</sup>/<sub>2</sub>.

#### 2.3. Trampas paramagnéticas

Las trampas paramagnéticas también llamadas centros de recombinación paramagnéticos, son impurezas que se encuentran en el semiconductor. A través de la Resonancia Mangnética Opticamente Detectada (ODMR) se ha descubierto que

#### 2. RECOMBINACION DEPENDIENTE DEL ESPIN

en el Nitruro de Arseniuro de Galio (GaAsN) las trampas paramagnéticas son Ga intersticiales y no las impurezas de Nitrógeno [28]. Este mismo comportamiento se ha encontrado en diferentes aleaciones como GaNP y en AlGaNP [28, 29]

Se dice que los Ga intersticiales son centros paramagnéticos ya que cada uno tiene un electrón sin aparear en el espín dando lugar a un momento magnético que puede alinearse a un campo magnético externo. Los centros paramagnéticos son el corazón de la SDR ya que los electrones de la BC que se recombinan a través de ellos deben tener una orientación del espín opuesta para no violar el principio de exclusión de Pauli[12, 16] que prohibe a dos fermiones ocupar el mismo nivel electrónico como puede verse en la Figura (2.3).



**Figura 2.3:** Trampas paramagnéticas. Existe una mayor probabilidad de que un electrón de la BC se recombine en una trampa cuya proyección de espín sea antiparalela

Los procesos microscópicos que ocurren en el seno de una trampa no son completamente comprendidos. Se sabe que la configuración más estable es aquella en la que sólo presentan un electrón desapareado en el espín [15, 16]. En este estado las trampas pueden albergar un electrón con espín en sentido opuesto al de la trampa por un tiempo del orden de nanosegundos [7, 27]. Entonces, un modelo que explique la SDR debe contener como ingredientes al menos dos estados posibles para las trampas: en primer lugar las trampas paramagnéticas que sólo contienen un electrón y en segundo las trampas apareadas, es decir aquellas que contienen dos electrones de espín opuesto.

Las trampas son responsables de la polarización de los electrones en la banda de conducción, proceso que se da de forma dinámica. En la Figura 2.4 se presenta un esquema de la estructura de bandas del GaAsN incluyendo las trampas paramagnéticas. Las líneas de color café indican las bandas de valencia (línea inferior) y conducción (línea superior). En ausencia de una fuente luminosa la banda de valencia está llena la banda de conducción está vacía. Las cajas punteadas indican las trampas; aquellas cajas que tienen un círculo de color café son las trampas paramagnéticas donde la flecha indica la proyección de su espín y las cajas que tienen dos círculos indican las trampas apareadas. En un principio, cuando la muestra no se ilumina y se encuentra en estado de equilibrio termodinámico, todas las trampas están desapareadas y su polarización neta es cero ya que existe el mismo número



**Figura 2.4:** Estructura de bandas. En la parte superior e inferior pueden verse las bandas de conducción y de valencia. Las trampas paramagnéticas y las trampas apareadas se esquematizan en la banda prohibida.

de trampas con espín  $S_z = 1/2$  que con espín  $S_z = -1/2$ . Una vez que la muestra se le incide luz se genera cierta densidad de electrones polarizados, los electrones que caen en las trampas son aquellos con proyección de espín opuesta a la de las trampas, como se muestra en 2.5.



Figura 2.5: Recombinación de electrones en las trampas.

A fin de entender el mecanismo de la SDR a continuación se describen los casos de luz linealmente y circularmente polarizada.

#### 2.4. Polarización lineal

Al realizar un bombeo óptico con luz linealmente polarizada la población de electrones fotogenereados con espín hacia arriba es igual a la de espín hacia abajo en la banda de conducción, por lo que la densidad de espín es nula. Además se

#### 2. RECOMBINACION DEPENDIENTE DEL ESPIN

asume que la densidad de trampas paramagnéticas con espín hacia arriba es la misma que con espín hacia abajo en equilibrio termodinámico, así que la densidad de espín en las trampas tambien es nula. Para ilustrar esto en la Figura 2.6 consideramos que hay cuatro trampas paramagnéticas dos de ellas con espín hacia arriba y las sobrantes con espín hacia abajo. Al excitar cuatro electrones a la BC la mitad tiene proyección de espín hacia arriba y la otra mitad espín hacia abajo.



**Figura 2.6:** Generación de densidades de electrones y huecos, en las bandas de conducción y valencia, utilizando luz linealmente polarizada. Las densidades de espín son nulas en la BC y en las trampas.

Una vez que ha transcurrido aproximadamente 1ns los electrones de los centros apareados se recombinan a la BV debido a la presencia de los huecos, por lo que se vacían las trampas apareadas dejando libres los centros de recombinación paramagnéticos como se puede ver en la Figura 2.7. El ciclo se repite nuevamente y los fotones de la fuente luminosa excitan a los electrones a la banda de conducción dando lugar a polarizaciones nulas tanto en la BC como en las trampas paramagnéticas. Debido a que la velocidad de recombinación de la BC a las trampas es mucho menor (1ps - 150ps) que la de las trampas a la BV (1ns) hay una acumulación de electrones y de huecos en las BC y BV respectivamente de tal suerte que algunos electrones caen directamente a la BV a través de la recombinación bimolecular dando lugar a la emisión de fotones en la frecuencia correspondiente a la brecha energética del GaAsN.

#### 2.5. Polarización circular

Para el caso en el que se produce un bombeo óptico con luz circularmente polarizada el 75 % de la población de los electrones fotogenerados tienen cierta



**Figura 2.7:** Recombinación de uno de los dos electrones hospedados en las trampas hacia los huecos, utilizando luz linealmente polarizada.

proyección de espín y el 25 % tiene proyección antiparalela [21, 22, 24, 27]. Como ya hemos visto, la polarización del espín de los electrones en la BC es del 50 %. A continuación ilustramos un ejemplo para el caso en el que se estimula la muestra con luz circularmente polarizada hacia la izquierda  $\sigma^-$ .

Consideremos que dentro de la brecha existen cuatro trampas paramagnéticas de las cuales la mitad tiene espín hacia arriba y la otra espín hacia abajo, se fotogeneran 4 electrones, donde tres de ellos tienen proyección de espín hacia arriba y el otro espín hacia abajo. Los electrones fotogenerados se recombinan en las trampas llenando 2 trampas con espín hacia abajo y una trampa con espín hacia arriba como se puede ver en la Figura 2.8. El electrón restante no se puede recombinar por falta de trampas en la orientación adecuada.



**Figura 2.8:** Recombinación de electrones, en las trampas paramagnéticas bajo iluminación con luz circularmente polarizada a la izquierda.

#### 2. RECOMBINACION DEPENDIENTE DEL ESPIN

El mecanismo descrito da como resultado un electrón con espín hacia arriba en la BC y una trampa paramagnética con espín hacia arriba, así que la polarización de espín tanto en la BC como en las trampas es distinta de cero y está orientada hacia arriba. Al repetir el ciclo varias veces se aumentará el número de trampas polarizadas impidiendo así la recombinación de los electrones de la BC que se encuentran igualmente polarizados. En este caso la población de electrones y de huecos crece a mayor velocidad que con luz linealmente polarizada ya que la recombinación de electrones es bloqueada por el principio de exclusión de Pauli. En consecuencia, la intensidad de la fotoluminiscencia en este caso es mayor que en el de iluminación con polarización lineal. Adicionalmente, la polarización de los electrones en la BC es diferente de cero[21, 22, 24, 27] y puede ser incluso mayor que 50 % (ver Figura 2.9).



**Figura 2.9:** Se sigue excitando electrones con luz circularmente polarizada a la izquierda se aumenta la densidad de espín en la banda de conducción y en las trampas.

Este ciclo tiene un doble efecto de filtrado del espín: Primero, los electrones generados con espín hacia arriba son detenidos en la banda de conducción por el principio de exclusión de Pauli. Segundo, los electrones con espín hacia abajo son rápidamente removidos de la banda de conducción, debido a la alta disponibilidad de trampas con proyección de espín hacia arriba.

# 3

### Modelo de transporte del espín

En este capítulo presentamos el modelo de transporte y polarización del espín. El modelo los desarrollamos considerando, lo siguiente:

- Las ecuaciones de razón de cambio para electrones y huecos en la banda de conducción, trampas y banda de valencia.
- Las ecuaciones de razón de cambio para la polarización del espín en la banda de conducción y trampas paramagnéticas no apareadas.
- La inclusión de las densidades de corriente de los huecos, de los electrones y de espín en la banda conducción.

El estudio lo realizamos con los parámetros de una muestra de GaAsN, a la cual se le incide un haz de luz con una polarización dada que conjuntamente con las propiedades del semiconductor dan lugar a la SDR.

# **3.1.** Ecuaciones de balance para electrones, huecos y trampas.

Para deducir las ecuaciones de balance para los electrones y huecos usamos el modelo originalmente propuesto por Kalevich *et al.* [21, 25]; este modelo es un sistema de ecuaciones diferenciales no lineal dadas por:

$$\frac{\partial n_{\pm}}{\partial t} = \frac{n_{\mp} - n_{\pm}}{2\tau_s} - \gamma_e n_{\pm} N_{\mp} + G_{\pm}$$
(3.1)

#### 3. MODELO DE TRANSPORTE DEL ESPÍN

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\gamma_h p N_2 + G \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial N_{\pm}}{\partial t} = \frac{N_{\mp} - N_{\pm}}{2\tau_{sc}} - \gamma_e n_{\mp} N_{\pm} + \frac{\gamma_h p N_2}{2}$$
(3.3)

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = \gamma_e \left( n_+ N_- + n_- N_+ \right) - \gamma_h p N_2, \tag{3.4}$$

donde los subíndices + y - indican la polarización del espín de los electrones con proyección  $-\frac{1}{2}$  y  $+\frac{1}{2}$  respectivamente a lo largo del eje de la luz incidente. Entonces  $n_+$  es el número de electrones en la banda de conducción con proyección positiva y  $n_-$  es el número de electrones con proyección negativa. El número total de electrones fotogenerados en la banda de conducción es entonces  $n = n_+ + n_-$ . Similarmente para las trampas paramagnéticas,  $N_+$  es el número de trampas paramagnéticas con proyección positiva y  $N_-$  son las trampas paramagnéticos con proyección negativa, por lo que el número total de centros paramagnéticos es  $N_1 = N_+ + N_-$ . Además  $N_2$  es el número de electrones hospedados en los centros apareados, estas dos cantidades estan relacionadas con la ecuación de conservación de centros, la cual es  $N_1 + N_2 = N_t$ , donde  $N_t$  es el número total de centros de recombinación. En este trabajo se tomó  $N_t = 2 \times 10^{15} \frac{1}{cm^3}$ .

El tiempo de relajación del espín de los electrones en la BC es  $\tau_s = 130 \, ps$  y  $\tau_{sc} = 2000 \, ps$  es el tiempo de relajación del espín en los centros paramagnéticos. Estos fueron estimados por medio de experimentos de fotoluminiscencia en régimen pulsado [17, 26].  $\tau_h$  es el tiempo efectivo de vida de los huecos; el coeficiente  $\gamma_e$  representa la razón con que se recombinan los electrones de la banda de conducción a las trampas paramagnéticas,  $\gamma_h$  es la razón con que se recombinan los electrones que se encuentran en las trampas apareadas en los huecos. Tanto  $\tau_h = 35 \, ps$  y la razón entre los coeficientes  $\gamma_e/\gamma_h = 10$  son estimados de experimentos previos de fotoluminiscencia resuelta en el tiempo [7, 21], donde  $\gamma_h = 1/\tau_h N_t$ .

De la ecuación (3.1) seleccionamos la parte correspondiente al número de electrones con espín hacia arriba :

$$\frac{\partial n_{+}}{\partial t} = \frac{n_{-} - n_{+}}{2\tau_{s}} - \gamma_{e} n_{+} N_{-} + G_{+}.$$
(3.5)

La ecuación anterior representa la tasa de cambio para los electrones con proyección espín hacia arriba y la ecuación de balance para los electrones con espín hacia abajo es

$$\frac{\partial n_{-}}{\partial t} = \frac{n_{+} - n_{-}}{2\tau_{s}} - \gamma_{e} n_{-} N_{+} + G_{-}.$$
(3.6)

Sumando estas dos últimas ecuaciones tenemos que

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_+ + n_-) = -\gamma_e (n_+ N_- + n_- N_+) + G_+ + G_-$$
(3.7)

que se puede reescribir en términos del número total de electrones de la BC como

$$\frac{\partial}{\partial t}n = -\gamma_e \left(n_+ N_- + n_- N_+\right) + G,\tag{3.8}$$

donde  $G = G_{+} + G_{-}$ .

Para la ecuación de balance de las trampas paramagnéticas, dividimos la ecuación (3.3) para los subíndices + y - obtenemos

$$\frac{\partial N_{+}}{\partial t} = \frac{N_{-} - N_{+}}{2\tau_{sc}} - \gamma_{e}n_{-}N_{+} + \frac{\gamma_{h}N_{2}p}{2}$$
(3.9)

$$\frac{\partial N_{-}}{\partial t} = \frac{N_{+} - N_{-}}{2\tau_{sc}} - \gamma_{e}n_{+}N_{-} + \frac{\gamma_{h}N_{2}p}{2}.$$
(3.10)

Sumamos las dos ecuaciones anteriores y recordando que  $N_1 = N_+ + N_-$ , obtenemos la ecuación de balance para el número total de trampas no apareadas  $N_1$ 

$$\frac{\partial}{\partial t}N_1 = -(n_+N_- + n_-N_+) + \gamma_h N_2 p.$$
(3.11)

El modelo completo está formado por las ecuaciones (3.2),(3.8),(3.11),(3.4):

$$\frac{\partial}{\partial t}n = -(n_{+}N_{-} + n_{-}N_{+}) + G$$
(3.12)

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\gamma_h p N_2 + G \tag{3.13}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}N_1 = -\gamma_e \left(n_+ N_- + n_- N_+\right) + \gamma_h N_2 p \tag{3.14}$$

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = \gamma_e \left( n_+ N_- + n_- N_+ \right) - \gamma_h p N_2 \tag{3.15}$$

Sustituimos la ecuación (B.4) del apéndice A en las ecuaciones anteriores y obtenemos el siguiente sistema:

$$\frac{\partial}{\partial t}n = -\frac{\gamma_e}{2}\left(nN_1 - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_c\right) + G \tag{3.16}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\gamma_h p N_2 + G \tag{3.17}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}N_1 = -\frac{\gamma_e}{2}\left(nN_1 - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_c\right) + \gamma_h pN_2 \tag{3.18}$$

$$\frac{\partial N_2}{\partial t} = \frac{\gamma_e}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) - \gamma_h pN_2 \tag{3.19}$$

El sistema anterior de ecuaciones es el propuesto por Kalevich *et al.* [25]. El mecanismo de recombinación dependiente del espín es modelado por la tasa de recombinación  $\gamma_e \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S_c} \right)/2$  presente en el sistema de ecuaciones anteriores. A fin de entender este mecanismo analizamos para este término los dos casos extremos de luz linealmente y circularmente polarizada.

#### a) Luz linealmente polarizada.

Mientras se incide luz linealmente polarizada sobre el GaAsN la polarización de espín es cero,  $\vec{S} = 0$  por lo que la tasa de SDR

$$\frac{\gamma_e n N_1}{2},\tag{3.20}$$

de las ecuaciones de balance para n,  $N_1$  y  $N_2$ , vemos que las poblaciones de electrones en la BC y la de las trampas paramagnéticas desapareadas  $N_1$ disminuyen en la misma proporción, por el contrario el número de trampas ocupadas  $N_2$  aumenta. Esto indica que en presencia de luz linealmente polarizada hay un cierto grado de recombinación a través de las trampas paramagnéticas.

#### b) Luz circularmente polarizada.

Si por el contrario tuviéramos una polarización del 100 % a lo largo de z en el espín de los electrones en la BC y en las trampas paramagnéticas entonces  $\vec{S} = (n/2)\vec{k}$  y  $\vec{S}_c = (N_1/2)\vec{k}$ . En este caso, la taza de recombinación del SDR es

$$\left(nN_1 - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_c\right) = 0, \qquad (3.21)$$

por lo que la recombinación a través de las trampas paramagnéticas está bloqueada. En este caso se espera que la población de electrones en la BC y la de huecos en la BV aumente resultando en un incremento de la fotoluminiscencia.

# **3.2.** Ecuaciones de balance para la polarización del espín en la BC y trampas.

Consideramos la influencia de un campo magnético sobre los espines de los electrones de la BC y de los centros, dado que queremos estudiar el efecto Hanle,

que surge de la aplicación de un campo magnético en la dirección perpendicular a la de incidencia de la luz. En el caso de la BC se estudió a un electrón de espín  $\frac{1}{2}\hbar$  con interacción espín campo dada por

$$H = \vec{\omega} \cdot \vec{S} \tag{3.22}$$

donde,  $\vec{\omega} = g\mu_B\hbar\vec{B}$ , g = 0.5 es el factor giromagnético de los electrones en la BC [7, 25, 27],  $\mu_B$  es le magnetón de Bohr y  $\vec{S}$  es el vector de polarización del espín del electrón en la BC. Resolviendo la ecuación de Von Neumann para la matriz de densidad y el promedio del vector de polarización del espín, se encuentra que el Hamiltoniano anterior produce la bien conocida precesión del espín

$$\frac{\partial \vec{S}}{\partial t} = \vec{\omega} \times \vec{S} \tag{3.23}$$

La componente de polarización del espín inducida por el haz incidente de luz se encuentra a lo largo de la dirección z de propagación del haz. Así, la polarización del espín esta relacionada con los número de electrones con espín hacia arriba y hacia abajo en unidades de  $\hbar$  [25] a través de

$$S_z = \frac{(n_+ - n_-)}{2} \tag{3.24}$$

Restando la ecuación (3.6) a (3.5)

$$\frac{\partial}{\partial t}(n_{+}-n_{-}) = -\frac{n_{+}-n_{-}}{\tau_{s}} - \gamma_{e}(n_{+}N_{-}-n_{-}N_{+}) + G_{+} - G_{-}$$
(3.25)

Dividiendo entre 2 la ecuación anterior, se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{(n_+ - n_-)}{2} = -\frac{n_+ - n_-}{2\tau_s} - \frac{1}{2}\gamma_e(n_+N_- - n_-N_+) + \frac{G_+ - G_-}{2}.$$
 (3.26)

Sustituyendo la ecuación (3.24) en la ecuación anterior, se tiene

$$\frac{\partial}{\partial t}S_z = -\frac{S_z}{\tau_s} - \frac{1}{2}\gamma_e(n_-N_+ - n_+N_-) + \frac{G_+ - G_-}{2}.$$
(3.27)

Aplicando la relación (B.4), la ecuación anterior toma la forma

$$\frac{\partial}{\partial t}S_z = -\frac{S_z}{\tau_s} - \frac{1}{2}\gamma_e \left(S_z N_1 - S_{zc} n\right) + \frac{G_+ - G_-}{2}$$
(3.28)

Finalmente, introducimos la precesión del espín incluyendo la componente a lo largo de z de la ecuación (3.23) en la ecuación de balance (3.27)

$$\frac{\partial}{\partial t}S_z + \frac{S_z}{\tau_s} + \frac{1}{2}\gamma_e \left(S_z N_1 - S_{zc} n\right) + (\vec{S} \times \vec{\omega})_z = G_s, \tag{3.29}$$

#### 3. MODELO DE TRANSPORTE DEL ESPÍN

donde  $G_s = (G_+ - G_-)/2$ . Esta ecuación es similar a la de tasa de cambio para la polarización de espín de los centros paramagnéticos. La ecuación dinámica para los centros paramagnéticos es similar a la ecuación (3.23) y esta dada por:

$$\frac{\partial \vec{S_c}}{\partial t} = \vec{\Omega} \times \vec{S_c} \tag{3.30}$$

donde  $\vec{\Omega} = g_c \mu_B \hbar \vec{B}$ ,  $g_c$  es el factor giromagnético de centros paramagnéticos con un valor de  $g_c = 2$  [7, 25, 27],  $\vec{S_c}$  es el vector de espín de los centros paramagnéticos y la componente del espín a lo largo del eje z es

$$S_{zc} = \frac{(N_+ - N_-)}{2}.$$
(3.31)

Restando la ecuación (3.9) a (3.10)

$$\frac{\partial}{\partial t}(N_{+} - N_{-}) = -\frac{N_{+} - N_{-}}{\tau_{sc}} - (\gamma_{e}n_{-}N_{+} - \gamma_{e}n_{+}N_{-})$$
(3.32)

Dividiendo entre 2 la igualdad anterior, obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{(N_+ - N_-)}{2} = -\frac{N_+ - N_-}{2\tau_{sc}} - (\gamma_e n_- N_+ - \gamma_e n_+ N_-).$$
(3.33)

Tomando en cuenta que  $S_{zc} = \frac{N_+ - N_-}{2}$  y sustituyendo en la ecuación anterior, resulta

$$\frac{\partial}{\partial t}S_{zc} = -\frac{S_{zc}}{\tau_{sc}} - \frac{1}{2}\gamma_e(n_-N_+ - n_+N_-)$$
(3.34)

Sustituyendo la relación (B.4) en la ecuación anterior

$$\frac{\partial}{\partial t}S_{zc} = -\frac{S_{zc}}{\tau_{sc}} - \frac{1}{2}\gamma_e \left(S_{zc}n - S_zN_1\right).$$
(3.35)

Introduciendo la precesión del espín de los centros paramagnéticos mediante la componente z de la ecuación (3.7), da como resultado la ecuación de razón de cambio de la polarización de espín de las trampas paramagnéticas

$$\frac{\partial}{\partial t}S_{zc} + \frac{S_{zc}}{\tau_{sc}} + \frac{1}{2}\gamma_e \left(S_{zc}n - S_zN_1\right) + (\vec{S_c} \times \vec{\Omega})_z = 0.$$
(3.36)

Si consideramos al medio como isotrópico, la tasa de SDR debe ser invariante

ante rotaciones, entonces podemos escribir las ecuaciones de evolución de la polarización del espín de los electrones en la BC y de las trampas paramagnéticas como

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{S} + \frac{\vec{S}}{\tau_s} + \frac{1}{2}\gamma_e\left(\vec{S}N_1 - \vec{S}_{zc}n\right) + (\vec{S}\times\vec{\omega}) = \vec{G}_s \tag{3.37}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{S}_c + \frac{\dot{S}_c}{\tau_{sc}} + \frac{1}{2}\gamma_e \left(\vec{S}_c n - \vec{S}N_1\right) + \left(\vec{S}_c \times \vec{\Omega}\right) = 0, \qquad (3.38)$$

donde

$$\vec{G}_s = \frac{G_+ - G_-}{2}\vec{k}.$$
(3.39)

#### **3.3.** Transporte de electrones, huecos y espín

Con el fin de modelar el transporte de portadores de carga utilizamos la densidad de corriente total. Esta corriente se debe principalmente a las densidades de corriente de deriva y de difusión. La densidad de corriente de deriva es el movimiento neto de las partículas cargadas debido a un campo eléctrico, esta corriente está dada por  $\vec{J}_{deriva} = f\mu_f \vec{E}$ . La densidad de corriente de difusión es el proceso por el cual los portadores tienden a redistribuirse desde las regiones de alta concentración hasta las regiones de baja concentración. Así que el mecanismo de difusión se debe al gradiente en la concentración de portadores, dada por  $\vec{J}_{diffusion} = -D_f \vec{\nabla} f$ . Los coeficientes  $\mu_f$  y  $D_f$  son la movilidad y el coeficiente de difusión. La letra f que aparece en las ecuaciones de las corrientes de deriva y difusión; así como en la movilidad y el coeficiente de difusión, representa la densidad de portadores de carga. La densidad de corriente debida a los dos fenómenos es entonces

$$\vec{J_f} = \mu_f f \vec{E} - D_f \vec{\nabla} f. \tag{3.40}$$

En particular, las densidades de corriente total para electrones y huecos están dadas por

$$\vec{J_n} = -\mu_e n \vec{E} - D_n \vec{\nabla} n, \qquad (3.41)$$

$$\vec{J_p} = \mu_h p \vec{E} - D_p \vec{\nabla} p \tag{3.42}$$

donde  $\mu_e$  y  $\mu_h$  son las movilidades de electrones y huecos y  $D_e$  y  $D_h$  son los coeficientes de difusión de electrones y huecos respectivamente.

En el GaAsN  $\mu_e = 200 cm^2 V/s$  y  $\mu_h = 100 cm^2 V/s$  [30, 31, 32, 33] y los coeficientes de difusión pueden calcularse de la relación de Einstein-Smoluchowski

#### 3. MODELO DE TRANSPORTE DEL ESPÍN

 $D_{e,h} = \frac{\mu_{e,h}k_BT}{q}$ , donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann, T es la temperatura en la que se encuentra el semiconductor y q es la carga del electrón).

A fin de introducir los efectos de los fenómenos de transporte en las ecuaciones de balance para las concentraciones de electrones y huecos 3.16 y 3.17, incluimos en ellas los términos de flujo  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J_n}$  y  $\vec{\nabla} \cdot \vec{J_p}$  para electrones y huecos

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \frac{\gamma_e}{2} \left( nN_1 - 4S_z S_{zc} \right) = G \tag{3.43}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J_p} + \gamma_h p N_2 = G \tag{3.44}$$

En el caso del espín, también se incluyen corrientes de deriva y difusión. En la década de los 70's Dyakonov *et al.* [34, 35] propusieron la existencia de un flujo de espín causada por las multiples dispersiones ocasionadas por la corriente que fluye por un conductor. Este flujo es perpendicular a la corriente, además de dirigirse del interior hasta la periferia del conductor y está limitado a la relajación del espín.

La densidad de corriente de espín, desde el punto vista fenomenológico está descrita por un tensor  $q_{ij}$ , donde el primer índice indica la dirección del flujo mientras el segundo muestra la componente de espín que está fluyendo. Cosiderando un ejemplo, si todos los electrones con concentración n están completamente polarizados a lo largo z y se mueven con velocidad v en la dirección y, la única componente que existirá de  $q_{ij}$  será la  $q_{yz} = nv$ , ver figura 3.45. Entonces el fenómeno de transporte está relacionado al acoplamiento entre las densidades de corriente de espín y de carga, el cual puede describirse fenomenológicamente de la siguiente manera [35]:

$$q_{ij} = -\mu_e E_i S_j - D_e \frac{\partial S_j}{\partial x_i}, \qquad (3.45)$$

donde  $S_j$  es el vector de la densidad de polarización del espín. La ecuación 3.45 describe la densidad de corriente del espín que existe incluso en ausencia de interacción espín-órbita, debido a que el espín lo lleva el flujo de electrones. En 2007 Diakonov *et al.* [35] incluyeron en la densidad de corriente de espín la aportación debido al acoplamiento de espín-orbita encontrando que la acumulación de polarización de espín en los bordes de un semiconductor reduce su resistencia. De acuerdo a Dyakonov *et al.*, la densidad de corriente de espín, despreciando la interacción de espín-orbíta, está dada por (3.45). De manera similar al caso de los electrones y huecos, se pueden agregar términos de flujo de la forma

$$\nabla \cdot \vec{J_s} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \mu_e E_i S_j + D_e \frac{\partial S_j}{\partial x_i} \right), \qquad (3.46)$$



**Figura 3.1:** Caso en el que la densidad de electrones polarizada sobre el eje z se mueve en la dirección y.

donde  $\vec{J_s}$  es la densidad de corriente de espín de los electrones en la BC. Es importante notar que  $\vec{J_s}$  es un tensor ya que las tres componentes del espín pueden propagarse a lo largo de los tres ejes coordenados. Incluyendo los términos de flujo en las ecuación de balance del espín (3.37) obtenemos

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{S} + \nabla \cdot \vec{J}_s + \frac{\vec{S}}{\tau_s} + \frac{1}{2}\gamma_e \left(\vec{S}N_1 - \vec{S}_{zc}n\right) + (\vec{S} \times \vec{\omega}) = \vec{G}_s.$$
(3.47)

Finalmente, el modelo de transporte no lineal se compone de las ecuaciones de balance de electrones de la BC (3.43), huecos de la BV (3.44), trampas paramagnéticas no apareadas (3.18), trampas paramagnéticas apareadas (3.19) y de las polarizaciones del espín de los electrones de la BC (3.47) y de las trampas paramagnéticas (3.38). El sistema completo de ecuaciones se muestra a continuación

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n + \frac{\gamma}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) = G, \qquad (3.48)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}p + \vec{\nabla} \cdot \vec{J_p} + \gamma_h p N_2 = G, \qquad (3.49)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}N_1 + \frac{\gamma}{2}\left(nN_1 - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_c\right) - \gamma_h N_2 p = 0, \qquad (3.50)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}N_2 - \frac{\gamma}{2}\left(nN_1 - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_c\right) + \gamma_h N_2 p = 0, \qquad (3.51)$$

#### 3. MODELO DE TRANSPORTE DEL ESPÍN

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{S} + \nabla \cdot \vec{J}_s + \frac{\vec{S}}{\tau_s} + \frac{\gamma_e}{2}\left(\vec{S}N_1 - \vec{S}_c n\right) + (\vec{S} \times \vec{\omega}) = \vec{G}_s, \qquad (3.52)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\vec{S}_c + \frac{\vec{S}_c}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2}\left(\vec{S}_c n - \vec{S}N_1\right) + \left(\vec{S}_c \times \vec{\Omega}\right) = 0, \qquad (3.53)$$

Sumando las ecuaciones (3.48), (3.51) y restando (3.49) se puede verificar que el modelo es consistente con el principio de conservación local de la carga

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n+N_2-p\right)+\vec{\nabla}\cdot\left(J_n-J_p\right)=0.$$
(3.54)

Puede comprobarse que el número de trampas es una cantidad conservada sumando las ecuaciones (3.50) y (3.51)

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(N_1 + N_2\right) = 0. \tag{3.55}$$

# Caso estacionario

En este capítulo aplicamos el modelo desarrollado anteriormente, dado por las ecuaciones (3.48)-(3.53), utilizando el tamaño, los coeficientes de difusión y movilidades de los electrones y huecos de una muestra semiconductora a base de GaAsN a temperatura ambiente. Resolvemos el modelo considerando sólamente el caso estacionario, hacemos esto con el fin de comparar los resultados que obtengamos, con algunos resultados ya publicados sobre la fotoluminiscencia en semiconductores a base de GaAsN.

Estudiamos dos situaciones para el modelo, en la primera consideramos que no hay corrientes de electrones y huecos, en el segundo tomamos en cuenta sólamente las corrientes de difusión. Los resultados obtenidos del primer caso son después utilizados como semilla para la segunda parte del cálculo. Después de imponer las condiciones sobre el trasporte de carga, para cada caso resolvemos numéricamente el sistema acoplado de ecuaciones resultante.

#### 4.1. Estado estacionario sin corrientes

En estado estacionario las derivadas temporales de las variables relevantes que se encuentran en las ecuaciones diferenciales (3.48) a (3.53) son cero. Además, en este primer cálculo, despreciamos los términos correspondientes a las corrientes de difusión y de deriva, por lo que el sistema dado por las ecuaciones (3.48) a (3.53), toma la forma:

$$\frac{\gamma}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) = G \,, \tag{4.1}$$

$$\gamma_h p N_2 = G \tag{4.2}$$

$$\frac{\gamma}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) - \gamma_h N_2 p = 0, \qquad (4.3)$$

$$-\frac{\gamma}{2}\left(nN_1 - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_c\right) + \gamma_h N_2 p = 0, \qquad (4.4)$$

$$\frac{\vec{S}}{\tau_s} + \frac{1}{2}\gamma_e \left(\vec{S}N_1 - \vec{S}_c n\right) + \left(\vec{S} \times \vec{\omega}\right) = \vec{G}_s \,, \tag{4.5}$$

$$\frac{\vec{S}_c}{\tau_{sc}} + \frac{1}{2}\gamma_e \left(\vec{S}_c n - \vec{S}N_1\right) + \left(\vec{S}_c \times \vec{\Omega}\right) = 0.$$

$$(4.6)$$

Para resolver el sistema de ecuaciones consideramos que las variables  $n, p, \vec{S}, \vec{S}_c$ ,  $N_1$  y  $N_2$  sólo dependen de las coordenadas x y y. Dado que el problema es bidimensional, discretizamos en puntos el área de la muestra que para este trabajo tiene forma circular. Para la selección del conjunto de puntos discretos (malla de puntos) utilizamos el método de Delaunay-Voronoi [36]. Para la generación de mallas este método alcanza la máxima regularidad de ángulos en los triángulos generados, por lo que garantiza una triangulación óptima. Para cada vértice resolvemos el sistema de ecuaciones (4.1-(4.6)).

Cosideramos que el haz incidente es de la forma:

$$G(x,y) = \frac{P}{h\nu} \frac{1}{2\pi\sigma_y \sigma_x} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu_x}{\sigma_x}\right)^2 + \left(\frac{y-\mu_y}{\sigma_y}\right)^2},$$
(4.7)

donde P es la potencia del haz y  $\nu = \frac{c}{\lambda} \operatorname{con} \lambda = 840$  nm; la dirección de propagación es  $\hat{z}$ , por lo que el promedio de polarización de espín debido a los electrones fotogenerados en la BC es  $\vec{G_s} = \alpha \beta G(x, y) \hat{z}$  donde  $\alpha$  es el porcentaje de polarización del haz y  $\beta$  es la polarización, para luz linealmente polarizada  $\beta = 0$  y para luz polarizada circularmente a la izquierda o derecha  $\beta = \pm 0.5$ .

Resolvemos el sistema en un punto para después hacerlo en todos los puntos. Notamos que sólo las ecuaciones (4.2)-(4.4) dependen de  $N_2$ , así que buscamos la manera de escribir a  $N_2$  en función de n para reducir el sistema, para conseguir esto utilizamos la ecuación de conservación de la carga ( $p - n - N_2 = 0$ ). De esta manera llegamos a una ecuación cuadrática de  $N_2$  de la cual tomamos sólamente la solución positiva debido a que el número de electrones hospedados en las trampas debe ser positivo. Así  $N_2$  toma la forma

$$N_{2} = \frac{1}{2} \left[ -n + \sqrt{n^{2} + 4\frac{G}{\gamma_{h}}} \right].$$
 (4.8)

Sustituimos la ecuación anterior en la ecuación de conservación de trampas  $(N_1 + N_2 = N_t)$ , de esta manera obtenemos una ecuación que nos liga el número de centros paramagnéticos  $N_1$  con: el número de electrones, la intensidad del haz y la tasa de recombinación de electrón-hueco de la siguiente forma

$$N_1 = N_t - \frac{1}{2} \left[ -n + \sqrt{n^2 + 4\frac{G}{\gamma_h}} \right].$$
(4.9)

El sistema de ecuaciones se reduce a determinar n, p y las componentes de polarización del espín de los centros y de los electrones en la BC. Para encontrar los valores de las componentes de la polarización, desarollamos las ecuaciones de balance de polarización de espín (4.5), (4.6) en las direcciones  $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ , de esta manera obtenemos el siguiente sistema

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\tau_s} + \frac{\gamma_e}{2}N_1 & \omega_z & -\omega_y & -\frac{\gamma_e}{2}n & 0 & 0\\ -\omega_z & \frac{1}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2}N_1 & \omega_x & 0 & -\frac{\gamma_e}{2}n & 0\\ \omega_y & -\omega_x & \frac{1}{\tau_s} + \frac{\gamma_e}{2}N_1 & 0 & 0 & -\frac{\gamma_e}{2}n\\ -\frac{\gamma_e}{2}N_1 & 0 & 0 & \frac{1}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2}n & \Omega_z & -\Omega_y\\ 0 & -\frac{\gamma_e}{2}N_1 & 0 & -\Omega_z & \frac{1}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2}n & \Omega_x\\ 0 & 0 & -\frac{\gamma_e}{2}N_1 & \Omega_y & -\Omega_x & \frac{1}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2}n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_x\\ S_y\\ S_z\\ S_{cx}\\ S_{cy}\\ S_{cz}\\ S_{cz}$$

El sistema anterior está escrito en la forma de un sistema lineal  $\mathbf{M} \mathbf{X} = \mathbf{B}$ , en el que consideramos como incógnitas las componentes de polarización de espín en la BC y en los centros. Encontramos que el determinante de la matriz  $\mathbf{M}$  es diferente de cero, por lo que el sistema lineal de ecuaciones tiene solución dada por  $\mathbf{B} = \mathbf{X} \mathbf{M}^{-1}$ . Resolvemos el sistema de ecuaciones usando el método iterativo de Gauss-Seidel y sustituimos en todas las componentes de polarización la ecuación (4.9), quedando cada componente de polarización en función de *n*.

Sustituimos las componentes de la polarización y la ecuación de  $N_1(n)$  (4.9) en la ecuación  $\frac{\gamma}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) = G$ . Esta sustitución nos genera una función de n de la cual determinamos sus raices y sólamente tomamos en cuenta la raíz real y positiva que a su vez produce valores positivos de  $N_1$  y  $N_2$ . Sustituimos esta raiz en las componentes de polarización para obtener los valores adecuados de las componentes  $S_i$ ,  $S_{ic}$  (donde  $i = \hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ ). Sólo quedan por determinar los valores de p,  $N_1$  y  $N_2$ , para encontrarlos reemplazamos el valor de n en la ecuación (4.9) y así obtenemos el valor de  $N_1$ . A continuación sustituimos el valor de  $N_1$  en la ecuación de la conservación de las trampas  $(N_1 + N_2 = N_t)$  para encontrar  $N_2$ . Con los valores de n y  $N_2$  calculamos el número de huecos p con la ayuda de la ecuación de conservación de la carga  $(p - n - N_2 = 0)$ . Por último, calculamos el valor de la fotoluminiscencia por medio de la razón de recombinación bimolecular  $I = \gamma_h \int pn \, dV$  y la polarización de los electrones de la BC (P). Calculamos I y P para los casos que tenemos luz linealmente polarizada y luz circularmente polarizada.

#### 4.2. Estado estacionario considerando corrientes

Nuevamente despreciamos las derivadas temporales de las ecuaciones 3.48 a 3.53 y consideramos que sólo hay corrientes de difusión para los electrones, los huecos y la polarización de espín en la BC. Obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones

$$-D_e \nabla^2 n + \frac{\gamma}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) = G, \qquad (4.10)$$

$$-D_h \nabla^2 p + \gamma_h p N_2 = G, \qquad (4.11)$$

$$\frac{\gamma}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) = \gamma_h N_2 p \,, \tag{4.12}$$

$$\frac{\gamma}{2} \left( nN_1 - 4\vec{S} \cdot \vec{S}_c \right) = \gamma_h N_2 p \,, \tag{4.13}$$

$$-D_e \nabla^2 \vec{S} + \frac{\vec{S}}{\tau_s} + \frac{\gamma_e}{2} \left( \vec{S} N_1 - \vec{S}_c n \right) + (\vec{S} \times \vec{\omega}) = \vec{G}_s \,, \tag{4.14}$$

$$\frac{\vec{S}_c}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2} \left( \vec{S}_c n - \vec{S} N_1 \right) + \left( \vec{S}_c \times \vec{\Omega} \right) = 0.$$

$$(4.15)$$

Observamos que las ecuaciones (4.12) y (4.13) estan intimamente ligadas al el estado estacionario ya que nos dicen que el número de electrones que se recombinan en los centros paramagnéticos es igual al número de electrones que se recombinan con los huecos. Por esto en estado estacionario hay una cascada de electrones recombinandose entre la BC y la BV, donde el flujo de la cascada es constante.

Las variable del sistema anterior así como el sistema (3.48)-(3.53) para el caso en el que no hay corrientes, sólo dependen de la posición en el plano x - y y son constantes en z. Dado que el problema es bidimensional, usamos nuevamente el metodo de Delauney-Voronoi para la generación de la malla. Cosideramos que el haz incidente tiene un perfil gaussiano dado por (4.7) y así mismo el promedio de polarización debido a los electrones fotogenerados en la BC esta dado por  $\vec{G}_s = \alpha \beta G$ , donde los parametros  $\beta$  y  $\alpha$  dependeran de la polarización y el grado de polarización del haz incidente.

Vemos que el sistema acoplado de ecuaciones diferenciales parciales (4.10)-(4.14) no es lineal, por lo que buscamos nuevas variables cuyas ecuaciones diferenciales sean más simples. Para esto reemplazamos las variables n, p por u, w, que estan dadas por

$$u = \frac{\mu_h p - \mu_e n}{\sqrt{\mu_h \mu_e}} \qquad w = \frac{\mu_h p + \mu_e n}{\sqrt{\mu_h \mu_e}}.$$
 (4.16)

La transformación inversa es

$$p = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}} (w+u) \qquad n = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} (w-u) .$$
 (4.17)

Con la ayuda de (4.12) podemos escribir la ecuación (4.10) de una manera más sencilla, ya que el número de electrones que se recombinan entre la BC y los centros es igual a la cantidad de electrones que se recombinan entre los centros y los huecos. Para esto sustituimos la ecuación (4.12) en las ecuaciones (4.10) y (4.11), las cuales toman la forma

$$-D_e \nabla^2 n + \gamma_h p N_2 = G, \qquad (4.18)$$

$$-D_h \nabla^2 p + \gamma_h p N_2 = G. \qquad (4.19)$$

Utilizamos la relación de Einstein–Smoluchowski  $D_{h,e} = \mu_{h,e} \frac{k_B T}{q}$  y obtenemos

$$-\frac{k_B T}{q} \nabla^2 \left(\mu_h p - \mu_e n\right) = 0,$$
 (4.20)

$$-\frac{k_B T}{q} \nabla^2 \left(\mu_h p + \mu_e n\right) + 2\gamma_h N_2 p = 2G.$$
(4.21)

En términos de u y w las ecuaciones anteriores toman la forma

$$-\frac{k_B T}{q} \nabla^2 w + \frac{\gamma_h}{\mu_h} N_2 \left(w + u\right) = \frac{2}{\sqrt{\mu_h \mu_e}} G, \qquad (4.22)$$

$$-\frac{k_B T}{q} \nabla^2 u = 0.$$
(4.23)

Integramos la ecuación (4.23) sobre el volumen y aplicamos el teorema de la divergencia obteniendo que

$$\oint_{S} \vec{\nabla} u \cdot \hat{n} \, da = 0 \,. \tag{4.24}$$

De la ecuacion(4.24) se infiere inmediatamente que u es constante sobre la superficie S. Así sólo debemos resolver la ecuación diferencial (4.22) y la variable u es sólo utilizada como una condición de frontera. Mostramos que es más práctico utilizar las variables u y w que p y n. Sólo falta escribir las ecuaciones de polarización para la BC y los centros en función de u y w. Para esto desarrollamos los vectores de polarización de espín  $\vec{S}$  y  $\vec{S_c}$  en sus tres componentes y hacemos los pertinentes cambios de variables quedando el sistema (4.10)-(4.15) como

$$u = cte\,,\tag{4.25}$$

$$-\frac{k_B T}{q} \nabla^2 w + \frac{\gamma_h}{\mu_h} N_2 \left(w + u\right) = \frac{2}{\sqrt{\mu_h \mu_e}} G, \qquad (4.26)$$

$$-D_e \nabla^2 S_z + \frac{S_z}{\tau_s} + \frac{\gamma_e}{2} \left( S_z N_1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} (w - u) S_{cz} \right) + (S_x \omega_y - S_y \omega_x) = G_{sz}, \qquad (4.27)$$

$$-D_e \nabla^2 S_x + \frac{S_x}{\tau_s} + \frac{\gamma_e}{2} \left( S_x N_1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} (w - u) S_{cx} \right) + (S_y \omega_z - S_z \omega_y) = 0, \qquad (4.28)$$

$$-D_e \nabla^2 S_y + \frac{S_y}{\tau_s} + \frac{\gamma_e}{2} \left( S_y N_1 - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} (w - u) S_{cy} \right)$$
(4.29)  
$$- (S_x \omega_z - S_z \omega_x) = 0,$$

$$\frac{S_{cz}}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} \left( w - u \right) S_{cz} - S_z N_1 \right) + \left( S_{cx} \Omega_y - S_{cy} \Omega_x \right) = 0, \quad (4.30)$$

$$\frac{S_{cx}}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} \left( w - u \right) S_{cx} - S_x N_1 \right) + \left( S_{cy} \Omega_z - S_{cz} \Omega_y \right) = 0, \quad (4.31)$$

$$\frac{S_{cy}}{\tau_{sc}} + \frac{\gamma_e}{2} \left( \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} \left( w - u \right) S_{cy} - S_y N_1 \right) - \left( S_{cx} \Omega_z - S_{cz} \Omega_x \right) = 0, \quad (4.32)$$

$$\frac{\gamma}{2}\left(nN_1 - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_c\right) = \gamma_h N_2 p\,. \tag{4.33}$$

El sistema de ecuaciones anterior está formado por cuatro ecuaciones diferenciales parciales acopladas, seis ecuaciones algebraicas acopladas y una constante por determinar. Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales determinamos las condiciones de frontera tipo Dirichlet y Neumann para cada ecuación. Utilizamos la siguiente relación para determinar la condición Dirichlet de la ecuación diferencial de w

$$\int_{V} \left[ f\left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}\right) + \vec{A} \cdot \vec{\nabla} f \right] \, dV = \oint_{S} f \vec{A} \cdot \hat{n} \, da, \tag{4.34}$$

en la que se sustituimos f = n y  $\vec{A} = \rho \hat{\rho}$ , dandos como resultado

$$\int_{V} \left[ n \left( \vec{\nabla} \cdot \rho \hat{\rho} \right) + \rho \hat{\rho} \cdot \vec{\nabla} n \right] \, dV = \oint_{S} n \rho \hat{\rho} \cdot \hat{n} \, da. \tag{4.35}$$

Haciendo las pertinentes operaciones obtenemos que

$$\iint \left[2n + \rho \frac{\partial n}{\partial \rho}\right] dS \, dz = \int_{S} n\rho \, \rho \, dz \, d\varphi \tag{4.36}$$

e integrando sobre la variable z vemos que

$$\int \left[2n + \rho \frac{\partial n}{\partial \rho}\right] dS = n_f R^2 2\pi \,. \tag{4.37}$$

Despejamos a la densidad de electrones  $n_f$  en la frontera y de esa manera obtenemos

$$n_f = \frac{1}{2\pi R^2} \int \left[ 2n + \rho \frac{\partial n}{\partial \rho} \right] dS , \qquad (4.38)$$

donde  $n_f$  es constante en toda la frontera. Dado este valor obtenemos a  $w_f$  de la ecuación (4.16), consiguientemente la condición Dirichlet para (4.26) queda como:

$$w_f = \frac{u}{\sqrt{\mu_e \mu_h}} + \frac{n_f}{\sqrt{\mu_e \mu_h}} (\mu_e - \mu_h).$$
(4.39)

Asumimos que las condiciones tipo Dirichlet para las componentes de la polarización de espín son  $S_x = S_y = S_z = 0$  suponiendo que el haz de luz incidente está principalmente localizado dentro de la muestra.

Para las condiciones tipo Neumann planteamos  $\vec{\nabla}w = \vec{\nabla}S_x = \vec{\nabla}S_y = \vec{\nabla}S_z = 0$ , por lo tanto la densidad de corriente de huecos y electrones en la frontera es cero así como el flujo de la densidad de espín, por lo que no hay electrones polarizados ni huecos saliendo de la muestra.

Resolvemos el sistema formado por las ecuaciones (4.25)-(4.33) utilizando un método iterativo que consta de los siguientes pasos:

- 1 Calculamos el valor de u para el caso en el que no hay densidades de corriente, para esto despejamos a u de la ecuación de la conservación de la carga global  $\left(\int \left(\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu_e}{\mu_h}} \left(w+u\right) - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\mu_h}{\mu_e}} \left(w-u\right) - N_2\right) dV = 0$ .
- 2 Con los valores de  $N_2$  y de u del caso en el que no hay corrientes resolvemos la ecuación (4.26) por el metodo de diferencias finitas.
- 3 Usando los valores de u, w y  $N_2$  calculados anteriormente y los valores de las componentes de espín para los centros del caso en el que no hay corrientes, resolvemos las ecuaciones diferenciales para la polarización de espín de los electrones de la BC. En este caso las componentes de polarización del espín son las variables de las ecuaciones diferenciales (4.27)-(4.29) mientras que u, w y  $N_2$  son consideradas constantes. Resolvemos este sistema utilizando el método de diferencias finitas.
- 4 A continuación utilizamos el método de Gauss-Seidel para resolver el sistema ecuaciones algebráicas formado por (4.30)-(4.32).
- 5 Despejamos  $N_2$  de la ecuación (4.33) y sustituimos los valores de  $p, n, \vec{S}, \vec{S_c}$ .
- 6 Apartir de  $N_2$  calculamos el valor de  $N_1$  con la ecuación (4.13).
- 7 Utilizamos la ecuación de conservación de la carga global para calcular el valor de u, utilizando los valores de w y  $N_2$  obtenidos anteriormente.
- 8 Después de la primera vuelta repetimos los puntos del 2 al 7 hasta que los valores de las variables converjan con una prescición de aproximadamente 0.01 %. Finalmente con los valores correctos de *p* y *n*, calculamos el valor de la fotoluminiscencia que esta dada por la tasa de recombinación bimolecular *I* = ∫ *pn dV* y la polarización de los electrones en la BC. Aplicamos este método en presencia de un haz linealmente y circularmente polarizado hacia la izquierda.

# **5** Resultados

**E** n este capítulo estudiamos una muestra de GaAsN en el régimen estacionario a través del modelo presentado en el capítulo cuatro. En particular nos interesan el comportamiento de la polarización y la fotoluminiscencia como función de la potencia del laser incidente y el campo magnético en la configuración de Voigt. Los resultados obtenidos son cualitativamente y cuantitativamente contrastados con resultados experimentales.

Hemos comparado los resultados en ausencia y en presencia de corrientes de difusión a fin de estimar la relevancia de la difusión de portadores de carga en la SDR. Se observa que la difusión tiene gran impacto en los resultados obtenidos.

Como ejemplo, aplicamos el modelo a una muestra de GaAsN con los parámetros siguientes: un diámetro de  $\phi = 150 \,\mu\text{m}$  y un espesor de z = 50nm. El haz tiene una sección transversal circular con un diámetro de  $\phi = 100 \,\mu\text{m}$  y un grado de polarización  $\beta = 55 \,\%$ .

Los parámetros relevantes a calcular son principalmente la intensidad de la radiación fotoluminiscente dada por la tasa de recombinación bimolecular

$$I = \gamma_b \int np \, dV,\tag{5.1}$$

la polarización de espín de los electrones de la BC

$$P = \frac{2\int S_z \, dV}{\int n \, dV} \,, \tag{5.2}$$

#### **5. RESULTADOS**

y la razón de SDR está dada por

$$SDR_r = \frac{I_{\sigma_-}}{I_{\sigma_x}},\tag{5.3}$$

donde  $I_{\sigma_{-}}$  y  $I_{\sigma_{x}}$  son la intensidades de la fotoluminiscencia en presencia de luz circularmente polarizada hacia la izquierda y linealmente polarizada respectivamente. Dado que bajo la incidencia de luz circularmente polarizada los electrones fotogenerados tienen polarización del espín, se espera que la intensidad de la fotoluminiscencia en estas condiciones sea mayor que bajo luz linealmente polarizada. De esta forma  $SDR_{r}$  es un parámetro apropiado para medir la presencia del fenómeno de la SDR. Entonces, cuando las trampas se polarizan y bloquean la recombinación de electrones a través de ellas la población de electrones en la BC aumenta incrementando también la intensidad de la fotoluminiscencia. En este caso  $SDR_{r} > 1$ . Por el contrario cuando no hay SDR,  $SDR_{r} = 1$ .



**Figura 5.1:**  $SDR_r$  como función de la potencia del láser incidente en ausencia de campo magnético. La curva azul muestra el caso en el que consideramos las densidades de corriente de difusión para electrones, huecos y espín y la curva roja muestra el caso donde no hay corrientes de difusión.

#### 5. RESULTADOS

Comenzamos nuestra discusión con el comportamiento de la  $SDR_r$  como función de la potencia del laser. En la Figura 5.1 mostramos dos curvas: la curva roja representa al caso en el que hay ausencia de corrientes de difusión mientras que la curva de color azul representa a la  $SDR_r$  en presencia de corrientes de difusión. Notamos que la  $SDR_r$  para ambos casos aumenta conforme incrementa la potencia del laser, hasta una potencia que denominamos potencia crítica de razón de fotoluminiscencia ( $P_{cf}$ ), donde la  $SDR_r$  es máxima. Para el caso en el que si hay difusión se tiene que  $P_{cf} = 182$ mW con una  $SDR_r = 1.433$  y para el caso en el que no hay difusión,  $P_{cf} = 38.5$ mW que proporciona una  $SDR_r = 2.737$ . Para potencias mayores a  $P_{cf}$  la  $SDR_r$  disminuye y converge a 1.5 para la curva roja y a 1.4 para la curva azul. La curva azul concuerda con los trabajos de Kalevich *et al.* [21, 25], en los que muestran que hay un aumento de la fotoluminiscencia al incidiar luz circularmente polarizada en aleaciones de GaAsN a temperatura ambiente.

El aumento de la  $SDR_r$  se debe a que cierta cantidad de los electrones fotogenerados con luz circularmente polarizada a la izquierda con espín hacia arriba son bloqueados en la BC por las trampas que tienen la misma polarización en el espín. De esta manera se produce un incremento en la densidad de electrones en la BC y de huecos en la BV aumentando entonces la tasa de recombinación bimolecular y consecuentemente la  $SDR_r$ . Vemos que la  $SDR_r$  sigue aumentando hasta una potencia  $P_{cf}$  tal que el valor de la  $SDR_r$  es máxima. Para potencias mayores a  $P_{cf}$  la curva empieza a decaer. Esto se debe a que existe la competencia entre dos mecanismos: por un lado al aumentar la potencia se generan más electrones polarizados en el espín que, a través de la SDR, bloquean las trampas paramagnéticas aumentando así la intensidad de la fotoluminiscencia. Por otro lado al alcanzar la potencia  $P_{cf}$  el número de electrones con polarización hacia abajo es muy grande, es decir, es comparable al número total de trampas, y por lo tanto encontrarán una alta disponibilidad de centros con la orientación que les permita recombinarse.

Por último notamos de la Figura (5.1) que la curva de  $SDR_r$  con corrientes de difusión es menor a la curva de  $SDR_r$  sin corrientes. Este comportamiento se debe a la difusión de los electrones. Los electrones se difunden de los lugares con mayor densidad a los sitios donde existe menor densidad de electrones. Así que los electrones se trasladan a lugares donde no hay electrones. En estos lugares los electrones tienen una alta disponibilidad de trampas paramagnéticas no apareadas en las que pueden recombinarse, provocando que la densidad de electrones y la  $SDR_r$  disminuyan.

Ahora nos enfocamos a estudiar el comportamiento de la  $SDR_r$  como función de un campo magnético externo en configuración de Voigt (perpendicular al eje de luz incidente).



Curva de Hanle

**Figura 5.2:** *Razon de Fotoluminiscencia I Vs Campo magnético B [T], la curva azul muestra el caso en el que consideramos efectos de difusión y la curva roja muestra el caso donde no hay difusión.* 

En la Figura 5.2 mostramos dos curvas: la curva roja corresponde al caso en el que no hay corrientes de difusión y la curva azúl muestra el caso en el que sí hay efectos de difusión. Notamos que la  $SDR_r$  para ambos casos disminuye mientras aumenta la intensidad del campo magnético. Vemos que la forma que

#### 5. RESULTADOS

toma la  $SDR_r$  es la de una Lorentziana.

El decaimiento de la  $SDR_r$  y el perfil Lorentizano que adoptan las curvas se debe al efecto Hanle, la despolarización de los electrones debido a la preseción del espín alrededor del campo magnético. El campo magnético externo inducido es perpendicular a la dirección del haz, consecuentemente también es perpendicular a la dirección en la que estan polarizados los electrones de la BC y el espín de los centros paramagnéticos. Así, el campo induce una precesión del espín de los electrones y de los centros. Esta precesión provoca un aumento de la recombinación entre la BC y las trampas paramagnéticas. Así mismo aumenta la recombinación entre los electrones apareados y los huecos, razón por la cual la densidad de electrones en la BC y huecos en la BV decrecen y consecuentemente la  $SDR_r$  disminuye. Por consiguiente mientras mayor sea el campo magnético más rápido decae la  $SDR_r$ . Este comportamiento concuerda con los resultados obtenidos por Invchenko *et al.* [37]. Notamos nuevamente que la  $SDR_r$  está sobrestimada si no se consideran los efectos de la difusión.

La curva de la Figura (5.2) sigue el comportamiento de la Lorentziana

$$SDR_r = \frac{SDR_{r0}}{1 + \left(\frac{B}{B_{1/2}}\right)^2},$$
 (5.4)

donde el ancho  $B_{1/2}$  esta relacionado al tiempo de vida del espín  $T_s$  de los electrones en la banda de conducción [17, 38] a través de la relación.

$$B_{1/2} = \frac{\hbar}{g\mu_B T_s}.$$
(5.5)

El efecto Hanle en la muestra de GaAsN, se debe a la despolarización de los electrones de la BC y de los centros paramagnéticos, consecuencia de la presencia de un campo magnético externo. La curva de Hanle debido a la despolarización es muy importante. Esta curva nos proporciona el tiempo de vida del espín de los electrones y de los centros paramagnéticos. Esperamos que la despolarización se manifieste como la superposición de dos Lorentzianas dada por la siguiente forma:

$$P = \frac{P_{BC}}{1 + (\frac{B}{B_{1/2}})^2} + \frac{P_C}{1 + (\frac{B}{B_{1/2}^c})^2},$$
(5.6)

donde  $P_{BC}$  es la polarización de los electrones de la BC,  $P_C$  es la polarización de los centros paramagnéticos y

$$B_{1/2}^c = \frac{\hbar}{g_c \mu_B T_{sc}} \,, \tag{5.7}$$

es el ancho de la Lorentziana de los centros paramagnéticos y  $T_{sc}$  es el tiempo de vida del espín de las trampas [17, 38].



A continuación mostramos la curva de Hanle para la polarización, para esto mantenemos fija la potencia del haz incidente en P=91 mWatt.

**Figura 5.3:** Polarización Vs Campo magnético B [T]. La curva roja corresponde a la situación en la que no hay corrientes de difusión y la curva azúl muestra el caso en el que si hay corrientes.

#### 5. RESULTADOS

En la Figura (5.3), la curva roja muestra la polarización para el caso que no hay corrientes de difusión y la curva azúl corresponde al caso en el que se consideraron las corrientes de difusión. Notamos que para los dos casos la polarización es máxima en B = 0. Conforme aumente el campo magnético la polarización disminuye hasta que se vuelve nula la polarización. Observamos que la forma en que disminuye la polarización tiene una forma muy particular. Primeramente disminuye como una Lorentziana con cierto ancho hasta  $B = \pm 0.5$  como se muestra en el Zoom de la Figura (5.3). Para campos magnéticos mayores a  $B = \pm 0.5$  la polarización disminuye como otra Lorentziana con un ancho diferente de la primera Lorentziana hasta que la polarización se vuelve nula.

Al no considerar corrientes de difusión se sobre estima el valor de la polarización. La disminución que presenta la polarización mientras aumenta el campo magnético, se debe a la precesión del espín de los electrones y de los centros por la presencia del campo magnético. Esta precesión provoca que tanto los electrones como los centros paramagnéticos se despolaricen. Así que las dos Lorentzianas superpuestas que aparecen a la Figura (5.3), se deben a la despolarización de los electrones de la BC y de los centros. Ajustamos la curva de Hanle de color azúl utilizando la ecuación (5.6). Encontramos que el tiempo de vida del espín de los electrones en la BC es de  $t_s = 721.31 \, ps$  y el tiempo de vida del espín de las trampas paramagnéticas es de  $t_{sc} = 2.66 \, ps$ . Estos resultados son fisicamente posibles ya que se ha encontrado que el tiempo máximo de vida del espín de los electrones en la BC es de  $t_s = 2000 \, ps$  y el tiempo máximo de vida del espín de los electrones en la

Para finalizar nuestro análisis graficamos varias curvas de polarización para diferentes potencias. De esta manera mostramos cuál es compartamiento de la polarización para diferentes valores de la potencia. Además calculamos los tiempos de vida del espín de los electrones en la BC y de los centros. De esta forma mostraremos cual es el comportamiento del tiempo de vida del espín en función de la potencia del haz.

En la Figura (5.4), presentamos diferentes curvas de polarización para diferentes valores de la potencia del haz incidente. Observamos que mientras mayor sea la potencia del haz, el ancho medio de la Lorentziana superior aumenta. Por el contrario a medida que la intensidad del haz aumenta el ancho medio de la Lorentziana. de inferior disminuye. El comportamiento de los anchos medios de las Lorentzianas tendra una cosecuencia en el tiempo de vida del espín. Mostramos el comportamiento del tiempo de vidad del espín a continuación.



Figura 5.4: Polarización Vs Campo magnético B [T]. Para diferentes valores de la potencia del haz incidente.

En la Figura (5.5), mostramos el comportamiento del tiempo de vidad del espín de los centros y de los electrones en la BC en función de la potencia del haz incidente. En la Figura (5.5a), presentamos el comportamiento del tiempo de vida del espín de los electrones en la BC. La linea verde es el tiempo de vida para la situación en el que se consideraron corrientes de difusión. La linea roja es el tiempo de vida del espin para el caso en el que no hay corrientes. A medida que aumenta la potencia del laser, el tiempo de vida del espín incrementa. El aumento del tiempo de vida del espín, se nota en la disminución del ancho medio de las Lorentzianas inferioes que se muestran en la Figura (5.4). Esto quiere decir que a medida que aumenta la intensidad del haz incidente, incrementa el tiempo de vida del espín de los electrones



**Figura 5.5:** Tiempo de vida del espín de los centros paramagnéticos Figura (5.5a) y de los electrones en la BC Figura (5.5b). Mostramos el comportamiento del tiempo de vida del espín de los electrones en la BC y de los centros paramagnéticos, en función de la potencia del haz incidente. Comparamos el comportamiento del tiempo para el caso en el que si hay corrientes de difusión con el caso en el que no se consideraron.

de la BC, así que disminuye la despolarización de electrones. Tambien, notamos que el comportamiento de las dos curvas es diferente. Primero observamos que el valor del tiempo de vida del espín es mayor para el caso en el que no hay corrientes de difusión que para el que si se consideraron. Esta disminución del tiempo de vida se debe justamente a la difusión de los electrones polarizados en la BC, los electrones polarizados se desplazan a los lugares donde tienen una alta disponibilidad de recombinarse con alguna trampa, provocando que la densidad de electrones polarizados disminuya. Segundo, vemos que para el caso en el que no hay corrientes el comportamiento del tiempo de vida del espín es convexo a diferencia del caso en el que si hay corrientes de difusión el cual tiene un comportamiento concavo.

En la Figura(5.5b), exhibimos el comportamiento del tiempo de vida del espín de los centros paramagnéticos. La línea roja muestra el caso en el que no hay corrientes de difusión y la línea verde es la situación en el que se consideraron corrientes. Notamos que ambas líneas tienen un comportamiento similiar. A medida que la potencia del haz aumenta el tiempo de vida del espín de los centros disminuye. Este comportamiento del tiempo de vida del espín tambien se ve reflejado en el ancho medio de las Lorentzianas superiores como se muestra en la Figura (5.4), ya que mientras aumentamos la potencias del haz incidente el ancho medio de la Lorentziana superior aumenta, consecuentemente la despolarización es mayor. En otras palabras, a mayor potencia menor tiempo de vida del espín de los centros por lo que mayor es la despolarización de los centros. La linea roja disinuye más rapido que la línea verde. Este incremento que tiene el tiempo de vida del espín de los centros se debe a la de difusión de los huecos. Mientras los huecos se difunden, los centros paramagnéticos apareados tienen una alta disponibilidad de recombinarse, así que las trampas se desaparean provocando que haya más trampas no apareadas induciendo que el tiempo de vidad del espín sea mayor que para el caso en el que no se consderan corrientes de difusión.

# **6** Conclusiones

**P** resentamos un estudio teórico sobre el efecto de las corrientes de difusión en la fotoluminiscencia en semiconductores a base de GaAsN. Nuestro estudio está basado en un modelo no lineal que describe todos los procesos de creación, recombinación y transporte de portadores de carga polarizados en el espín. Este modelo consiste en un conjunto de ecuaciones no lineales acopladas de caracter fenomenológico. Mostramos que es importante incluir corrientes de difusión para modelar la creación y el transporte del espín en aleaciones de semiconductores nitrurados a temperatura ambiente. La difusión tiene un fuerte efecto tanto la  $SDR_r$  como en los tiempos de vida del espín de los electrones localizados en las trampas y en la BC.

Al incluir las corrientes de difusión, encontramos que hay una disminución en la  $SDR_r$ , así como una disminución de la polarización. Observamos que al inducir un campo magnético externo en configuración de Voigt sobre la muestra de GaAsN, se presenta el efecto Hanle el cual se reduce la  $SDR_r$ , debido a la preseción del espín. Mostramos que la polarización de los electrones en la BC en presencia de un campo magnético en configuración de Voigt tiene el comportamiento de la superposición de los contrzianas. Estas Lorentzianas estan relacionadas con la despolarización de los centros paramagnéticos y la despolarización de los electrones en la BC. La primer Lorentziana que mostramos se presenta en pequeños campos magnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los centros paramagnéticos, se debe a la despolarización de los electrones en la BC. Con la ayuda de estas Lorentzianas, encontramos el comportamiento que tiene el tiempo de vida del espín de los electrones en la BC y el

tiempo de vida del espín de los centros, en función de la potencia del haz incidente. Debido a las corrientes de difusión de los huecos, el tiempo de vida del espín de las trampas aumenta, por el contrario debio a las corriente de difusión de los electrones el tiempo de vida del espín de los electrones en la BC disminuye.

Una de las limitaciones de este modelo es que no se consideran las corrientes de deriva. Estas corrientes incluyen los efectos que afectan al transporte del espín debido a la presencia de un campo eléctrico. Ya que en nuestro modelo consideramos que los electrones se desplazan por efectos de difusión, se produce un gradiente de carga sobre la muestra. Este gradiente de carga produce un campo eléctrico que impulsa las corrientes de deriva. Además en las aplicaciones de los semiconductores niturados a base de GaAs, estos por lo regular estan conectados a contactos ohmicos, lo cual tambien produce un gradiente de carga y así mismo produciendo un campo eléctrico. En futuros trabajos queremos ampliar el modelo incluyendo las corrientes de deriva.

## Apéndices



## Unidades

partir del capítulo 4 hemos adoptado un sistema adimensional de unidades. En este apendice mostramos como se restauran las unidades de las cantidades físicas que utilizamos. Primer mostramos las constantes físicas que se utilizaron en el trabajo.

Símbolo y nombre	Valor
$k_B$ – Constante de Boltzmann	$8.6173324 \times 10^{-5} \frac{eV}{K}$
q – Carga eléctrica del electrón	$1.60217656535 \times 10^{-9} C$

Cuadro A.1: Constantes físicas.

#### A. UNIDADES

Símbolo y nombre	Valor	Factor
$\tau_s$ – Tiempo de relajación del espín de los electrones en la BC	130 ps	$\frac{1}{t_0}$
$\tau_{sc}$ –Tiempo de relajación del espín de las trampas	2000 ps	$\frac{1}{t_0}$
$\tau_h$ –Tiempo de vida efectiva de los huecos	35 ps	$\frac{1}{t_0}$
$N_t$ – Número total de trampas paramagnéticas	$2\times 10^{15} \tfrac{1}{cm^3}$	$\frac{{l_0}^3}{n_0}$
$\mu_e$ - Movilidad de los electrones en el GaAsN [30, 31, 32, 33]	$200 \frac{cm^2 V}{s}$	$\frac{t_0}{{l_0}^2 V_0}$
$\mu_h$ – Movilidad de los huecos en el GaAsN [30, 31, 32, 33].	$100 \frac{cm^2 V}{s}$	$\frac{t_0}{{l_0}^2 V_0}$
$D_e$ – Coeficiente de difusión de los electrones.	$\mu_e \frac{k_B T}{q}$	$\frac{t_0 q_0}{{l_0}^2 V_0 T_0 \epsilon_0}$
$D_h$ – Coeficiente de difusión de los huecos.	$\mu_h \frac{k_B T}{q}$	$\frac{t_0q_0}{{l_0}^2V_0T_0\epsilon_0}$
$\gamma_h$ – Tasa de recombinación entre el electrón de la trampa y el hueco.	$\frac{1}{\tau_h N_t}$	
$\gamma_e-$ Tasa de recombinación entre el electrón de la BC y la trampa.	$10\gamma_h$	

**Cuadro A.2:** Tabla de valores de las cantidades físicas utilizadas. También junto con los factores que son multiplicados para adimensionalizar dichas cantidades. Donde  $t_0 = 0.2 \, ps, n_0 = 2 \times 10^{18} \frac{1}{cm^3}, V_0 = 1 Volt, T_0 = 300K, q_0 = 1.60217656535 \times 10^{-9}C, \epsilon_0 = 1 \, eV \, y \, l_0 = \frac{1}{\sqrt[3]{n_0}}.$ 

# Relaciones importantes

Se calculara dos relaciones importantes que se utilizan durante el desarrollo del modelo. La primera se obtiene multiplicando a  $S_z$  y  $S_{cz}$  se tiene que:

$$S_z S_{cz} = \frac{(n_+ - n_-)}{2} \frac{(N_+ - n_-)}{2} = \frac{1}{4} \left( N_+ n_+ + N_- n_- - N_+ n_- - N_- n_+ \right)$$

Agregando de los dos lados de la igualdad $N_{\rm l}$ , ademas de recordar que  $n=n_++n_-$  y  $N_1=N_++N_-$ 

$$nN_{1} - 4S_{z}S_{cz} = - N_{+}n_{+} - N_{-}n_{-} + N_{+}n_{-} + N_{-}n_{+} + nN_{1}$$
  
= - N\_{+}n\_{+} - N\_{-}n\_{-} + N\_{+}n\_{-} + N\_{-}n\_{+} + N\_{+}n\_{-} + N\_{-}n\_{+}  
+ N\_{+}n\_{+} + N\_{-}n\_{-}

Consideramos que el medio es isotrópico, entonces la primera relación importante queda como

$$\frac{1}{2}\left(nN_{1} - 4\vec{S}\cdot\vec{S}_{c}\right) = N_{+}n_{-} + N_{-}n_{+}$$
(B.1)

La segunda relación se obtiene calculando  $S_z N_1$  y  $S_{zc} n.$ 

$$S_z N_1 = \frac{1}{2} \left( n_+ N_+ + n_+ N_- - n_- N_+ - n_- N_- \right)$$
(B.2)

#### **B. RELACIONES IMPORTANTES**

$$S_{cz}n = \frac{1}{2} \left( n_+ N_+ + n_- N_+ - n_+ N_- - n_- N_- \right)$$
(B.3)

Haciendo B.2 - B.3 se obtiene la seguanda relación a ocupar.

$$S_z N_1 - S_{cz} n = (n_+ N_- - n_- N_+)$$
(B.4)

## Bibliografía

- Y. Ohno, D.K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, and D.D. Awschalom. Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure. *Nature*, 402(6763):790–792, 1999.
- [2] F. Meier and B.P. Zakharchenya. *Optical orientation*. Modern problems in condensed matter sciences. North-Holland, 1984. 1
- [3] J. A. Folk, R. M. Potok, C. M. Marcus, and V. Umansky. A gate-controlled bidirectional spin filter using quantum coherence. *Science*. 1
- [4] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, and L.W. Molenkamp. Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode. *Nature*, 402(6763):787–790, 1999. 1
- [5] J.R. Hauptmann, J. Paaske, and P.E. Lindelof. Electric-field-controlled spin reversal in a quantum dot with ferromagnetic contacts. *Nat Phys*, 4(5):373– 376, 2008. 1
- [6] Michael Hetterich, Wolfgang Löffler, Pablo Aßhoff, Thorsten Passow, Dimitri Litvinov, Dagmar Gerthsen, and Heinz Kalt. Electrical spin injection into single ingaas quantum dots. In Rolf Haug, editor, Advances in Solid State Physics, volume 48 of Advances in Solid State Physics, pages 103–114. Springer Berlin Heidelberg, 2009. 1
- [7] D. Lagarde, L. Lombez, X. Marie, A. Balocchi, T. Amand, V. K. Kalevich, A. Shiryaev, E. Ivchenko, and A. Egorov. Electron spin dynamics in gaasn and ingaasn structures. *physica status solidi* (a), 204(1):208–220, 2007. 1, 10, 16, 19, 20
- [8] Su-Huai Wei and Alex Zunger. Giant and composition-dependent optical bowing coefficient in gaasn alloys. *Phys. Rev. Lett.*, 76:664–667, Jan 1996. 2
- [9] E. D. Jones, N. A. Modine, A. A. Allerman, S. R. Kurtz, A. F. Wright, S. T. Tozer, and X. Wei. Band structure of in<sub>x</sub>ga<sub>1-x</sub>as<sub>1-y</sub>n<sub>y</sub> alloys and effects of pressure. *Phys. Rev. B*, 60:4430–4433, Aug 1999. 2

- [10] W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager, E. E. Haller, J. F. Geisz, D. J. Friedman, J. M. Olson, and S. R. Kurtz. Band anticrossing in gainnas alloys. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1221–1224, Feb 1999. 2
- [11] H.Ch Alt, A.Yu Egorov, H Riechert, B Wiedemann, J.D Meyer, R.W Michelmann, and K Bethge. Local vibrational mode absorption of nitrogen in gaasn and ingaasn layers grown by molecular beam epitaxy. *Physica B: Condensed Matter*, 302–303(0):282 – 290, 2001. ¡ce:title¿Proceedings of Yanada Conference LIV. The 9th International Conference on Shallow-Level Centers in Semiconductors. 2
- [12] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum mechanics*. Quantum Mechanics. Wiley, 1977. 2, 10
- [13] S. Geschwind, R. J. Collins, and A. L. Schawlow. Optical detection of paramagnetic resonance in an excited state of  $cr^{3+}$  in  $al_2o_3$ . *Phys. Rev. Lett.* 2
- [14] J. Brossel, S. Geschwind, and A. L. Schawlow. Optical detection of paramagnetic resonance in crystals at low temperatures. *Phys. Rev. Lett.*, 3:548–549, Dec 1959. 2
- [15] S.P. Keller, J.C. Hensel, F. Stern, International Union of Pure, and Applied Physics. *Proceedings of the 10th International Conference on the Physics* of Semiconductors: Cambridge, Massachusetts, August 17-21, 1970. U.S. Atomic Energy Commission, Division of Technical Information, 1970. 2, 3, 10
- [16] Daniel J. Lepine. Spin-dependent recombination on silicon surface. *Phys. Rev. B*, 6:436–441, Jul 1972. 2, 10
- [17] A. Kunold, A. Balocchi, F. Zhao, T. Amand, N. Ben Abdallah, J. C. Harmand, and X. Marie. Giant spin-dependent photo-conductivity in gaasn dilute nitride semiconductor. *Phys. Rev. B*, 83:165202, Apr 2011. 2, 4, 16, 38, 40
- [18] T. Wosinski, T. Figielski, and A. Makosa. Spin-dependent photoconductivity spectrum of dislocated silicon. *physica status solidi* (a), 37(1):K57–K59, 1976. 2
- [19] R. M. White and J. F. Gouyet. Theory of spin-dependent effects in silicon. *Phys. Rev. B*, 16:3596–3602, Oct 1977. 2
- [20] I. Solomon, D. Biegelsen, and J.C. Knights. Spin-dependent photoconductivity in n-type and p-type amorphous silicon. *Solid State Communications*, 22(8):505–508, 1977. cited By (since 1996) 15. 2

- [21] V. Kalevich, E. Ivchenko, M. Afanasiev, A. Shiryaev, A. Egorov, V. Ustinov, B. Pal, and Y. Masumoto. Spin-dependent recombination in gaasn solid solutions. *JETP Letters*, 82:455–458, 2005. 10.1134/1.2142877. 2, 4, 7, 13, 14, 15, 16, 36
- [22] Daniel Paget. Optical-pumping study of spin-dependent recombination in gaas. *Phys. Rev. B*, 30:931–946, Jul 1984. 2, 7, 13, 14
- [23] J. Klein and R. Voltz. Time-resolved optical detection of coherent spin motion for organic-radical-ion pairs in solution. *Phys. Rev. Lett.*, 36:1214–1217, May 1976. 3
- [24] C. Weisbuch and G. Lampel. Spin-dependent recombination and optical spin orientation in semiconductors. *Solid State Communications*, 14(2):141 – 144, 1974. 3, 7, 13, 14
- [25] V. Kalevich, A. Shiryaev, E. Ivchenko, A. Egorov, L. Lombez, D. Lagarde, X. Marie, and T. Amand. Spin-dependent electron dynamics and recombination in gaas alloys at room temperature. *JETP Letters*, 85:174–178, 2007. 10.1134/S0021364007030095. 4, 15, 18, 19, 20, 36
- [26] F. Zhao, A. Balocchi, A. Kunold, J. Carrey, H. Carrere, T. Amand, N. Ben Abdallah, J. C. Harmand, and X. Marie. Spin-dependent photoconductivity in nonmagnetic semiconductors at room temperature. *Applied Physics Letters*, 95(24):241104, 2009. 4, 16, 40
- [27] L. Lombez, P.-F. Braun, H. Carrère, B. Urbaszek, P. Renucci, T. Amand, X. Marie, J. C. Harmand, and V. K. Kalevich. Spin dynamics in dilute nitride semiconductors at room temperature. *Applied Physics Letters*, 87(25):252115, 2005. 7, 10, 13, 14, 19, 20
- [28] X.J. Wang, I.A. Buyanova, F. Zhao, D. Lagarde, A. Balocchi, X. Marie, C.W. Tu, J.C. Harmand, and W.M. Chen. Room-temperature defect-engineered spin filter based on a non-magnetic semiconductor. *Nat Mater*, 8(3):198–202, 2009. 10
- [29] N. Q. Thinh, I. P. Vorona, I. A. Buyanova, W. M. Chen, Sukit Limpijumnong, S. B. Zhang, Y. G. Hong, C. W. Tu, A. Utsumi, Y. Furukawa, S. Moon, A. Wakahara, and H. Yonezu. Identification of Ga-interstitial defects in GaN<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub> and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N<sub>y</sub>P<sub>1-y</sub>. *Phys. Rev. B*, 70:121201, Sep 2004. 10
- [30] S. Fahy and E. P. O'Reilly. Intrinsic limits on electron mobility in dilute nitride semiconductors. *Applied Physics Letters*, 83(18):3731–3733, 2003. 21, 48

- [31] S. Fahy, A. Lindsay, H. Ouerdane, and E. P. O'Reilly. Alloy scattering of *n*-type carriers in GaN<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>. *Phys. Rev. B*, 74:035203, Jul 2006. 21, 48
- [32] Wei Li, Markus Pessa, Juha Toivonen, and Harri Lipsanen. Doping and carrier transport in Ga<sub>1-3x</sub>In<sub>3x</sub>N<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub> alloys. *Phys. Rev. B*, 64:113308, Aug 2001. 21, 48
- [33] Robert Mouillet, Louis-Anne de Vaulchier, Emmanuelle Deleporte, Yves Guldner, Laurent Travers, and Jean-Christophe Harmand. Role of nitrogen in the mobility drop of electrons in modulation-doped gaasn/algaas heterostructures. *Solid State Communications*, 126(6):333 – 337, 2003. 21, 48
- [34] M.I. Dyakonov and V.I. Perel. Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, 35(6):459 – 460, 1971. 22
- [35] M. I. Dyakonov. Magnetoresistance due to edge spin accumulation. *Phys. Rev. Lett.*, 99:126601, Sep 2007. 22
- [36] M. Gavrilova. Generalized Voronoi Diagram: A Geometry-Based Approach to Computational Intelligence. Springer, 2008. 26
- [37] E L Ivchenko, V K Kalevich, A Yu Shiryaev, M M Afanasiev, and Y Masumoto. Optical orientation and spin-dependent recombination in gaasn alloys under continuous-wave pumping. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22(46):465804, 2010. 38
- [38] V.K. Kalevich, A.Yu. Shiryaev, E.L. Ivchenko, M.M. Afanasiev, A.Yu. Egorov, V.M. Ustinov, and Y. Masumoto. Hanle effect and spin-dependent recombination at deep centers in gaasn. *Physica B: Condensed Matter*, 404(23"24):4929 4932, 2009. Proceedings of the 25th International Conference on Defects in Semiconductors. 38