



**Simulación de la absorción de radiación electromagnética en pozos cuánticos basados en heteroestructuras de InGaN/GaN**

Nicolás Adolfo Amaya Lozano

Trabajo de grado de maestría presentado para optar al título de Magíster en Ciencias Naturales y Matemática

Director

Freddy Rafael Pérez, Doctor (PhD) en Física

Universidad Pontificia Bolivariana

Escuela de Ingenierías

Maestría en Ciencias Naturales y Matemática

Medellín, Antioquia, Colombia

2025

El contenido de este documento no ha sido presentado con anterioridad para optar a un título, ya sea en igual forma o con variaciones, en esta o en cualquiera otra universidad.

## **Dedicatoria**

A Isabel y Jahel

---

## Tabla de contenido

Resumen .....	8
Abstract .....	9
Introducción .....	10
1 Planteamiento del problema .....	11
1.1 Antecedentes .....	12
2 Justificación.....	18
3 Objetivos .....	19
3.1 Objetivo general .....	19
3.2 Objetivos específicos.....	19
4 Hipótesis.....	20
4.1 Hipótesis de trabajo.....	20
4.1.1 Hipótesis nula.....	20
4.1.1.1 Hipótesis alterna .....	20
4.1.1.1.1 Variables.....	20
5 Marco teórico .....	21
5.1 Fundamentos de la física cuántica en semiconductores .....	21
5.2 Pozo cuántico finito.....	21
5.3 Propiedades generales del InGaN.....	22
5.3.1 Masas efectivas de electrones y huecos en InGaN/GaN.....	23
5.4 Estructura de banda .....	23
5.5 Semiconductores de banda ancha: GaN, InN, InGaN.....	24
5.6 Relación de la teoría de pozos cuánticos InGaN/GaN con la tecnología de celdas solares .	25
5.7 Modelado cuántico de absorción óptica .....	26
5.8 Espectros de absorción y análisis espectral.....	27

---

5.9 Superredes y estructuras tipo bloque para absorción extendida.....	28
6 Metodología .....	30
6.1 Revisión Bibliográfica.....	30
6.2 Simulaciones Computacionales.....	30
6.2.1 Modelo físico para el cálculo de espectros .....	31
6.2.2 Cálculo de niveles permitidos.....	32
6.2.3 Transiciones ópticas.....	32
6.3 Construcción del espectro .....	32
6.4 Implementación computacional.....	33
6.4.1 Cálculo de niveles permitidos .....	33
6.4.2 Obtención de espectros individuales y desviación estándar.....	34
6.4.4 Construcción de espectros comparativos para diferentes longitudes del pozo .....	34
6.3 Análisis de Resultados .....	36
7 Resultados .....	37
7.1 Espectros de absorción .....	37
7.2 Perspectiva hacia el diseño de superredes de InGaN/GaN.....	57
8 Discusión.....	60
9 Conclusiones .....	62
10. Recomendaciones.....	64
11. Referencias .....	66
12. Anexos.....	71
1 Cálculo de niveles permitidos .....	71
2 Obtención de espectros individuales y desviación estándar.....	71
3 Construcción de espectros comparativos para diferentes longitudes del pozo .....	71

**Lista de tablas**

Tabla 1. Resumen de tendencias espectrales en heteroestructuras InGaN/GaN simuladas .....55

---

## Lista de figuras

Figura 1; autores con mayores publicaciones en la temática .....	16
Figura 2; principales aplicaciones de las investigaciones de InGaN .....	16
Figura 3; Principales revistas de publicación .....	16
Figura 4; Principales países que investigan.....	16
Figura 5 principales semiconductores (Razeghi, 2019) .....	24
Figura 6; Solución par banda de conducción .....	35
Figura 7; Solución impar banda de conducción .....	35
Figura 8; Solución par banda de valencia .....	35
Figura 9; Solución impar banda de valencia .....	35
Figura 10; Espectro de absorción para $x=0,1$ y $L=10\text{nm}$ .....	36
Figura 11; Espectros de absorción para $x=0,05$ .....	37
Figura 12; Espectros de absorción para $x=0,1$ .....	38
Figura 13; Espectros de absorción para $x=0,15$ .....	40
Figura 14; Espectros de absorción para $x=0,2$ .....	41
Figura 15; Espectros de absorción para $x=0,25$ .....	42
Figura 16; Espectros de absorción para $x=0,3$ .....	43
Figura 17; Espectros de absorción para $x=0,35$ .....	45
Figura 18; Espectros de absorción para $x=0,4$ .....	47
Figura 19; Espectros de absorción para $x=0,45$ .....	48
Figura 20; Espectros de absorción para $x=0,5$ .....	49
Figura 21; Espectros de absorción para $x=0,55$ .....	51
Figura 22; Espectros de absorción para $x=0,6$ .....	52

## Resumen

El trabajo de investigación aborda el análisis de la absorción de radiación electromagnética en pozos cuánticos basados en heteroestructuras  $In_xGa_{1-x}N$  Se parte de la brecha de energía ajustable y del potencial teórico de las celdas, modeladas como pozos. El objetivo es identificar configuraciones del pozo que favorezcan un mejor desempeño óptico del dispositivo, a partir del ajuste simultáneo de la concentración de indio ( $0,05 \leq x \leq 0,6$ ) y de la longitud del pozo ( $4 \leq L \leq 16nm$ ). La metodología no resuelve directamente la ecuación de Schrödinger, sino las ecuaciones trascendentales derivadas de ella al aplicar las condiciones de frontera con masas efectivas distintas en pozo y barrera. Se realiza una simulación óptica de la absorción espectral y se contrasta con datos experimentales recientes. Dada la dependencia del desempeño óptico del dispositivo respecto al ancho del pozo y composición del pozo, se espera identificar configuraciones que maximicen la absorción espectral.

*Palabras clave:* InGaN/GaN, pozos cuánticos, celdas solares, simulaciones, fotovoltaica.

### Abstract

This research work examines the absorption of electromagnetic radiation in quantum wells based on  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  heterostructures. The study begins with the adjustable band gap of the material system and the theoretical potential of the wells, modeled as finite quantum wells. The objective is to identify well configurations that enhance the optical performance of the device through the simultaneous adjustment of the indium concentration ( $0.05 \leq x \leq 0.6$ ) and the well width ( $4 \leq L \leq 16$  nm). The methodology does not directly solve Schrödinger's equation; instead, it relies on the transcendental equations derived from it by applying boundary conditions with different effective masses in the well and barrier regions. An optical simulation of the absorption spectrum is carried out and compared with recent experimental data. Given the dependence of the device's optical response on the well width and composition, this study aims to identify configurations that maximize the spectral absorption. The results provide a framework for understanding how compositional and structural variations in  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  quantum wells influence the optical behavior of the system.

*Keywords:* InGaN/GaN, quantum wells, solar cells, simulations, photovoltaics.

## Introducción

En el contexto del desarrollo tecnológico contemporáneo, la investigación en materiales semiconductores ha cobrado especial relevancia debido a sus múltiples aplicaciones en dispositivos de alta eficiencia. Particularmente, los nitruros del grupo III, como el nitruro de galio (GaN) y el nitruro de indio (InN), se han consolidado como materiales estratégicos en la industria optoelectrónica gracias a sus propiedades electrónicas y ópticas.

Dado que la combinación de estos compuestos permite la formación de aleaciones como el InGaN, cuyo rango de banda prohibida puede ajustarse mediante la variación de la concentración de indio y nitruro de galio, se abren posibilidades de diseño para dispositivos emisores de luz, láseres y celdas solares de amplio espectro. Teniendo en cuenta estos avances, el presente trabajo de investigación se propone analizar las propiedades físicas del GaN y del InN, modelar la estructura de pozos cuánticos en heteroestructuras InGaN/GaN, y evaluar su eficiencia en la absorción de radiación electromagnética mediante simulaciones numéricas.

A continuación, se plantea como problema de investigación el análisis del efecto que tienen las propiedades electrónicas y ópticas del InGaN en el rendimiento de dispositivos optoelectrónicos. Asimismo, se identifican las posibles mejoras en la fabricación de estos materiales, que podrían optimizar su eficiencia y durabilidad. Por consiguiente, el objetivo general de esta investigación es caracterizar y modelar estas propiedades, contrastando los resultados teóricos con datos experimentales recientes. La metodología se fundamenta en el uso de simulaciones computacionales bajo cálculos computacionales a partir de ecuaciones trascendentes que surgen de la aplicación de la ecuación de Schrödinger, con aproximación de masa efectiva y considerando la estimación de la brecha de energía.

Así pues, este documento presenta una revisión profunda del estado del arte, una formulación precisa del problema, la hipótesis de trabajo, los objetivos específicos y la descripción detallada de la metodología empleada, con el fin de contribuir al diseño y optimización de dispositivos de próxima generación basados en semiconductores del tipo InGaN/GaN.

## 1 Planteamiento del problema

El incremento en la demanda energética ha generado la necesidad de desarrollar tecnologías fotovoltaicas con mayores niveles de eficiencia y estabilidad. Una de las alternativas emergentes, en particular los semiconductores del grupo III-IV, específicamente el nitruro de galio (GaN) y nitruro de indio (InN), han mostrado características favorables gracias a su amplio rango de banda prohibida ya que se puede ajustar. La aleación generada entre los materiales mencionados, InGaN, permite sintonizar la absorción de luz en un amplio espectro electromagnético, desde el ultravioleta hasta el infrarrojo cercano.

No obstante, pese a la viabilidad que ofrecen estas heteroestructuras, existen desafíos significativos relacionados con la eficiencia cuántica interna, la recombinación no radiativa y el manejo adecuado del confinamiento electrónico en los pozos cuánticos formados por la diferencia energética entre las capas de InGaN y GaN. Particularmente, las propiedades electrónicas y ópticas en los pozos cuánticos de InGaN no han sido afinadas para aplicaciones fotovoltaicas, generando entonces los interrogantes: ¿De qué forma la variación del porcentaje de indio en la composición y espesor de los pozos cuánticos afecta la absorción óptica y la generación eficiente de portadores en celdas solares basadas en InGaN/GaN? ¿Qué mejoras específicas pueden implementarse para optimizar el desempeño energético y la durabilidad de estos dispositivos fotovoltaicos?

En ese contexto, los nitruros del grupo III-IV en particular la aleación  $In_xGa_{1-x}N$  ofrecen un rango de banda prohibida ajustable desde 0,7 eV (InN) a 3,4 eV (GaN), cubriendo la totalidad del espectro solar. Aun así, la aplicación fotovoltaica de las heteroestructuras InGaN/GaN continúa limitada por los interrogantes mencionados.

Este proyecto pretende abordar estos interrogantes mediante un análisis riguroso de las propiedades físicas y el modelado computacional detallado de heteroestructuras de pozos cuánticos de InGaN/GaN, proporcionando bases sólidas para futuras mejoras tecnológicas en paneles solares.

## 1.1 Antecedentes

Los nitruros del grupo III han sido ampliamente estudiados debido a su rango de banda prohibida, que abarca desde aproximadamente  $0,7 - 6,2 \text{ eV}$ , lo que los hace ideales para aplicaciones optoelectrónicas, incluyendo celdas solares multijunción y dispositivos de banda ancha. En particular, el InGaN se destaca por permitir un ajuste continuo de la banda prohibida, mediante la modificación de su composición. Uno de los avances estructurales más relevantes fue reportado por (Nakamura et al., 1994), quienes demostraron que el uso de un sustrato de GaN — en lugar de zafiro— mejoraba notablemente la calidad cristalina de las películas delgadas de InGaN. Esta mejora, obtenida mediante depositación química de doble flujo a presión atmosférica y control térmico preciso (calentamiento a  $1050 \text{ }^\circ\text{C}$  seguido de enfriamiento a  $510 \text{ }^\circ\text{C}$ ), permitió reducir defectos de dislocación y facilitar una mejor integración del InGaN con la capa de GaN subyacente. Aunque en ese momento el objetivo principal era la emisión luminosa en el desarrollo de LEDs azules, los mismos principios de calidad estructural, tensión controlada y composición optimizada son críticos para el diseño de heteroestructuras eficientes en celdas solares. Una menor densidad de defectos y una interfaz coherente entre capas son claves para mejorar la recolección de portadores, reducir la recombinación no radiativa y aumentar la eficiencia cuántica interna en dispositivos fotovoltaicos basados en InGaN/GaN.

En el trabajo de (Naranjo Vega Fernando, 2003) se analizaron las condiciones de crecimiento de capas de InGaN sobre distintos sustratos, específicamente zafiro y GaN, y su influencia en las propiedades ópticas del material. Las muestras fueron depositadas a temperaturas entre  $505 \text{ }^\circ\text{C}$  y  $540 \text{ }^\circ\text{C}$ , alcanzando emisiones ópticas cercanas a  $2,0 \text{ eV}$ . Sin embargo, al aumentar la temperatura de crecimiento hasta un límite de  $595 \text{ }^\circ\text{C}$ , las energías de emisión se desplazaron hasta aproximadamente  $2,6 \text{ eV}$ . Este comportamiento se atribuye a la disminución del contenido de indio en la aleación, ya que a temperaturas más altas el indio tiende a evaporarse, reduciendo su incorporación efectiva en la red cristalina.

Aunque el estudio original se orientó a la optimización de emisión en dispositivos emisores de luz, estos resultados tienen una implicación directa para celdas solares: controlar con precisión la temperatura de crecimiento es esencial para mantener el contenido deseado de indio, lo cual determina la banda prohibida y, por ende, el rango espectral de absorción del dispositivo. En aplicaciones fotovoltaicas, este tipo de desplazamiento espectral se traduce en una variación de la

---

eficiencia cuántica externa EQE por sus iniciales en inglés, External Quantum Efficiency, y condiciona la selección óptima de parámetros estructurales para captar la mayor cantidad de fotones dentro del espectro solar.

Por otro lado, (Suzuki et al., 2009) verifican que el InGaN es un material semiconductor con una banda prohibida ajustable en el rango de 0,7 a 3,5 eV, lo que lo hace atractivo para aplicaciones optoelectrónicas de amplio espectro, incluyendo celdas solares multibanda. Sin embargo, también evidencian que la modificación de su composición —específicamente la fracción de indio— puede inducir fluctuaciones locales en la energía de banda, afectando la uniformidad electrónica del material. Estas fluctuaciones, junto con el efecto Stark cuántico confinado QCSE por sus siglas en inglés, Quantum Confinen Stark Effect, originado por campos piezoeléctricos internos, pueden reducir la eficiencia cuántica interna al disminuir el solapamiento entre las funciones de onda de electrones y huecos.

Diversos estudios han explorado el potencial del InGaN para aplicaciones fotovoltaicas. (Vilbois et al., 2012) realizaron simulaciones numéricas demostrando que el InGaN es eficiente para absorber luz, especialmente cuando se consideran estructuras multicapa que optimizan la absorción en diferentes rangos del espectro solar. (Abboudi et al., 2021) mostraron cómo los pozos cuánticos intermedios en estructuras fotovoltaicas basadas en InGaN/GaN pueden mejorar significativamente la eficiencia fotovoltaica debido al aprovechamiento adicional de fotones.

La tecnología desarrollada con base en los nitruros del grupo III muestran buenos resultados respecto al crecimiento de estructuras cristalinas, lo que por ende se plantea como un material de alta eficiencia fotovoltaica. Usaron una concentración de  $\text{In}_{0,39}\text{Ga}_{0,61}\text{N}$  cuya banda prohibida es de  $2.0\text{eV}$ . Este estudio resulta relevante ya que usan sustratos diferentes a los mencionados hasta el momento y optan por estructuras de homounión  $p-i-n$  con la capa  $n$  considerada como sustrato.

De modo similar, (Daudin et al., 2012) estudiaron nanoestructuras GaN/InGaN y evidenciaron que la reducción en la formación de cúmulos de indio mejora notablemente las propiedades ópticas y eléctricas, esenciales para la eficiencia fotovoltaica. De otro lado, las propiedades eléctricas que encontraron es que con altos contenidos de indio se genera una relajación plástica, mientras que con bajos contenidos se asocia a la formación espontánea de una las capas de InGaN, es decir a una relajación elástica. Dicha relajación juega un papel importante,

ya que disminuye el campo eléctrico interno y por ende mejora la emisión para dispositivos optoelectrónicos.

En la misma línea estudios como el de (Yang et al., 2016) confirman que la morfología específica de heteroestructuras puede mitigar efectos como la recombinación superficial, mejorando la eficiencia global. Dichas configuraciones fueron posibles gracias a usar capas de Si y de SiO<sub>2</sub>, el propósito de esta organización era aliviar el efecto de canalización ya que los iones de Si implantados tienden a acumularse en la superficie, por ello la capa de SiO<sub>2</sub> actuó como una capa de detención, de este modo estas capas generaron una estructura LED que se fabricó mediante los procesos de fotolitografía y grabado en seco, obtuvieron que la luz producida al subir de 5 – 100mA cambio de rojo a casi blanco.

En (En-nadir et al., 2023) se plantea que las estructuras ópticas y electrónicas del InGaN/GaN son modificables, ya que se pueden ajustar mediante la variación de parámetros como el confinamiento potencial y la intensidad del campo laser. Dicha “perturbación” permite alterar los coeficientes de absorción óptica lineales y no lineales, motivo por el cual se desplazan los picos de resonancia y se ajusta la amplitud, en este caso, dichos cambios son significativos cuando se pretende optimizar la eficiencia y emisión de luz. Por ello, la interacción entre los potenciales de confinamiento y los campos laser hacen que haya un desplazamiento hacia energías más altas (corrimiento al azul) en estructuras como el InGaNGaN.

El estudio realizado por (Moneta et al., 2024) muestra que las propiedades ópticas y eléctricas del InGaN se ven altamente influenciadas por el contenido de indio y como la manipulación del contenido permite optimizar las propiedades de la emisión de luz y su eficiencia en dispositivos LEDs y otros dispositivos optoelectrónicos. Encuentran también, que algunas dislocaciones producidas por el desajuste en la interfaz del InGaN/GaN afectan la relajación de la tensión y por ende la distribución de las tensiones en las heteroestructuras que influye de manera directa en la polarización interna y en sus propiedades eléctricas. De igual manera, observaron una reducción en el efecto Stark cuántico confinado ya que en altos contenidos de indio se mejoraron las características de emisión óptica porque se observó una disminución en la tendencia a formar cúmulos del mismo material. Se observaron fuertes emisiones en el rango de 2 – 2,4 eV.

Al analizar los LEDs de InGaN basados en V-pits (Li et al., 2024) encontraron estructuras que ayudaban a mitigar los problemas que suelen afectar a los semiconductores como por ejemplo la interrupción de la red cristalina que conlleva enlaces colgantes en la superficie. También que

---

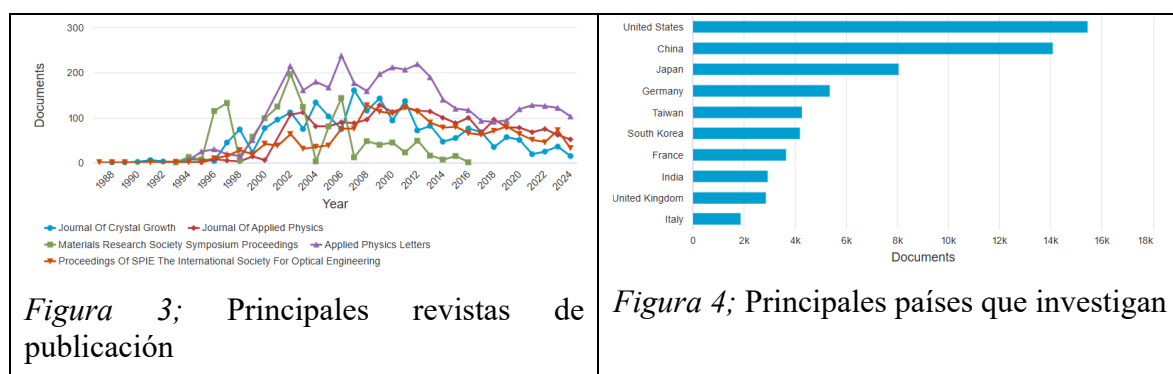
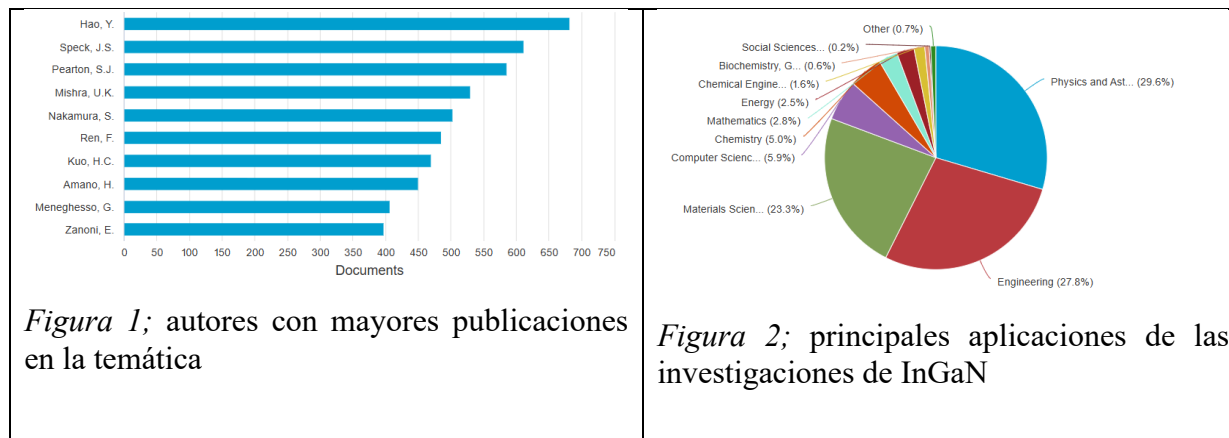
presentan una densidad de corriente baja y una alta eficiencia cuántica interna, lo que indicó que la recombinación superficial fue mínima. Dicha tecnología permite que los LEDs tengan un buen rendimiento aun reduciendo a tamaños muy pequeños, que resulta muy conveniente para aplicaciones en pantallas y dispositivos de iluminación de alta eficiencia.

Por otro lado, al trabajar con bajas temperaturas en el sustrato de Zafiro (Song et al., 2024) mostraron que el recubrimiento a bajas temperaturas tiene un impacto significativo en las características de luminiscencia de los pozos cuánticos múltiples de InGaN/GaN. De igual manera, encuentran que al variar el grosor de la capa intensifica el efecto de polarización resultando en un desplazamiento hacia el azul (blue shift) más pronunciado en los picos de la electroluminiscencia con la inyección de corriente.

A propósito del manejo adecuado de las temperaturas producidas por superficies basadas en GaN, (Zhang et al., 2024) encontraron que una solución novedosa e inteligente para la gestión térmica y a su vez la reducción en el tamaño de dispositivos fue la integración de refrigeración usando fluidos energéticos recargables basados en vanadio como agente térmico, con el método usado logran extraer alto flujos de calor que a su vez potencian la recuperación de calor residual. Es de resaltar, que al implementar dicha refrigeración en dispositivos basados en nitruro de galio encontraron una eficiencia de 20,8% en el rendimiento que puede ser útil tanto para dispositivos móviles como en informática de alto rendimiento.

En una aplicación del nitruro de galio en los transistores de efectos de campo de metal-oxido semiconductores (MOSFET) se encontró que en el proceso de depositar GaN de  $2\mu\text{m}$  sobre el sustrato de zafiro (0001) y con resistencias de  $109\Omega$  las obleas de AlGaIn con capas de Al de 20% y 34% bajo las condiciones de deposición de vapor químico metalorganico (MOCVD) procesos como el crecimiento de la capa de p-GaN se eliminarían, por tanto, se agiliza el proceso de fabricación (Heon Shin et al., 2024).

El estudio de los nitruros del grupo III particularmente del InGaIn ha mostrado un progreso significativo debido a sus propiedades únicas, por ejemplo, un rango de banda prohibida que va desde los  $0,7 - 6,2\text{ eV}$ . Esta aleación, resulta ser crucial en el desarrollo de dispositivos electrónicos especialmente por la emisión de luz azul. Estas investigaciones resaltan la necesidad y oportunidad de estudios adicionales enfocados específicamente en aplicaciones fotovoltaicas para optimizar aún más las heteroestructuras InGaIn/GaN, aprovechando al máximo su potencial tecnológico.



El análisis bibliométrico permite identificar patrones consistentes en la producción científica sobre heteroestructuras basadas en InGaN/GaN. En primer lugar, la Figura 1 muestra que un pequeño grupo de autores concentra una parte significativa de las publicaciones, lo cual evidencia la existencia de comunidades especializadas que han sostenido el desarrollo teórico y experimental del campo durante las dos últimas décadas. La presencia de estos núcleos de investigación también sugiere que el avance del conocimiento en materiales III–N depende, en gran medida, de colaboraciones estables y de agendas de trabajo consolidadas.

En relación con los usos reportados en la literatura, la Figura 2 revela que las aplicaciones más citadas se distribuyen principalmente en física y astronomía (29,6%), ingeniería (27,8%), y ciencias computacionales (23,3%). Esta distribución permite reconocer que el estudio del InGaN no se limita al interés estrictamente fundamental, sino que se proyecta hacia desarrollos tecnológicos —particularmente optoelectrónicos— donde la manipulación de pozos cuánticos es esencial para definir el comportamiento espectral de dispositivos emisores y detectores.

La dinámica temporal de las publicaciones, representada en la Figura 3, evidencia un crecimiento sostenido desde inicios de los años 2000 en revistas especializadas como *Journal of Crystal Growth*, *Journal of Applied Physics* y *Applied Physics Letters*. Estas revistas, que lideran el número de artículos publicados, funcionan como espacios donde convergen tanto los estudios de síntesis y caracterización como los modelos teóricos que orientan el diseño de pozos cuánticos y heteroestructuras. El aumento en la producción también refleja que siguen existiendo preguntas abiertas, particularmente en el control de defectos, el modelado espectral y la ingeniería de banda.

Finalmente, la Figura 4 muestra que Estados Unidos, China, Alemania y Japón concentran la mayor producción científica en el área. Este comportamiento geográfico es coherente con la infraestructura tecnológica requerida para el crecimiento epitaxial y la simulación computacional, y explica por qué buena parte de los avances en optimización de pozos cuánticos provienen de estos países. Sin embargo, también pone de manifiesto la oportunidad de fortalecer redes de colaboración que permitan ampliar la participación latinoamericana en esta línea de trabajo.

En conjunto, las Figuras 1–4 permiten concluir que el estudio del InGaN se sostiene sobre una comunidad sólida, con aplicaciones diversificadas y un crecimiento sostenido en revistas de alto impacto. La distribución temática y geográfica evidencia que, aunque se han logrado avances significativos, aún subsisten áreas de investigación abiertas que pueden derivar en innovaciones relevantes para la optimización de semiconductores, especialmente en contextos donde el control de la estructura de bandas resulta crucial.

## 2 Justificación

La creciente demanda de dispositivos optoelectrónicos eficientes ha impulsado la investigación de materiales semiconductores con propiedades ajustables. En este contexto, las aleaciones del tipo InGaN/GaN representan una alternativa prometedora debido a su capacidad de modificar la brecha de energía mediante la variación de la composición de indio. Esta característica permite diseñar dispositivos con respuesta espectral adaptable, lo que resulta especialmente útil en aplicaciones como emisores de luz, láseres y celdas solares multiespectrales.

Estudiar las propiedades físicas de materiales como el GaN y el InN, así como la interacción cuántica en pozos finitos, es relevante no solo por sus aplicaciones tecnológicas inmediatas, sino también por el valor científico que aporta a la comprensión de fenómenos fundamentales en la física del estado sólido. La presente investigación, al integrar simulaciones numéricas y modelado teórico riguroso, contribuye al conocimiento de los mecanismos que determinan la eficiencia y durabilidad de estos materiales.

Además, la justificación de este estudio radica en la necesidad de optimizar los procesos de fabricación y diseño de dispositivos basados en InGaN, proponiendo configuraciones que reduzcan la formación de defectos cristalinos y favorezcan un mejor desempeño óptico. Este aporte resulta pertinente tanto para la comunidad académica como para la industria tecnológica, al favorecer el desarrollo de tecnologías más sostenibles y de alto rendimiento.

### 3 Objetivos

#### 3.1 Objetivo general

Analizar las propiedades electrónicas y ópticas de pozos cuánticos de InGaN/GaN con pozos cuánticos mediante simulaciones computacionales, con el fin de identificar configuraciones estructurales que favorezcan el rendimiento fotovoltaico en celdas solares.

#### 3.2 Objetivos específicos

Modelar con técnicas analíticas y computacionales un pozo cuántico finito general a partir de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y con masa efectiva.

Calcular y analizar las transiciones ópticas resultantes entre los niveles confinados ( $e_i \rightarrow h_j$ ), evaluando cómo la fracción de indio y el espesor del pozo modifican las energías de transición y la distribución espectral asociada.

Construir espectros de absorción simulados mediante la suma de contribuciones gaussianas para cada transición permitida, con el fin de estudiar el desplazamiento del espectro y su amplitud efectiva en función de los parámetros estructurales del pozo cuántico.

## 4 Hipótesis

El diseño estructural de pozos cuánticos en heteroestructuras InGaN/GaN mediante ajuste de la concentración de indio  $0,05 \leq x \leq 0,6$  y el espesor del pozo en el intervalo  $4 \leq L \leq 16 \text{ nm}$  mejora significativamente la eficiencia fotovoltaica, incrementando la absorción de luz en el visible ajustando su ancho de banda mediante el control del ancho del pozo y el porcentaje de aleación de indio.

### 4.1 Hipótesis de trabajo

El desempeño óptico de una heteroestructura InGaN/GaN puede optimizarse mediante la variación simultánea del espesor del pozo cuántico y la concentración de indio en la aleación. Esta optimización se refleja en un mayor rango de absorción espectral y en una mejora en la distribución de los estados energéticos confinados, incrementando la tasa de absorción en el espectro visible.

#### 4.1.1 Hipótesis nula

No existe una relación estadísticamente significativa entre los valores del espesor del pozo cuántico y la concentración de indio con la eficiencia de absorción espectral en heteroestructuras InGaN/GaN.

**4.1.1.1 Hipótesis alterna.** Existe una relación directa y significativa entre la variación del espesor del pozo y el contenido de indio con el número de estados electrónicos permitidos y la eficiencia de absorción óptica, lo cual permite ajustar el ancho de banda y mejorar el desempeño óptico de la heteroestructura.

**4.1.1.1.1 Variables.** Variable independiente: espesor del pozo cuántico y concentración de indio en la aleación InGaN.

Variable dependiente: absorción espectral simulada y características de los estados electrónicos permitidos (cantidad, distribución y energía de transición).

Variables de control: longitud de onda del láser incidente, condiciones de simulación, temperatura, tipo de software utilizado, condiciones de frontera en el modelo teórico.

## 5 Marco teórico

### 5.1 Fundamentos de la física cuántica en semiconductores

Para describir la forma en que se comporta un electrón confinado en un semiconductor, se usa la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (Razeghi, 2019).

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x) \quad [1]$$

Se tiene en cuenta la aproximación de masa efectiva  $m^*$ , la cual es válida cerca del mínimo de la banda de energía. Además, para las fracciones de indio consideradas en este trabajo, el material ternario se comporta como un semiconductor de brecha directa, lo que permite modelar de manera adecuada la interacción del electrón con el potencial de pozo cuántico. Por esta razón, al modelar un pozo cuántico, la región central (pozo) y las barreras laterales pueden diferenciarse mediante los valores de masa efectiva del electrón en cada material, designados como  $m_w$  para el pozo y  $m_b$  para las barreras. Esta configuración se debe a la discontinuidad entre los fondos de las bandas de conducción y las cimas de las bandas de valencia de los materiales involucrados. Como resultado, la energía del electrón es menor en la región del pozo que en las barreras, lo que da lugar a la formación de niveles de energía discretos debido al confinamiento cuántico.

### 5.2 Pozo cuántico finito

Al considerar un pozo en la región  $0 < x < L$ , donde  $V(x)$  se toma como cero, y fuera de dicho intervalo ( $x < 0$  ó  $x > L$ ) el potencial equivale a  $U_0$ , se establece un modelo de pozo cuántico finito. Para resolver la ecuación de Schrödinger en este tipo de potencial, se plantean soluciones sinusoidales dentro del pozo y exponenciales fuera de este (Tapia-Rodríguez et al., 2023). Al aplicar las condiciones de frontera (continuidad de la función de onda y su derivada ajustada por el cociente de las masas efectivas)  $x = 0$  y  $x = L$ , se obtienen las ecuaciones trascendentes típicas para los modos par e impar (Pérez, 2024).

$$\kappa \tan(\kappa L/2) = \frac{m_w}{m_b} \alpha \quad [2] \text{ Solución par}$$

$$\cot(\kappa L/2) = -\left(\frac{m_w}{m_b}\right) \alpha \quad [3] \text{ Solución impar}$$

donde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m_w E}{\hbar^2}} \quad [4]$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_b(U_0 - E)}{\hbar^2}} \quad [5]$$

Cada intersección de las funciones en términos de la energía  $E$  define un estado ligado. El número de soluciones depende de la altura  $U_0$  y ancho  $L$ .

### 5.3 Propiedades generales del InGaN

Al analizar una estructura tipo InGaN, se debe calcular la profundidad efectiva del pozo  $U_0$  y las masas efectivas de cada material. En el caso de las aleaciones de InGaN/GaN, la brecha de energía  $E_g$  se calcula a partir de los valores de energía de banda prohibida de los materiales puros InN y GaN, según la siguiente expresión (Abboudi et al., 2021)

$$E_{InGaN}(x) = (1 - x)E_{GaN} + xE_{InN} - bx(1 - x) \quad [6]$$

Donde  $b$  es el parámetro de *bowing* (en torno a 1.43 eV (Abboudi et al., 2021)). Para establecer la profundidad efectiva del pozo, también es necesario considerar la discontinuidad en la banda de conducción: se asume que el 70 % de la diferencia de bandas corresponde a la banda de conducción y el 30 % a la banda de valencia. Con ello, se fija la altura efectiva  $U_0$  para confinar a los electrones dentro del pozo y se consideró la distribución típica de la discontinuidad de banda entre la banda de conducción y la de valencia dada por

$$U_0 = 0,7(E_{gGaN} - E_{gInGaN}) \quad [7] \text{ Para electrones}$$

$$U_0 = 0,3(E_{gGaN} - E_{gInGaN}) \quad [8] \text{ Para huecos}$$

Esta diferenciación es esencial para reflejar la asimetría real en el confinamiento de portadores. Se tiene en cuenta que  $E_{GaN} = 3,42 \text{ eV}$  y que  $E_{InN} = 0,77 \text{ eV}$  (Cardona-Bedoya et al., 2021)

### 5.3.1 Masas efectivas de electrones y huecos en InGaN/GaN

En el tratamiento de pozos cuánticos basados en InGaN/GaN, uno de los parámetros fundamentales para la resolución de la ecuación de Schrödinger con potencial de pozo finito es la masa efectiva de los portadores (electrones y huecos). Esta magnitud refleja cómo la periodicidad del cristal y la interacción con la red alteran la dinámica de los portadores, de modo que estos se comportan como partículas libres con una masa modificada.

El cálculo de las masas efectivas suele realizarse mediante una interpolación lineal entre los valores tabulados de los materiales extremos (GaN e InN), considerando la fracción molar de indio  $x$ . Así, para el caso de electrones (Abboudi et al., 2021):

$$m_e(x) = (1 - x)m_e\text{GaN} + xm_e\text{InN} \quad [9]$$

$$m_h(x) = (1 - x)m_h\text{GaN} + xm_h\text{InN} \quad [10]$$

En ausencia de parámetros de curvatura adicionales, este modelo de interpolación es ampliamente aceptado para describir sistemas binarios III–V como InGaN (Abboudi et al., 2021).

Con los datos (en  $kg \cdot 10^{-31}$ ):

- Electrones:  $m_e\text{GaN} = 1,758$ ;  $m_e\text{InN} = 0,492$
- Huecos:  $m_h\text{GaN} = 7,461$ ;  $m_h\text{InN} = 7,61$

De este modo, la masa efectiva en el pozo cuántico se obtiene ajustando linealmente con la fracción de indio  $x$ , mientras que en la barrera de GaN se mantiene constante el valor de GaN puro. Estas masas efectivas se incorporan en las expresiones de las funciones trascendentes. En consecuencia, la masa efectiva no solo determina la densidad de estados en cada banda, sino también la profundidad relativa del confinamiento y el espaciamiento entre niveles de energía permitidos, influyendo de manera directa en la posición de los máximos de absorción y en la simetría espectral observada en las simulaciones.

## 5.4 Estructura de banda

La principal característica de los semiconductores, en particular de los nitruros del grupo III, es su estructura electrónica. Un ejemplo de ello es la frecuencia de emisión de luz. El espectro de emisión del hidrógeno ha sido ampliamente estudiado; Rydberg planteó la primera expresión

matemática que describía el comportamiento de las frecuencias de dicho átomo, a partir de la cual se categorizaron en series como las de Paschen, Balmer y Lyman (Razeghi, 2019).

Cuando las heteroestructuras como InGaN/GaN son sometidas a campos eléctricos, se generan algunas regiones de energía en las que aparecen “huecos”; estos permiten los cambios de energía de los electrones (Kittel, 2005). La ruptura en la degeneración de la banda de valencia, o la interacción que se puede presentar entre los huecos y el campo cristalino, resulta un aspecto clave para el comportamiento de los semiconductores del grupo III–IV (Gil, 1998).

### 5.5 Semiconductores de banda ancha: GaN, InN, InGaN

Los semiconductores pueden formarse a partir de la combinación de elementos de diferentes grupos, por ejemplo, III–V o II–VI. Para efectos particulares de esta investigación, se estudiará la combinación de elementos del grupo III–IV, que son de gran importancia para aplicaciones tecnológicas. La Figura 5 muestra algunos de los principales elementos utilizados para la fabricación de semiconductores (Razeghi, 2019)

IIA		IIIA	IVA	VA	VIA
Be					
Mg		B	C	N	O
Ca	IIB	Al	Si	P	Si
Sr	Zn	Ga	Ge	As	Se
Ba	Cd	In	Sn	Sb	Te
Ra	Hg	Tl	Pb	Bi	Po

Figura 5 principales semiconductores (Razeghi, 2019)

El GaN es un material semiconductor cuya banda prohibida es aproximadamente 3.4 eV a temperatura ambiente, lo que lo hace ideal para aplicaciones de alta potencia y frecuencia. Esta banda prohibida amplia permite que los dispositivos basados en esta aleación funcionen de manera eficiente incluso a altas temperaturas y voltajes, lo que representa una ventaja considerable frente a semiconductores tradicionales como el silicio o el germanio.

El nitruro de indio (InN) también es un material semiconductor, pero con una banda prohibida mucho más estrecha, aproximadamente de 0.7 eV, lo que lo hace adecuado para dispositivos que operan en el infrarrojo cercano. Cuando se forma la aleación entre InN y GaN, se

obtiene el compuesto InGaN, cuya banda prohibida puede ajustarse para emitir luz desde el ultravioleta hasta el infrarrojo, las propiedades de esta aleación dependen directamente de su composición, en particular de la fracción de indio ( $x$ ) en la mezcla, motivo por el cual se considera una aleación crucial para el desarrollo de LEDs y láseres.

Las heteroestructuras InGaN/GaN pueden formar un pozo cuántico, en el que los electrones y huecos quedan confinados dentro de la región InGaN debido a la diferencia en los niveles de energía respecto al GaN. Las barreras formadas por el GaN presentan una mayor brecha energética, lo que actúa como una “pared” que impide que los portadores de carga escapen del pozo. Tanto la banda de valencia como la de conducción de la heteroestructura se conforman por las contribuciones del InGaN y el GaN. Como el InGaN tiene una banda prohibida más pequeña, se favorece la transición de electrones y huecos en su interior, lo que posibilita la emisión de luz en un amplio rango del espectro electromagnético.

### **5.6 Relación de la teoría de pozos cuánticos InGaN/GaN con la tecnología de celdas solares**

Las celdas solares basadas en pozos cuánticos (Quantum Well Solar Cells, QWSC) se fundamentan en la inclusión de capas semiconductoras muy delgadas con una brecha energética menor respecto a las barreras circundantes, lo cual permite la absorción adicional de fotones en un rango más amplio del espectro solar. Esta estructura aumenta la eficiencia mediante la generación adicional de pares electrón-hueco dentro de estos pozos, que son posteriormente extraídos debido al diseño cuidadoso de la estructura.

Específicamente, las heteroestructuras InGaN/GaN poseen la capacidad única de ajustar su brecha energética al variar la concentración de indio (Suzuki et al., 2009), permitiendo adaptar eficientemente la absorción a la distribución espectral de la radiación solar. Sin embargo, los efectos de polarización espontánea y piezoeléctrica característicos de estos materiales pueden inducir campos eléctricos internos que afectan la separación de portadores, incrementando la recombinación no radiativa y reduciendo la eficiencia global de conversión.

La simulación numérica avanzada de estos sistemas, considerando efectos de polarización, campos eléctricos internos y distribución electrónica en pozos cuánticos, se ha convertido en una herramienta esencial para predecir y optimizar el desempeño de los dispositivos fotovoltaicos basados en InGaN/GaN. Estudios previos (Li et al., 2024) (En-nadir et al., 2023) han indicado que la optimización estructural puede mitigar significativamente estos efectos adversos y aprovechar el potencial completo de estas heteroestructuras para aplicaciones solares.

La versatilidad de la heteroestructura ha sido ampliamente estudiada en el contexto de emisores de luz, (Abboudi et al., 2021), (Han et al., 2014), (Cardona-Bedoya et al., n.d.), (Roy et al., 2022), (Tao et al., 2024), (Li et al., 2024) y láseres semiconductores, por lo que la tecnología fotovoltaica también se ha convertido en un campo de interés. Dichos estudios, señalan que gracias a la posibilidad de ajustar la brecha de energía  $E_g(\text{InGaN})$ , mediante la variación de indio, se pueden diseñar celdas solares multiestrato o multicapa con lo que se puede aprovechar regiones más amplias del espectro solar (McCluskey et al., 2003).

El cálculo de  $E_{\text{InGaN}}(x) = (1-x)E_{\text{GaN}} + xE_{\text{InN}} - bx(1-x)$ , tiene implicaciones directas en el rendimiento de las celdas solares (Vilbois et al., 2012). Al variar  $x$ , puede ajustarse la energía de absorción para captar fotones en una banda específica. Si bien la ecuación de Schrödinger y las ecuaciones trascendentes (modos par e impar) se asocian con el estudio de estados ligados y niveles discretos, en la tecnología fotovoltaica estos conceptos ayudan a comprender la distribución de densidad electrónica.

El conjunto de ecuaciones descrito (ecuación de Schrödinger con potencial finito, aproximación de masa efectiva) constituyen el núcleo de diversos programas de simulación para el diseño de paneles solares (Yang et al., 2016); (Vilbois et al., 2012)). Las ecuaciones de continuidad de electrones y huecos describen la generación, recombinación y transporte de portadores fotogenerados. Así, las soluciones de los niveles de energía determinan en qué regiones y de qué forma se producirán transiciones electrónicas de absorción, influyendo directamente en el desempeño óptico interno de la heteroestructura.

### 5.7 Modelado cuántico de absorción óptica

Para analizar el comportamiento óptico de heteroestructuras como InGaN/GaN, se emplean modelos teóricos que integran la ecuación de Schrödinger con potencial finito, la aproximación de masa efectiva y las leyes que describen la variación de la brecha de energía con la composición. En este punto es importante distinguir entre la ley de Vegard, que describe una dependencia lineal del parámetro de red con la fracción molar, y el efecto bowing, que introduce una desviación no lineal en la brecha prohibida debido a las interacciones electrónicas y estructurales del material. Esta corrección mediante el parámetro de bowing permite obtener un valor más realista del band gap para el compuesto  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ , especialmente a altos contenidos de indio.

En las heteroestructuras tipo InGaN/GaN, el contraste de brecha de energía entre los materiales genera un potencial de pozo cuántico capaz de confinar electrones en la banda de

conducción y huecos en la banda de valencia. Este confinamiento produce niveles de energía discretos ( $E_e$  y  $E_h$ ), cuya separación depende tanto de la fracción molar de indio como del espesor del pozo cuántico. Las transiciones ópticas que ocurren entre estos niveles corresponden a la absorción de fotones cuya energía se expresa como  $E_{fotón} = E_g(InGaN) + E_e + E_h$ . De esta manera, el modelo físico permite relacionar la composición del material y la geometría de la heteroestructura con las propiedades de absorción óptica observadas. Este marco conceptual constituye la base para el cálculo de los estados permitidos y la simulación de los espectros de absorción en los diferentes escenarios considerados.

La eficiencia de absorción óptica se entiende aquí como la capacidad del pozo cuántico para promover transiciones electrónicas entre niveles confinados dentro del rango espectral estudiado. Aunque en la literatura se distinguen la eficiencia cuántica interna (IQE) y externa (EQE)—las cuales dependen de procesos de recombinación radiativa, no radiativa y mecanismos de extracción óptica—estos parámetros no se calculan directamente en este estudio. En su lugar, el modelo desarrollado permite estimar indicadores estructurales asociados al desempeño óptico, como la variación en los niveles de energía, el solapamiento entre funciones de onda y la absorción espectral simulada, los cuales ofrecen una aproximación inicial para evaluar el comportamiento óptico de la heteroestructura en función del espesor del pozo y la concentración de indio.

## 5.8 Espectros de absorción y análisis espectral

El espectro de absorción de un material representa la cantidad de radiación electromagnética absorbida en función de la longitud de onda o la energía de los fotones incidentes. En las heteroestructuras tipo *InGaN/GaN*, el espectro está fuertemente influenciado por el confinamiento cuántico y las fluctuaciones en la composición de indio (Vilbois et al., 2012).

Mediante simulaciones computacionales es posible obtener perfiles espectrales que permiten estimar con alta precisión la región activa de absorción óptica y su correspondencia con el espectro solar terrestre (Suzuki et al., 2009). Estos perfiles no solo reflejan la respuesta óptica del material, sino que también permiten predecir la eficiencia relativa de absorción bajo distintas configuraciones estructurales, como se discute en los análisis posteriores de variación de la fracción de In y del espesor del pozo cuántico.

En estudios como (McCluskey et al., 2003); (Pérez, 2024); (Pérez T. Jaime A., 2011); (Yusof et al., 2024); (Cardona-Bedoya et al., 2021) se suelen emplear ajustes gaussianos o Lorentzianos para simular la densidad de estados ópticos y modelar con mayor precisión los picos

de absorción. Este análisis espectral es clave para definir la eficiencia espectral de conversión y establecer la idoneidad de una determinada estructura para aplicaciones solares específicas, como celdas de banda ancha o celdas multiunión.

Además, el análisis espectral constituye el punto de partida para evaluar el impacto de parámetros como el contenido de indio ( $x$ ) o el espesor del pozo ( $L$ ), tal como se desarrolla en el capítulo de resultados. Dichos parámetros afectan directamente el corrimiento del espectro y la forma del perfil de absorción, permitiendo afinar el diseño de celdas solares y dispositivos emisores mediante simulaciones controladas que replican condiciones experimentales realistas.

### **5.9 Superredes y estructuras tipo bloque para absorción extendida**

Las superredes constituyen una estrategia estructural clave para ampliar la región de absorción espectral en dispositivos optoelectrónicos y mejorar su eficiencia de conversión. Estas estructuras se conforman mediante la repetición periódica de capas delgadas con distintas propiedades electrónicas y ópticas —como la banda prohibida y la masa efectiva—, lo cual permite generar minibandas y modificar la densidad de estados disponibles para la absorción (Singh Jasprit, 2003).

El concepto de superred surge como una estrategia efectiva para ampliar la región activa de absorción y mejorar la eficiencia espectral en dispositivos fotovoltaicos. Estas estructuras se conforman mediante la disposición periódica de capas delgadas con diferentes propiedades de banda prohibida y masa efectiva, lo que permite generar minibandas cuánticas y modificar la densidad de estados ópticos, incrementando así la capacidad de interacción con diferentes zonas del espectro solar (Tsai, 2016a).

En las estructuras tipo InGaN/GaN, el control simultáneo de la fracción molar de indio, el espesor del pozo y el grosor de la barrera ofrece una vía para sintonizar la respuesta espectral del dispositivo. Diversos estudios han demostrado que una arquitectura basada en pozos más anchos y barreras más delgadas puede mejorar de manera significativa el desempeño óptico interno, debido a una mejor inyección de huecos y a una reducción en la fuga de electrones (Dong et al., 2020). Esta mejora se atribuye a un incremento en la altura de barrera para los electrones y a una disminución de esta para los huecos, lo que genera una distribución más uniforme de portadores en la zona activa.

Además, se ha evidenciado experimentalmente que los efectos de desbalance de portadores y recombinaciones no radiativas pueden minimizarse mediante el uso de superredes dopadas tipo

p adyacentes a la región activa, que actúan tanto como canales de inyección de huecos como trampas de electrones desbordados (Yan et al., 2017).

La implementación de estructuras tipo bloque con capas de InGaN modulado también ha sido explorada para crear regiones de confinamiento con propiedades ópticas específicas. Estos bloques pueden acoplarse a las superredes tradicionales para extender la absorción en el espectro visible, optimizar la localización espacial de la generación de portadores y facilitar la ingeniería de campos eléctricos internos mediante efectos de apantallamiento de carga (Alam et al., 2017).

En síntesis, la literatura sugiere que las superredes tipo InGaN/GaN con parámetros cuidadosamente ajustados (como  $L_{\text{pozo}}$ ,  $L_{\text{barrera}}$  contenido de In y número de períodos) no solo permiten extender la región de absorción, sino también optimizar la eficiencia de recombinación radiativa, la distribución de portadores y la estabilidad estructural del dispositivo ((Tsai, 2016b), (Dong et al., 2020)). Estos principios orientan el planteamiento del presente trabajo, donde se estudian mediante simulación las configuraciones más prometedoras para maximizar la captación en la región visible del espectro solar y mitigar las pérdidas asociadas al transporte de carga.

---

## 6 Metodología

En el contexto del estudio sobre las propiedades optoelectrónicas como GaN e InN, se requiere un enfoque híbrido que combine el análisis de resultados de otras investigaciones y de simulaciones computacionales. Las dificultades que conlleva realizar el proceso para la obtención de resultados han permitido el desarrollo de herramientas computacionales en diversas plataformas como Matlab, Scilab o Python (Cuadro et al., 2012). Este enfoque dual, permite no sólo validar hallazgos, sino también la optimización para el diseño de dispositivos pues uno de los objetivos de usar simulaciones es la obtención de más información respecto al sistema (Duarte & Fernandez Morales, 2005) .

### 6.1 Revisión Bibliográfica

La base de esta investigación se establece mediante la recopilación y el análisis de literatura científica. Diversos estudios han demostrado que las aleaciones de InGaN presentan propiedades electrónicas y ópticas ajustables mediante la variación de su composición, lo cual las hace potencialmente adecuadas para dispositivos fotovoltaicos, en particular celdas solares de banda ancha.

Sin embargo, existen discrepancias entre los resultados experimentales reportados en distintos trabajos. Por ejemplo, mientras que (Nakamura et al., 1994) identificaron condiciones consideradas “óptimas” para el crecimiento y la composición de estructuras InGaN en aplicaciones optoelectrónicas, estudios más recientes como el de (Song et al., 2024) proponen configuraciones con mayores rangos de absorción espectral sin considerar algunos parámetros estructurales críticos establecidos previamente, como los efectos de polarización interna o la estabilidad de la red cristalina.

Estas diferencias evidencian la necesidad de estudios sistemáticos que combinen simulaciones predictivas con datos experimentales, con el fin de clarificar cómo la composición y geometría de las heteroestructuras InGaN/GaN afectan el confinamiento electrónico, la absorción óptica y, en última instancia, el rendimiento de las celdas solares.

### 6.2 Simulaciones Computacionales

Para cumplir con los objetivos propuestos, se implementará un enfoque numérico que permite resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del potencial del pozo cuántico,

considerando una masa efectiva dependiente del material en este caso InGaN para el pozo y GaN para las barreras.

Concretamente, se resuelve numéricamente la forma analítica de la ecuación de Schrödinger para un pozo asimétrico, mediante la evaluación de funciones trascendentes derivadas de las condiciones de frontera. Este procedimiento no resuelve directamente la ecuación diferencial por métodos numéricos como diferencias finitas, sino que busca las raíces de las ecuaciones trascendentes que resultan de la solución analítica del sistema, para ello se utiliza:

- Muestreo: se empleará un barrido de energía para evaluar las funciones que corresponden a los modos par e impar.

$$k \tan\left(\frac{kL}{2}\right) \qquad k \cot\left(\frac{kL}{2}\right)$$

- Posterior a ello, se usará el método de bisección, el cuál es un algoritmo de búsqueda de raíces ampliamente utilizado en análisis numérico, con ello, se pretende encontrar con precisión los valores de energía permitidos para los electrones confinados en el pozo cuántico.

Las simulaciones se desarrollarán en Python, ya que permite programar modelos personalizados, lo que posibilita modificar los parámetros como la fracción de indio (In), las masas efectivas, el ancho del pozo o el potencial de confinamiento con lo que se pueden estudiar sus propiedades electrónicas. Estos enfoques se encuentran alineados con el uso de herramientas numéricas reportadas en la literatura (Suzuki et al., 2009) y de igual manera (Vilbois et al., 2012), encontraron que dichas herramientas permiten predecir y comparar resultados experimentales con modelos ajustables.

Las simulaciones resultan útiles al momento de comparar e interpretar resultados contradictorios, por ejemplo, mientras algunos estudios muestran que un alto contenido de indio mejora la emisión lumínica, otras permiten identificar límites prácticos donde la formación de defectos cristalinos contrarresta dichos beneficios.

### **6.2.1 Modelo físico para el cálculo de espectros**

El modelo adoptado en este estudio se basa en la resolución de la ecuación de Schrödinger con potencial finito bajo la aproximación de masa efectiva, para describir la cuantización de niveles de energía en pozos cuánticos *InGaN/GaN*. Para el cálculo de la altura de barrera de confinamiento,

se consideró la distribución típica de la discontinuidad de banda entre la banda de conducción y la de valencia.

### 6.2.2 Cálculo de niveles permitidos

El núcleo del modelo consiste en obtener los niveles de energía discretos resolviendo la ecuación de Schrödinger para un pozo de potencial, considerando masa efectiva dependiente de la composición de indio. Los niveles  $E_n$  para electrones y huecos se calculan de forma independiente, permitiendo evaluar cómo varían con el espesor  $L$  y la fracción molar  $x$  (Pérez, 2024).

### 6.2.3 Transiciones ópticas

Se asume que todas las transiciones entre niveles de electrones y huecos son ópticamente permitidas, y que la energía del fotón absorbido se determina como plantea (Yusof et al., 2024)

$$E_{\text{fotón}} = E_h + E_e + E_g(\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}) \quad [11]$$

## 6.3 Construcción del espectro

Para representar el ensanchamiento natural de las transiciones ópticas —producto de efectos térmicos, imperfecciones cristalinas y fluctuaciones composicionales— se modela cada transición permitida mediante una distribución Gaussiana centrada en la energía correspondiente a la diferencia entre los niveles electrónicos y de huecos. Este tratamiento sigue el enfoque ampliamente utilizado para semiconductores con fluctuaciones locales en la composición de InGaN, las cuales generan variaciones espaciales en el potencial y, por tanto, un ensanchamiento inhomogéneo de las líneas de absorción (McCluskey et al., 2003).

El procedimiento consiste en asignar a cada transición  $E_{ij}$  una función Gaussiana de la forma (Saleh & Teich, 1991)

$$G_{ij}(E) = A_{ij} \exp \left[ -\frac{(E-E_{ij})^2}{2\sigma^2} \right] \quad [12]$$

donde  $A_{ij}$  es la amplitud asociada a la intensidad relativa de la transición y  $\sigma$  representa el parámetro de ensanchamiento, el cual recoge tanto efectos térmicos como variaciones locales en la composición del material. En un tratamiento más completo, las amplitudes pueden obtenerse a partir del elemento dipolar  $|\langle \psi_i | \hat{p} | \psi_j \rangle|^2$ , responsable de la probabilidad óptica real de cada transición. Sin embargo, dado que el modelo implementado en este trabajo se centra en la determinación de los niveles de energía y en la forma cualitativa del espectro, y no en la intensidad

absoluta de las transiciones, en el código se asigna  $A_{ij} = 1$  para todas las contribuciones. Esta normalización evita introducir parámetros no calculados explícitamente y permite que el perfil final del espectro dependa únicamente de las energías  $E_{ij}$  y del ensanchamiento  $\sigma$ , manteniendo el enfoque analítico en los efectos del confinamiento cuántico y de la composición del material.

La suma de todas las contribuciones gaussianas produce el espectro final de absorción (Saleh & Teich, 1991):

$$\alpha(E) = \sum_{ij} G_{ij}(E) \quad [13]$$

el cual refleja de manera directa la estructura electrónica del pozo cuántico. La forma, amplitud y anchura del espectro resultante dependen de los parámetros estructurales del pozo (espesor, concentración de indio, discontinuidades de banda) y de los valores de ensanchamiento elegidos. De esta manera, el espectro sintetizado permite comparar distintos diseños de pozos cuánticos y evaluar cómo los cambios geométricos y composicionales modifican la absorción óptica y la intensidad de cada transición.

Finalmente, este método facilita estudiar casos individuales de manera más detallada. Por ejemplo, al seleccionar una configuración particular de indio y ancho del pozo, es posible representar todas las transiciones electrón–hueco que contribuyen al espectro, mostrar la superposición de las funciones gaussianas y analizar cómo el espectro resultante cambia con variaciones en  $\sigma$  o en las energías de los niveles calculados. Esto permite ilustrar de forma clara el vínculo entre los parámetros estructurales del pozo y la respuesta óptica modelada, esto se puede evidenciar en el script 3.

## **6.4 Implementación computacional**

La implementación del modelo se desarrolló íntegramente en **Python**, organizando el flujo de trabajo en cuatro fases principales, cada una ejecutada mediante scripts o notebooks específicos. Este diseño modular permite modificar parámetros sin alterar el núcleo del código y asegura la reproducibilidad de los resultados.

### **6.4.1 Cálculo de niveles permitidos**

Script 1 (Anexos 1 y 2)

- Resuelve la ecuación de Schrödinger unidimensional para un pozo cuántico de ancho  $L$  y fracción de indio  $x$ .

- Calcula energías discretas para electrones y huecos con alturas de barrera diferenciadas (70 % para la banda de conducción, 30 % para la banda de valencia).
- Determina modos pares e impares y exporta los niveles obtenidos para su uso posterior.

#### **6.4.2 Obtención de espectros individuales y desviación estándar**

Script 3 (Anexo 3)

- A partir de los niveles obtenidos en los scripts anteriores, calcula las transiciones electrón–hueco y convierte las energías en longitudes de onda.
- Genera un espectro preliminar aplicando un ensanchamiento gaussiano.
- Evalúa el conjunto de longitudes de onda para obtener la desviación estándar  $\sigma$  realista, que define el ancho de las gaussianas en el espectro final.

#### **6.4.4 Construcción de espectros comparativos para diferentes longitudes del pozo**

Script 4 (Anexo 4)

- Integra los niveles y las desviaciones estándar de cada fracción optimizados para graficar espectros finales.
- Grafica en una sola figura los espectros de absorción correspondientes a diferentes espesores de pozo cuántico ( $L = 4 - 16 \text{ nm}$ ) para cada fracción de indio  $x$ .
- Este paso permite comparar directamente la variación del perfil espectral con la geometría del pozo y analizar las tendencias generales del sistema.

Para ilustrar el proceso realizado, se plantea el siguiente ejemplo: Para la condición particular de una fracción molar de indio  $x = 0.1$  y un espesor de pozo cuántico  $L = 10 \text{ nm}$ , se calcularon los niveles de energía permitidos tanto para la banda de conducción (electrones) como para la banda de valencia (huecos) utilizando el script 1 y 2. Las Figuras 6 y 7 muestran las soluciones par e impar obtenidas para la banda de conducción, donde las intersecciones entre las curvas trascendentes representan los estados cuantizados resultantes del modelo de pozo finito. De manera análoga, las Figuras 8 y 9 presentan las soluciones correspondientes para la banda de valencia, considerando las masas efectivas y profundidades de potencial apropiadas para este tipo de portador. Este procedimiento resolvió las ecuaciones trascendentes asociadas a las soluciones pares e impares del modelo de pozo finito, considerando las barreras de potencial correspondientes

a cada tipo de portador. En la banda de conducción, se identificaron cuatro estados permitidos ( $0,015\text{eV}$ ;  $0,059\text{eV}$ ;  $0,132\text{eV}$ ;  $0,24\text{eV}$ ), y seis en la banda de valencia ( $0,003\text{eV}$ ,  $0,014\text{eV}$ ,  $0,032\text{eV}$ ,  $0,056\text{eV}$ ,  $0,086\text{eV}$ ,  $0,117\text{eV}$ ), con energías cuantizadas específicas que servirán como referencia para la caracterización óptica.

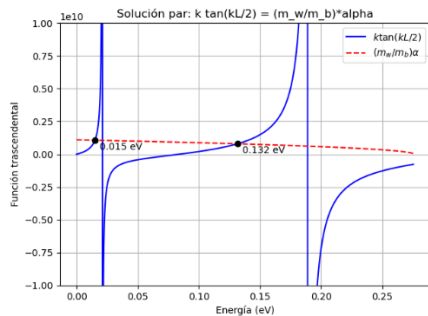


Figura 6; Solución par banda de conducción

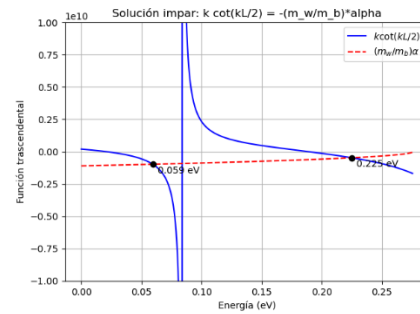


Figura 7; Solución impar banda de conducción

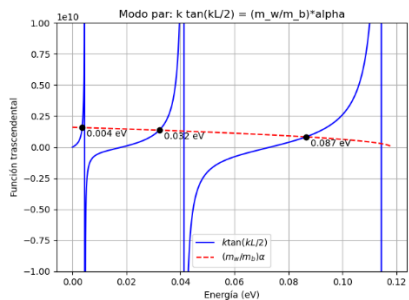


Figura 8; Solución par banda de valencia

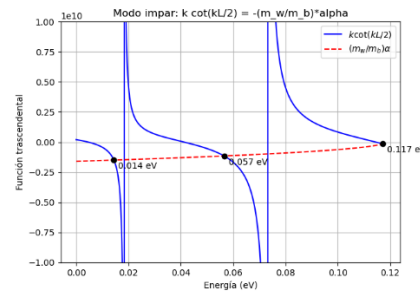
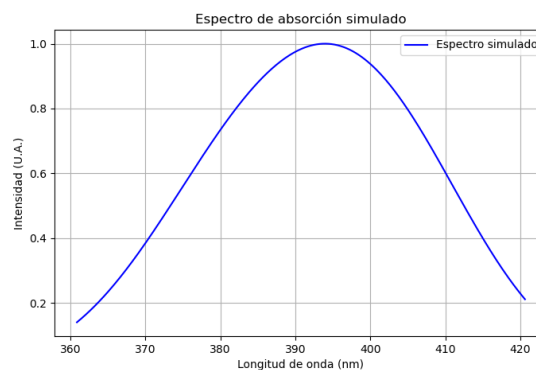


Figura 9; Solución impar banda de valencia

Posteriormente, estos niveles se incorporaron al script 3, en el que se transformaron las energías en longitudes de onda asociadas a las transiciones electrón-hueco permitidas. Para mejorar la representación espectral, se aplicó un ajuste gaussiano, cuya anchura fue determinada mediante la



desviación estándar calculada en el script 2 acorde a las longitudes de onda resultantes del script 2. Este proceso garantiza que el espectro simulado refleje de manera realista el ensanchamiento inherente a los estados discretos debido a factores como fluctuaciones composicionales y efectos térmicos.

*Figura 10; Espectro de absorción para  $x=0,1$  y  $L=10\text{nm}$*

Finalmente, tras repetir este procedimiento para los diferentes espesores de pozo ( $L = 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16\text{ nm}$ ), se utilizó el script 3 para graficar los espectros de absorción resultantes en una sola figura comparativa, lo que permite evaluar de manera directa la influencia simultánea del espesor y de la fracción molar de indio sobre el comportamiento óptico de las heteroestructuras.

### **6.3 Análisis de Resultados**

La etapa clave de la metodología consiste en contrastar los resultados obtenidos mediante las simulaciones computacionales con los datos experimentales reportados en la literatura científica, que incluyen tanto estudios teóricos como experimentales. Así, se permite validar el modelo numérico empleado – basado en la solución de las ecuaciones trascendentes- y verificar si las predicciones se alinean con las tendencias observadas en otros trabajos. Esto permite validar los modelos teóricos y confirmar si los datos simulados siguen las tendencias obtenidas en los experimentos, como, por ejemplo, el ajuste en el ancho de banda para la emisión de luz a diferentes longitudes de onda.

Al identificar discrepancias, se podrían ajustar las condiciones del crecimiento de la red cristalina o del mismo diseño de dispositivos. La comparación sistemática entre resultados experimentales y simulaciones computacionales no solo valida la hipótesis de investigación, sino que también identifica oportunidades para innovar en el diseño de dispositivos optoelectrónicos. Esta metodología integrada permite abordar los desafíos actuales en el desarrollo de materiales semiconductores y optimizar su desempeño en aplicaciones prácticas. La investigación sobre el GaN e InN continúa siendo un campo prometedor con amplias posibilidades para mejorar la eficiencia y sostenibilidad de tecnologías avanzadas.

## 7 Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos a partir de la modelación del pozo cuántico InGaN/GaN, incluyendo el cálculo de los niveles de energía permitidos y la construcción de los espectros de absorción asociados a distintas configuraciones estructurales. Los análisis realizados permiten evaluar cómo la composición de indio, el espesor del pozo y las discontinuidades de banda influyen en el confinamiento cuántico del electrón y en la respuesta óptica del sistema. A partir de estos resultados es posible identificar tendencias relevantes que contribuyen a comprender y optimizar el comportamiento fotoelectrónico de la heteroestructura.

### 7.1 Espectros de absorción

Con el fin de evaluar el comportamiento óptico de la heteroestructura InGaN/GaN, se realizaron simulaciones del espectro de absorción variando el espesor del pozo cuántico en el intervalo  $4 \leq L \leq 16 \text{ nm}$ , para diferentes concentraciones de indio en la aleación  $x = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2$ . Las gráficas obtenidas permiten analizar la relación entre el confinamiento cuántico, el contenido de indio y la eficiencia espectral del sistema.

#### Caso 1; fracción de indio $x = 0,05$

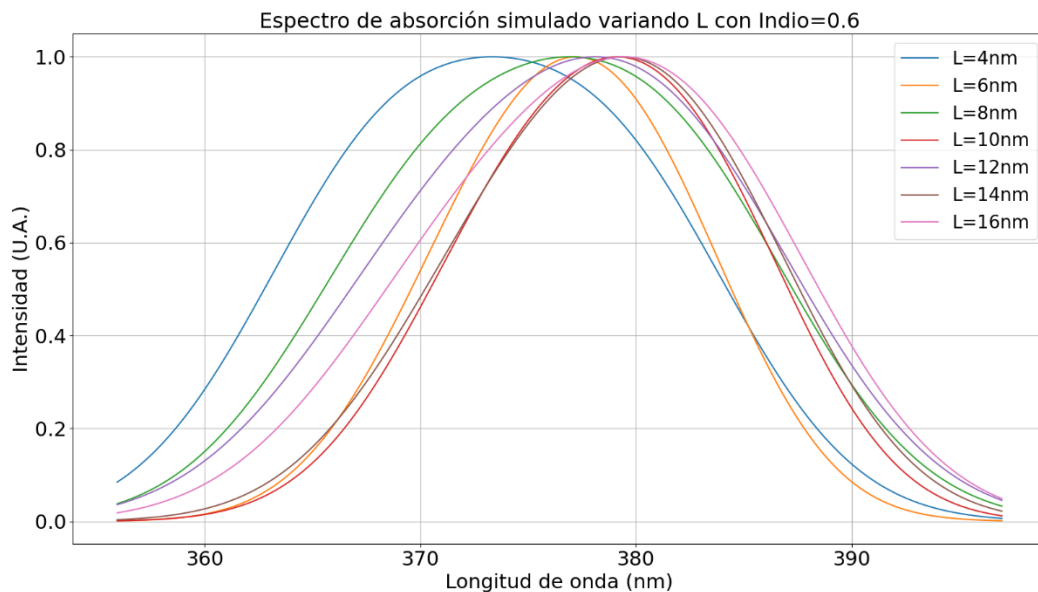


Figura 11; Espectros de absorción para  $x = 0,05$

En la fracción de indio  $x = 0.05$  el espectro de absorción conserva un comportamiento muy característico de materiales con un contenido reducido de indio: los picos son más estrechos y están concentrados en una región limitada del espectro. Todos los espesores muestran un máximo de absorción alrededor de 370–382 nm, sin desplazamientos significativos, lo que indica que en este rango la geometría del pozo tiene menos impacto sobre la posición del pico y domina el bandgap amplio propio de composiciones ricas en GaN.

Aunque el espesor del pozo modifica la forma de las curvas, las variaciones se mantienen moderadas. Los pozos delgados ( $L = 4\text{--}6\text{ nm}$ ) presentan perfiles más marcados y un ascenso más abrupto, propio de un confinamiento cuántico fuerte. A medida que aumenta el espesor, las curvas tienden a ensancharse ligeramente, pero sin llegar a cubrir regiones amplias del espectro, lo que confirma que la capacidad de modulación óptica es limitada cuando el contenido de In es tan bajo.

Este comportamiento refuerza que, para fracciones pequeñas como  $x = 0.05$ , el pozo cuántico ofrece una respuesta altamente selectiva y localizada, útil en aplicaciones donde se requiere precisión espectral —por ejemplo, filtros o emisores con longitudes de onda bien definidas— pero menos adecuado para dispositivos que necesitan captar regiones amplias del espectro visible.

### Caso 2; fracción de indio $x = 0,1$

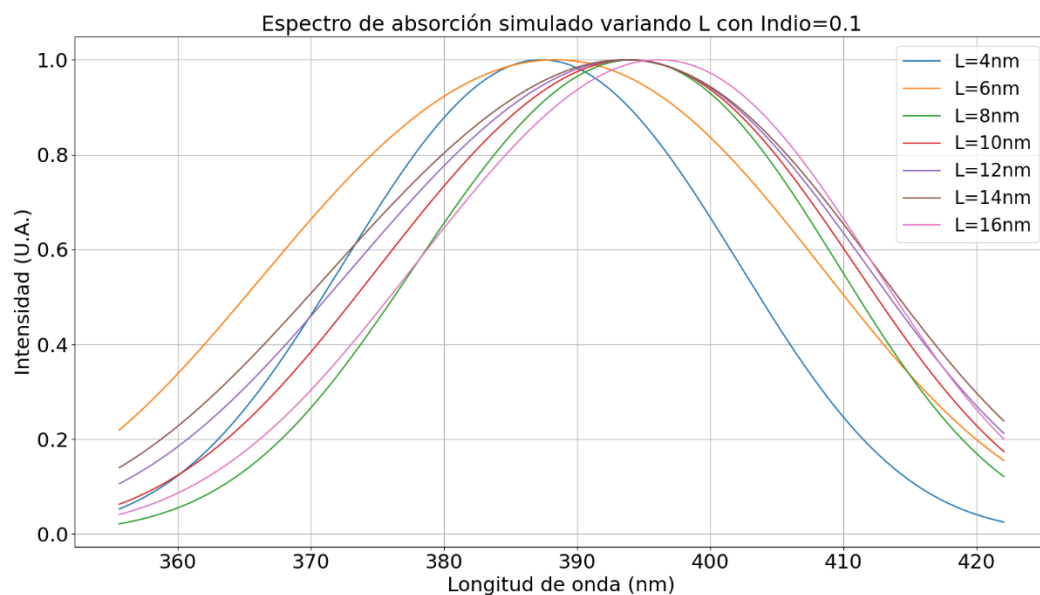


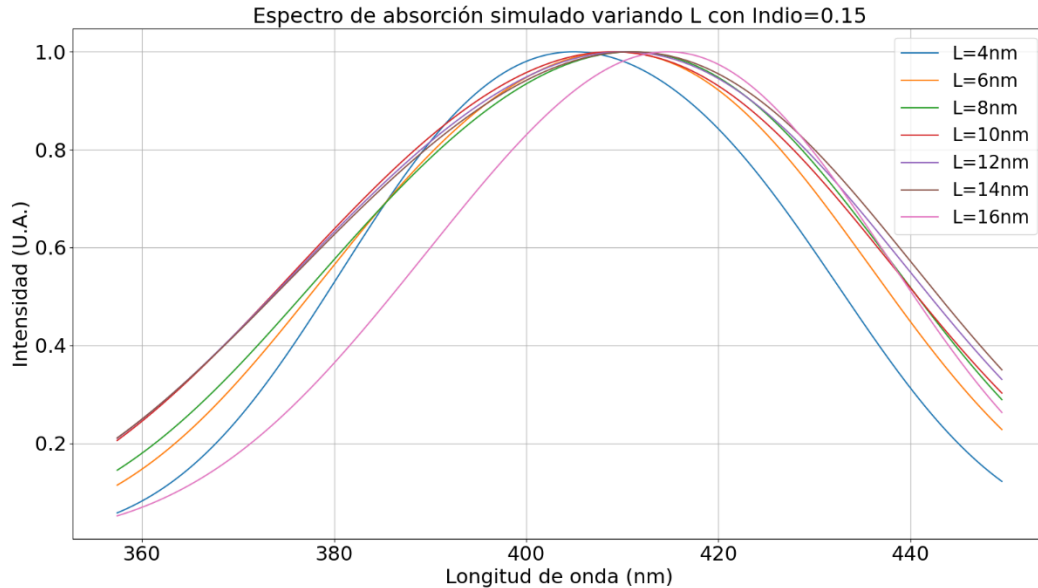
Figura 12; Espectros de absorción para  $x = 0,1$

En la fracción de indio  $x = 0,10$ , los espectros muestran un comportamiento más amplio y desplazado hacia longitudes de onda ligeramente mayores en comparación con el caso de menor indio. Esto significa que el material absorbe mejor la luz en una región un poco más “roja” del espectro, lo cual coincide con el objetivo general de entender cómo los cambios en la composición del pozo modifican sus propiedades ópticas. Además, se observa que los pozos más delgados concentran la absorción en un intervalo más estrecho, lo que está directamente relacionado con el estudio del confinamiento cuántico planteado en los objetivos específicos.

Cuando el espesor del pozo aumenta, las curvas se vuelven más amplias y abarcan una mayor cantidad de longitudes de onda. Este ensanchamiento indica que el pozo permite más niveles energéticos posibles, lo cual se traduce en una absorción más distribuida. Este resultado es importante para el objetivo de evaluar cómo la geometría del pozo —especialmente su ancho— influye en la eficiencia con que capta la luz. Las variaciones observadas en las curvas evidencian que no solo la composición, sino también el tamaño físico del pozo, tienen un papel determinante en el comportamiento óptico.

En conjunto, la fracción  $x = 0,10$  ofrece un equilibrio atractivo: mantiene un pico de absorción relativamente estable, pero permite modificar la amplitud y forma del espectro ajustando el espesor. Esto apoya la idea, presente en los objetivos del trabajo, de identificar configuraciones que puedan beneficiar el rendimiento de un dispositivo fotovoltaico. Las combinaciones intermedias como esta muestran que pequeños cambios en la estructura permiten adaptar la respuesta óptica, lo cual resulta muy útil para diseñar celdas solares que deban captar luz de distintas regiones del espectro.

### **Caso 3; fracción de indio $x = 0,15$**



*Figura 13;* Espectros de absorción para  $x=0,15$

Para la fracción de indio  $x = 0,15$ , los espectros de absorción muestran una respuesta más equilibrada entre intensidad y amplitud, en comparación con composiciones más bajas. Los máximos se concentran alrededor de 400–425 nm, reforzando la tendencia observada en valores crecientes de indio: a mayor contenido de In, el material absorbe luz en regiones ligeramente más largas del espectro. Este comportamiento está en línea con el objetivo general del trabajo, ya que demuestra cómo la composición química del pozo modifica directamente sus propiedades ópticas.

Al observar el efecto del espesor, se nota que los pozos más delgados presentan curvas más estrechas y pronunciadas, lo que indica una mayor selectividad en la absorción. A medida que el espesor aumenta, el espectro se ensancha y cubre un intervalo mayor de longitudes de onda. Este resultado es relevante para los objetivos específicos, pues evidencia que el ancho del pozo cuántico permite ajustar la distribución de luz absorbida sin alterar de manera drástica el valor del máximo. En particular, los espesores medianos y altos (10–14 nm) producen curvas amplias y estables, lo que representa un buen equilibrio para aplicaciones donde se busca una mayor cobertura espectral.

En conjunto, los resultados para  $x = 0,15$  muestran un punto de balance interesante entre la geometría ( $L$ ) y la composición ( $x$ ). Esta fracción de indio permite obtener espectros suficientemente amplios como para captar luz de distintas zonas del visible, pero manteniendo un pico de absorción bien definido. Esto responde directamente al propósito del estudio: identificar

configuraciones que mejoren el rendimiento fotovoltaico mediante un diseño estructural adecuado. En este caso particular,  $x = 0,15$  se perfila como una de las configuraciones más versátiles y prometedoras para optimizar la captación de luz en dispositivos solares basados en InGaN/GaN.

#### Caso 4; fracción de indio $x = 0,2$

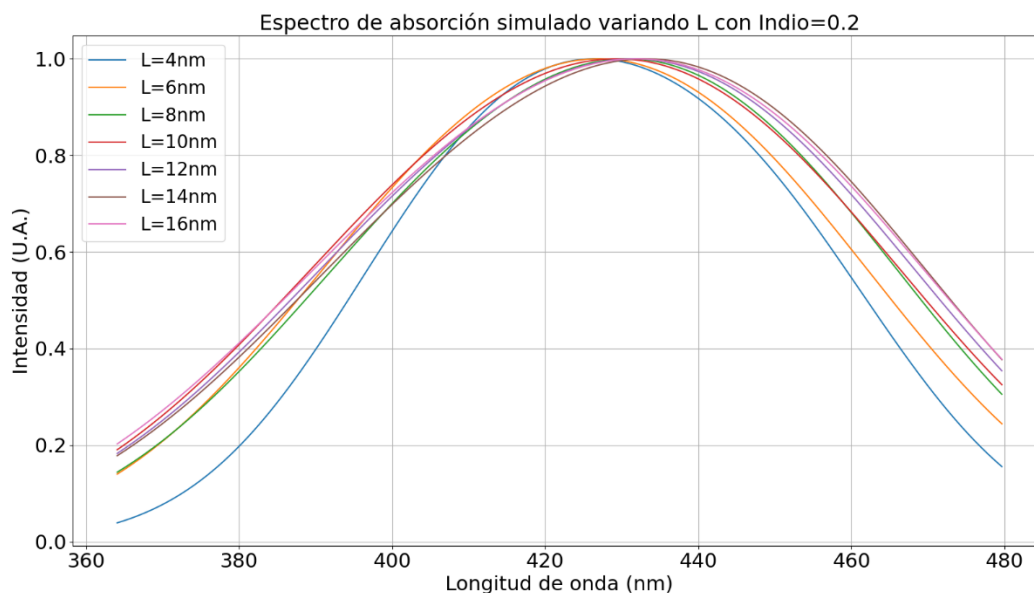


Figura 14; Espectros de absorción para  $x = 0,2$

Para la fracción de indio  $x = 0,20$ , los espectros de absorción muestran un desplazamiento hacia longitudes de onda ligeramente mayores en comparación con los casos de  $x = 0,10$  y  $x = 0,15$ . Los máximos se ubican alrededor de los 420–430 nm, lo que confirma que un incremento en el contenido de indio reduce el bandgap y, por tanto, desplaza la absorción hacia la zona roja del espectro visible. Este resultado contribuye directamente al objetivo general del estudio, ya que evidencia cómo la composición del pozo cuántico controla la sensibilidad óptica del material.

En cuanto al espesor del pozo, se observa un comportamiento más uniforme: las curvas para  $L \geq 8 \text{ nm}$  son muy similares entre sí, tanto en amplitud como en posición del máximo. Esto indica que, a partir de ciertos espesores, el sistema adquiere una respuesta más estable y menos sensible a variaciones geométricas. Por el contrario, el caso  $L = 4 \text{ nm}$  presenta una absorción más estrecha y menor intensidad, signo de un confinamiento cuántico más fuerte que reduce el rango de longitudes de onda captado. Estas observaciones se relacionan con el segundo objetivo específico, pues evidencian cómo la geometría del pozo modula la amplitud y forma del espectro.

En conjunto, la fracción  $x = 0,20$  representa un punto donde la absorción se vuelve amplia y robusta, manteniendo un máximo bien definido pero con una cobertura mayor del espectro visible. Este comportamiento sugiere que configuraciones en torno a este contenido de indio pueden resultar especialmente útiles para dispositivos fotovoltaicos que requieren captar más luz sin perder estabilidad en el pico principal. Además, el comportamiento cuasi-uniforme para espesores medianos y altos aporta información importante para el tercer objetivo específico, relacionado con cómo el confinamiento y la penetración de los estados influyen en el diseño del dispositivo: para  $x = 0,20$ , estos efectos se equilibran de forma favorable para aplicaciones reales.

### Caso 5; fracción de indio $x = 0,25$

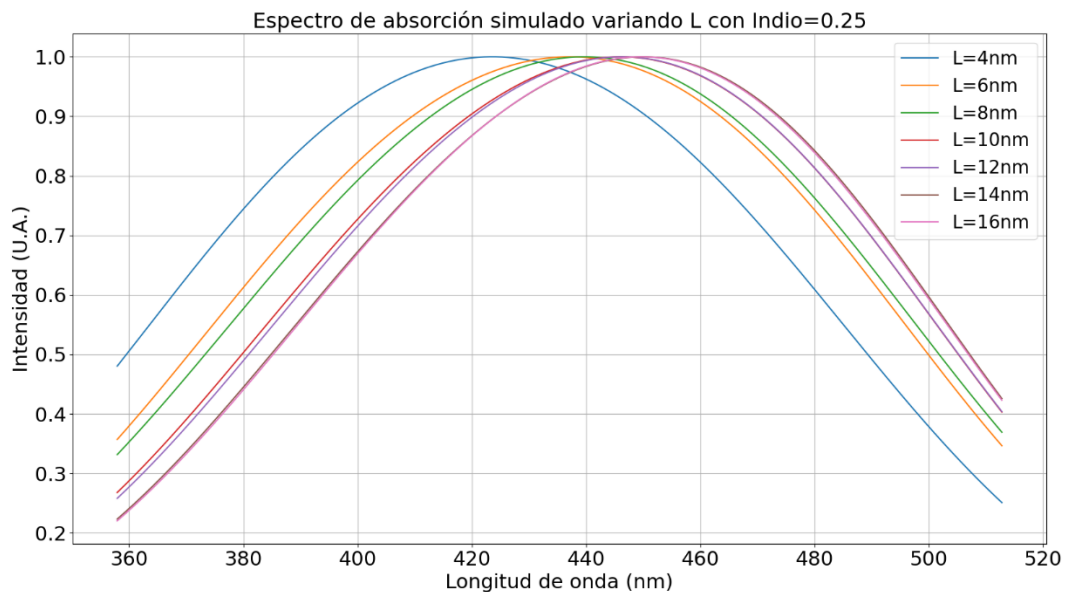


Figura 15; Espectros de absorción para  $x = 0,25$

Para la fracción de indio  $x = 0.25$ , los espectros de absorción muestran un desplazamiento evidente hacia longitudes de onda mayores. En todos los espesores analizados, el máximo de absorción se sitúa aproximadamente entre  $430 - 450 \text{ nm}$ , y la anchura del perfil aumenta ligeramente a medida que el pozo se hace más grueso. Aunque la absorción continúa siendo dominante alrededor de dicho máximo, las curvas presentan una extensión más suave hacia la región de  $470 - 500 \text{ nm}$ , sin que ello implique la aparición de nuevos picos, sino únicamente una cola espectral más amplia atribuida a la reducción de la brecha de energía y al ensanchamiento de las transiciones permitidas. Este resultado se relaciona directamente con el objetivo general, pues

demuestra cómo la composición del pozo afecta la capacidad del material para captar luz relevante para aplicaciones fotovoltaicas.

En relación con el espesor del pozo cuántico, el comportamiento para  $L \geq 10 \text{ nm}$  se vuelve más homogéneo: las curvas presentan formas muy similares, con un ensanchamiento que permite cubrir una región más amplia del espectro sin perder intensidad en el máximo. Por el contrario, los pozos delgados, especialmente  $L = 4 \text{ nm}$ , muestran una respuesta mucho más estrecha y una caída más rápida en ambos lados del pico, señal de un confinamiento cuántico más fuerte que reduce la flexibilidad espectral. Este punto es clave para el segundo objetivo específico, pues evidencia cómo la variación geométrica del pozo modula la amplitud y extensión del espectro.

En conjunto, el caso  $x = 0,25$  representa una transición hacia configuraciones donde la absorción no solo es intensa, sino también amplia y estable, lo que resulta especialmente valioso para dispositivos solares que necesitan captar mayor cantidad de luz a través de un rango más amplio de longitudes de onda. Además, los resultados sugieren que espesores medianos y altos ( $L \geq 10 \text{ nm}$ ) producen respuestas más robustas y apropiadas para arquitecturas fotovoltaicas basadas en superredes, en concordancia con el tercer objetivo específico, que busca identificar cómo el confinamiento y la profundidad de los niveles contribuyen al diseño final del dispositivo.

### Caso 6; fracción de indio $x = 0,3$

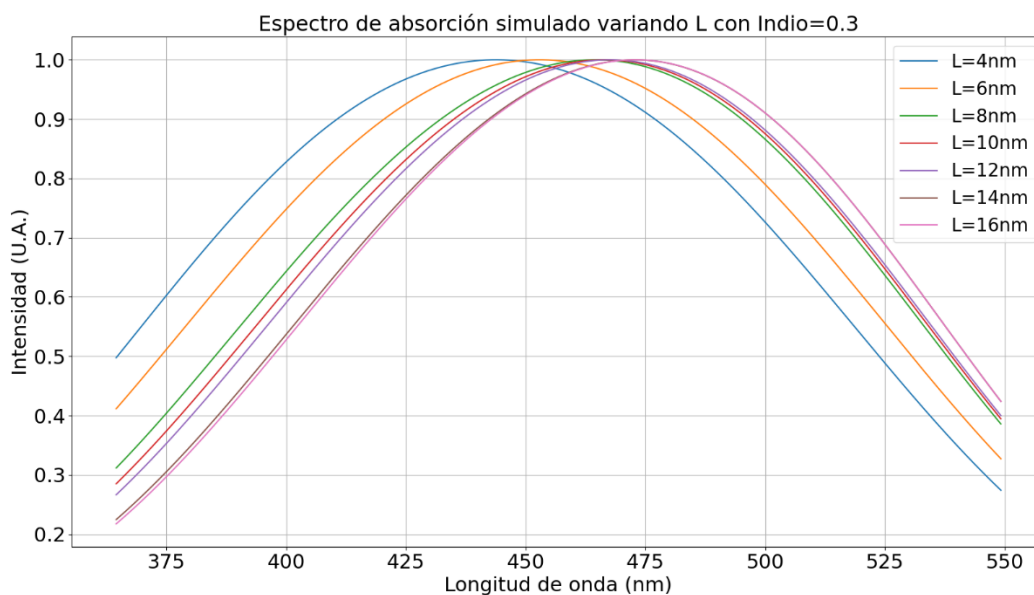


Figura 16; Espectros de absorción para  $x=0,3$

En la fracción de indio  $x = 0,30$ , los espectros de absorción muestran un desplazamiento notable hacia longitudes de onda más amplias, alcanzando máximos alrededor de los  $455 - 475\text{nm}$ . Este comportamiento indica una disminución progresiva de la brecha de energía, lo cual facilita que el material absorba luz de regiones más profundas del espectro visible. Los pozos más delgados, como los de  $4$  y  $6\text{ nm}$ , conservan una respuesta más estrecha y definida, con una caída pronunciada fuera del pico central. Esto refleja la influencia del confinamiento cuántico, que restringe la distribución de energías y concentra la absorción en un rango más limitado.

A medida que el espesor del pozo aumenta, especialmente a partir de  $10\text{ nm}$ , las curvas se vuelven más anchas y con formas similares entre sí. Se observa una mayor cobertura espectral, especialmente hacia longitudes de onda superiores a  $500\text{ nm}$ , lo que sugiere una distribución más amplia de estados disponibles para la absorción. Este ensanchamiento, más suave y continuo, también proporciona una mejor estabilidad del perfil espectral, un aspecto relevante cuando se busca captar una mayor cantidad de luz incidente en distintas condiciones.

En conjunto, la composición  $x = 0,30$  muestra un equilibrio interesante entre desplazamiento espectral, amplitud y estabilidad del máximo. Las configuraciones más gruesas permiten una respuesta más extendida y homogénea, mientras que las más delgadas preservan la selectividad y un mayor contraste cercano al pico de absorción. Esta combinación de comportamientos sugiere que esta fracción de indio puede adaptarse tanto a aplicaciones que requieren captación amplia como a aquellas que buscan un control más preciso sobre la región espectral de operación.

#### **Caso 7; fracción de indio $x = 0,35$**

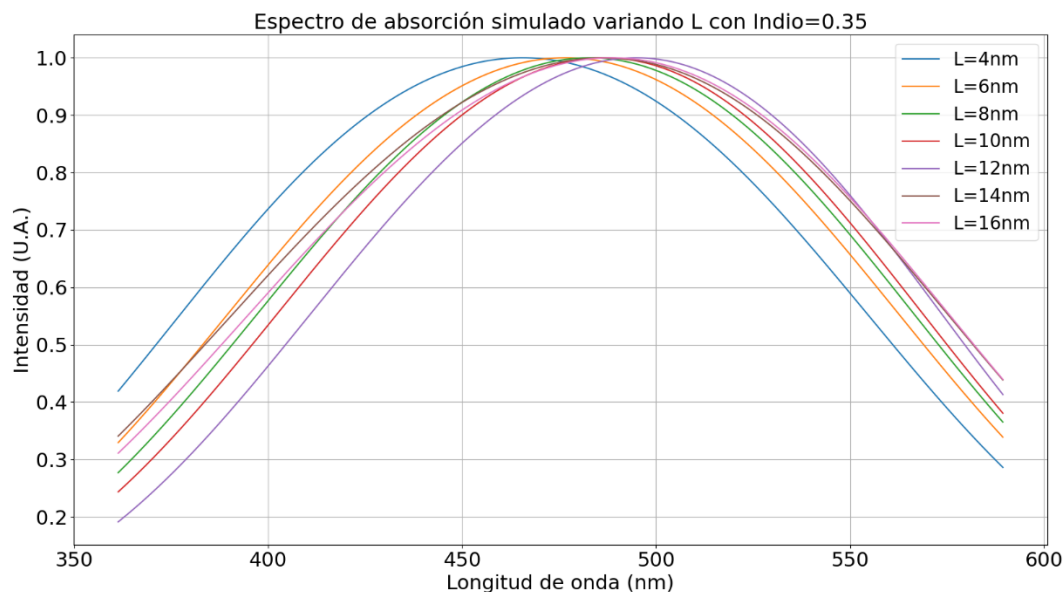


Figura 17; Espectros de absorción para  $x=0,35$

En la fracción de indio  $x = 0,35$ , los espectros de absorción muestran un desplazamiento aún más marcado hacia longitudes de onda largas, con máximos ubicados cerca de los 470 – 490 nm. Esta tendencia indica una reducción más pronunciada de la brecha de energía, lo que habilita al material para absorber luz de regiones más profundas del espectro visible. Los pozos delgados, especialmente el de 4 nm, mantienen un perfil más agudo y estrecho, evidenciando un confinamiento cuántico fuerte que concentra la absorción dentro de una franja limitada. Esto se refleja en la curva más alta y puntiaguda alrededor del máximo, seguida de una caída brusca.

Al aumentar el espesor del pozo por encima de 10 nm, los espectros adoptan una forma más amplia y homogénea, extendiéndose con suavidad hacia longitudes de onda superiores a los 500 nm. Esta expansión del rango de absorción es particularmente notable en las configuraciones de 12, 14 y 16 nm, que muestran curvas casi superpuestas y con diferencias mínimas entre sí. Este comportamiento indica que, en esta fracción de indio, el aumento de espesor reduce la influencia del confinamiento fuerte y favorece la formación de perfiles espectrales más estables, lo cual es útil cuando se busca captar luz en un rango más distribuido.

En conjunto,  $x = 0,35$  se presenta como una región de transición hacia composiciones más altas, donde el control del espesor adquiere un papel relevante para definir la forma final del

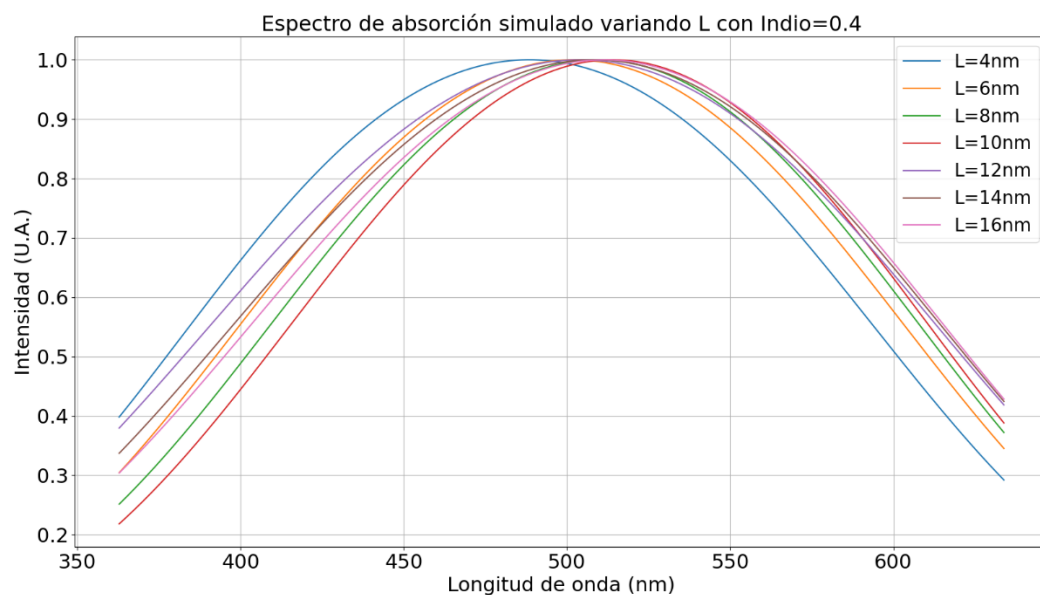
espectro. Mientras los pozos delgados priorizan la selectividad y mantienen una absorción más localizada, los pozos gruesos permiten una respuesta más amplia y continua, lo que ofrece flexibilidad para ajustar el comportamiento óptico según las necesidades del dispositivo.

### Fracciones elevadas de indio

Como parte complementaria del estudio se analizaron configuraciones de heteroestructuras InGaN/GaN con fracciones molares de indio superiores al 40 % ( $x = 0,40; 0,45; 0,50$  y  $0,60$ ), buscando explorar su impacto en el comportamiento óptico y la posible optimización para aplicaciones específicas. Este rango de composiciones es de particular interés, ya que se asocia a una reducción significativa de la brecha de energía efectiva, lo que genera un desplazamiento del espectro de absorción hacia longitudes de onda mayores y amplía el acoplamiento con el espectro solar en la región visible.

En este contexto, se evaluó la respuesta espectral para distintos espesores del pozo cuántico ( $L$ ), con el fin de identificar las condiciones que maximizan la absorción y equilibran la amplitud espectral con la intensidad máxima. El análisis de estos casos permite establecer tendencias claras sobre cómo interactúan el contenido de indio y la geometría de la estructura para optimizar el desempeño en celdas solares de alta eficiencia o en emisores ópticos de amplio espectro.

### Caso 8; fracción de indio $x = 0,4$



*Figura 18; Espectros de absorción para  $x = 0,4$*

En la fracción de indio  $x = 0,40$ , los espectros de absorción muestran un desplazamiento evidente hacia longitudes de onda aún mayores, con máximos que se ubican alrededor de los 500 nm. Este cambio indica una reducción más significativa de la brecha de energía respecto a los casos anteriores, permitiendo que la estructura absorba luz en regiones más extendidas del espectro visible. En los pozos delgados, especialmente el de 4 nm, la absorción conserva un perfil más estrecho y definido, concentrándose en una zona relativamente puntual y mostrando una caída rápida después del máximo.

A medida que los pozos aumentan su espesor, las curvas se vuelven más anchas y suaves, alcanzando longitudes de onda superiores a los 600 nm. En particular, los espesores de 12, 14 y 16 nm siguen patrones muy similares entre sí, formando un conjunto de curvas casi superpuestas que evidencian una absorción amplia y estable. Este ensanchamiento progresivo indica que, en esta composición, el confinamiento deja de dominar y se favorece una distribución más extendida de los estados energéticos, lo cual mejora la capacidad del material para captar luz en una zona espectral más amplia.

En conjunto, el comportamiento para  $x = 0,40$  sugiere que esta fracción de indio se encuentra en una zona especialmente favorable para diseños que buscan ampliar la cobertura espectral sin perder estabilidad en el máximo de absorción. Los pozos delgados continúan siendo útiles cuando se requiere precisión y selectividad, mientras que los pozos gruesos ofrecen una respuesta óptica más completa y uniforme, adecuada para dispositivos que necesitan captar luz de manera más distribuida en el espectro visible.

**Caso 9; fracción de indio  $x = 0,45$**

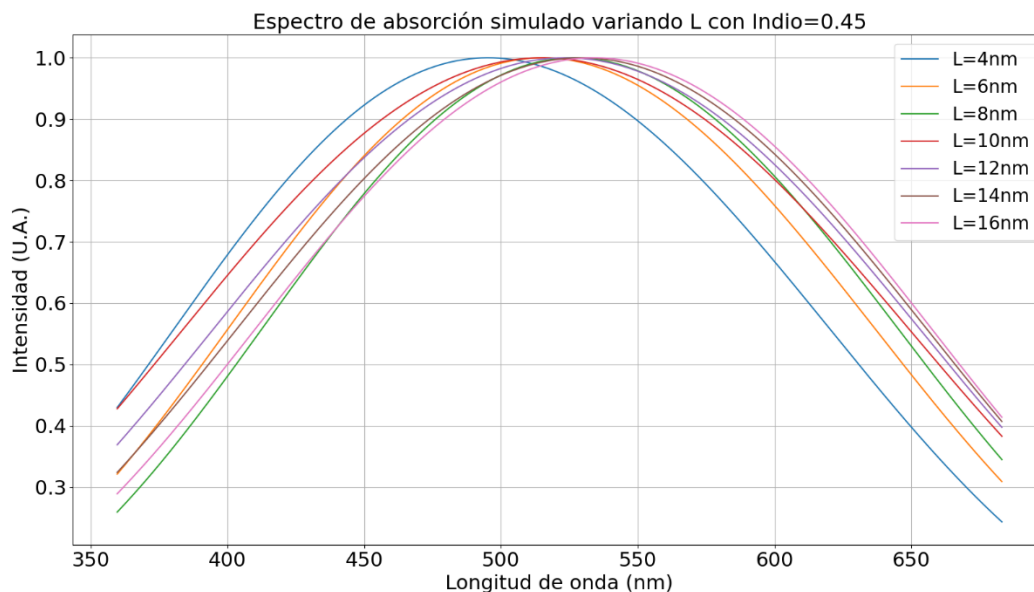


Figura 19; Espectros de absorción para  $x = 0,45$

En la fracción de indio  $x = 0,45$ , los espectros de absorción muestran una marcada tendencia hacia longitudes de onda más largas, con máximos que se sitúan alrededor de los 500 – 520 nm. Este comportamiento confirma que, a medida que aumenta la cantidad de indio en el pozo cuántico, la absorción se desplaza de forma constante hacia la zona verde del espectro visible. En los pozos más delgados, especialmente el de 4 nm, la absorción conserva un perfil relativamente estrecho, con un máximo bien definido seguido de una caída rápida, lo que refleja un confinamiento más intenso y una mayor sensibilidad a la variación de los niveles energéticos.

Al incrementar el espesor del pozo, las curvas adquieren perfiles más amplios y suaves, extendiéndose hasta valores cercanos a los 650 – 670 nm. Los espesores mayores (12, 14 y 16 nm) presentan comportamientos muy similares entre sí, formando un grupo de curvas casi paralelas que cubren una región espectral notablemente amplia. Este ensanchamiento sugiere que, en esta composición, la estructura comienza a favorecer una distribución más extendida de la absorción, permitiendo captar energía luminosa en un rango considerablemente mayor que en composiciones más bajas de indio.

En conjunto, el comportamiento para  $x = 0,45$  muestra que esta fracción representa un punto intermedio atractivo, capaz de combinar una absorción amplia con una forma del espectro relativamente estable. Los pozos delgados continúan siendo útiles cuando se busca una respuesta más concentrada, mientras que los pozos gruesos ofrecen una absorción mucho más extendida, adecuada para diseños que buscan cubrir varias regiones del espectro visible. Esta combinación de estabilidad y cobertura convierte a esta composición en una candidata especialmente favorable para aplicaciones que requieren un equilibrio entre eficiencia espectral y versatilidad en la captación de luz.

### Caso 10; fracción de indio $x = 0,5$

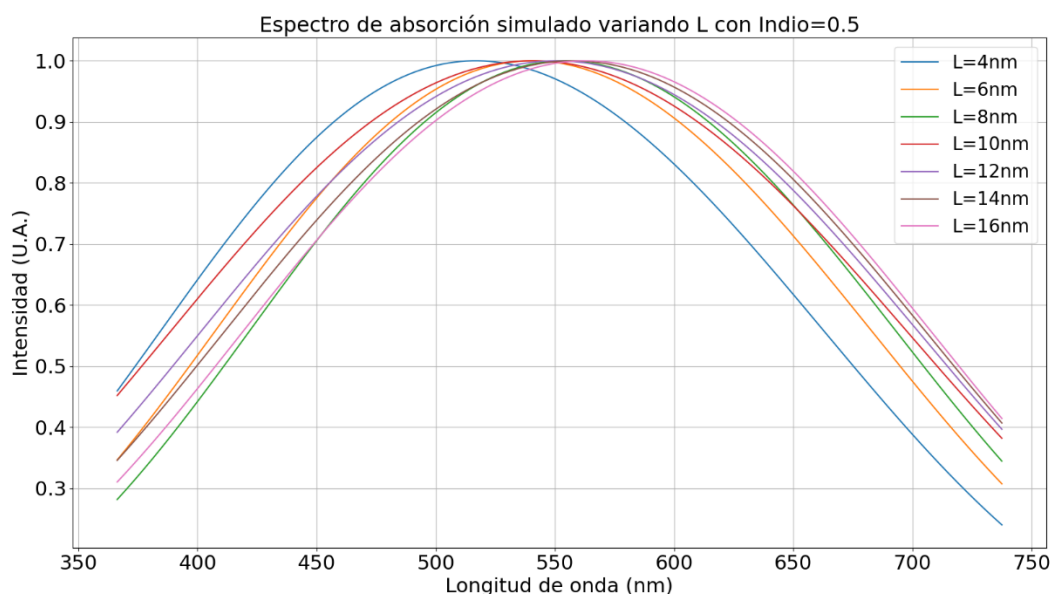


Figura 20; Espectros de absorción para  $x = 0,5$

En la fracción de indio  $x = 0,50$ , los espectros muestran un desplazamiento aún más pronunciado hacia longitudes de onda largas, con máximos que se ubican alrededor de los 530 – 550 nm. Este corrimiento indica que el material absorbe ahora en una zona más cercana al verde-amarillo del espectro visible. En los pozos más delgados, especialmente el de 4 nm, la absorción presenta un perfil más estrecho y una caída rápida hacia la región del rojo, lo que evidencia una mayor sensibilidad del confinamiento cuántico cuando el contenido de indio es elevado. La forma

de la curva muestra que pequeñas variaciones en el espesor pueden tener efectos notables en la distribución de la absorción.

En los pozos de espesor medio, como los de 8 y 10 *nm*, los espectros comienzan a formar perfiles más equilibrados. La absorción se ensancha y mantiene valores altos en un rango amplio, extendiéndose más allá de los 650 *nm*. Esta transición hacia curvas más estables sugiere que, en esta composición, los espesores intermedios logran un punto de equilibrio entre intensidad y cobertura, sin la variabilidad marcada observada en los pozos más finos.

Al llegar a los espesores mayores, como 12, 14 y 16 *nm*, las curvas se agrupan de manera uniforme y estable, ofreciendo una absorción extensa que se prolonga hasta cerca de los 700 – 720 *nm*. Este ensanchamiento notable permite cubrir regiones amplias del espectro visible y parte del infrarrojo cercano, algo especialmente útil cuando se busca captar la mayor cantidad posible de energía luminosa. Sin embargo, al mismo tiempo, esta amplitud puede ir acompañada de una ligera reducción en la intensidad máxima, reflejo de una distribución más extendida de los niveles energéticos.

En conjunto, la fracción  $x = 0,50$  muestra que las estructuras con contenido alto de indio pueden ofrecer una absorción muy amplia y versátil, especialmente cuando se emplean pozos gruesos. Los pozos delgados siguen siendo útiles cuando se necesita una respuesta más puntual, pero los espesores mayores permiten aprovechar mejor la luz disponible en un rango significativo del espectro, lo que convierte esta composición en una opción interesante para configuraciones donde la amplitud espectral es prioritaria.

### **Caso 11; fracción de indio $x = 0,55$**

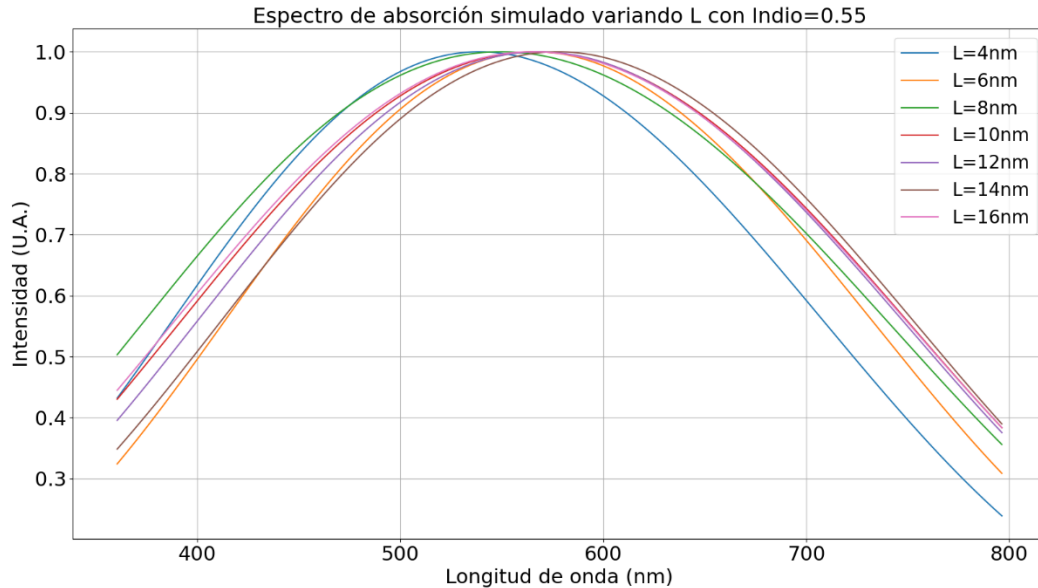


Figura 21; Espectros de absorción para  $x = 0,55$

En la fracción de indio  $x = 0,55$ , los espectros de absorción se desplazan de manera evidente hacia longitudes de onda más altas, con máximos que se ubican entre los  $540$  y  $570$  nm. Este corrimiento hacia la región amarillo-verdosa del espectro visible muestra cómo un aumento considerable de indio provoca que el material absorba luz en zonas cada vez más profundas del visible. En los pozos delgados, como el de  $4$  o  $6$  nm, la respuesta espectral conserva un perfil más estrecho y con mayor pendiente, lo que indica que el confinamiento cuántico sigue afectando fuertemente la distribución de la absorción. Estas configuraciones concentran la intensidad en una franja más delimitada, aunque sacrifican parte de la amplitud espectral.

A medida que el espesor del pozo aumenta, especialmente desde  $10$  nm en adelante, los espectros muestran una forma más amplia y uniforme. Las curvas mantienen valores altos de intensidad en un rango notablemente extendido, que se prolonga hasta aproximadamente los  $720 - 750$  nm, dependiendo del espesor. Esto sugiere que, con altos contenidos de indio, los pozos más gruesos permiten captar luz en una porción mayor del espectro visible y parte del infrarrojo cercano, lo cual puede resultar útil para aplicaciones que buscan aprovechar mejor la energía disponible en un amplio intervalo de longitudes de onda.

En los espesores más grandes —12, 14 y 16 nm— las curvas tienden a agruparse y mostrar un comportamiento más estable entre sí. La absorción se mantiene elevada en un tramo amplio del espectro, con una caída más lenta hacia la zona del rojo profundo. Aunque la intensidad máxima no aumenta, la amplitud general mejora, lo que indica que estas configuraciones logran una combinación favorable entre cobertura espectral y estabilidad. Los datos sugieren que, con un contenido de indio tan alto, las estructuras más gruesas son las que mejor aprovechan el ensanchamiento natural del espectro para ampliar la captación de luz, mientras que los pozos más delgados conservan una respuesta más selectiva.

En conjunto, la fracción  $x = 0,55$  evidencia una clara tendencia hacia espectros cada vez más amplios y desplazados hacia longitudes de onda largas, con un papel especialmente relevante del espesor del pozo en la forma final del perfil de absorción. Esto convierte esta composición en una opción interesante cuando se busca maximizar la cobertura espectral sin perder estabilidad en la respuesta óptica.

### Caso 12; fracción de indio $x = 0,6$

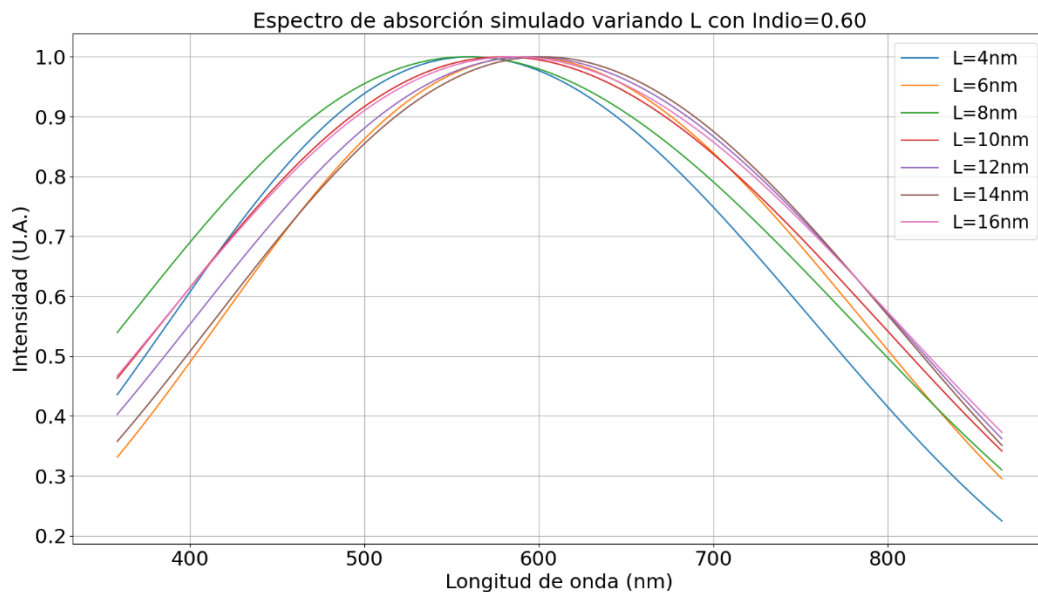


Figura 22; Espectros de absorción para  $x = 0,6$

En la fracción de indio  $x = 0,60$ , el espectro de absorción muestra un desplazamiento aún más pronunciado hacia longitudes de onda largas, con máximos que se sitúan alrededor de los

560 a 600 nm. Esta tendencia evidencia cómo, a medida que aumenta la concentración de indio, el material tiende a absorber luz en zonas más profundas del visible, alcanzando incluso regiones cercanas al rojo e infrarrojo cercano. En los pozos más delgados, como  $L = 4$  o  $L = 6$  nm, se observa una forma espectral más estrecha y con pendientes más marcadas en las zonas laterales. Esto indica que el confinamiento cuántico sigue siendo un factor relevante, concentrando la absorción en una franja relativamente limitada, aunque con una caída más rápida en los extremos del espectro.

A diferencia de los casos con indio moderado, aquí el ensanchamiento es evidente incluso en espesores intermedios. Pozos como  $L = 8$  o  $L = 10$  nm muestran perfiles amplios y una intensidad estable en una región extendida, que abarca desde aproximadamente 500nm hasta más allá de 750 nm. Esta característica resulta especialmente llamativa, pues sugiere que la estructura responde de forma más equilibrada ante luz de distinta energía, sin concentrar la absorción únicamente en zonas cercanas al máximo. Sin embargo, también se aprecia cierta sensibilidad: pequeñas variaciones en el espesor desplazan notablemente el inicio y la caída del espectro, lo cual indica que esta composición requiere mayor precisión estructural en aplicaciones reales.

Para los espesores más grandes - $L = 12, 14$  y  $16$  nm- las curvas tienden a agruparse y mostrar un comportamiento muy estable entre sí. Se mantiene una gran amplitud espectral, que se extiende de forma continua hacia los 800 nm, lo que implica una excelente cobertura óptica en casi toda la región visible y parte del infrarrojo cercano. Aunque la intensidad máxima no aumenta significativamente, la extensión del espectro es la mayor entre todas las composiciones analizadas. Esto sugiere que, en configuraciones con tanto indio, los pozos más gruesos permiten aprovechar mejor la estructura del material para captar luz en un rango extremadamente amplio, aunque con el costo potencial de una mayor sensibilidad a defectos o tensiones internas del cristal.

En conjunto, el comportamiento observado para  $x = 0,60$  confirma que los altos contenidos de indio generan espectros muy amplios y desplazados hacia longitudes de onda largas. El espesor del pozo sigue jugando un papel importante para ajustar la forma del espectro: los pozos delgados mantienen la selectividad, mientras que los gruesos favorecen la cobertura global. Esta composición representa el límite donde la ampliación del rango espectral es más notable, aunque también es la que probablemente requiere un mayor control estructural para mantener estabilidad en dispositivos reales.

Los resultados obtenidos mediante las simulaciones ópticas permitieron identificar con claridad cómo la fracción de indio y el espesor del pozo cuántico determinan la forma, anchura y posición de los espectros de absorción en heteroestructuras InGaN/GaN. En conjunto, estos hallazgos confirman que la modulación simultánea de ambos parámetros constituye una vía eficaz para ajustar la respuesta espectral del dispositivo y orientar su diseño hacia aplicaciones fotovoltaicas o fotónicas específicas.

Para valores muy bajos de indio ( $x = 0.05$ ), el comportamiento óptico se caracteriza por una alta selectividad espectral. Las curvas presentan picos estrechos alrededor de  $\sim 380 \text{ nm}$  y un ensanchamiento mínimo incluso cuando el espesor del pozo aumenta, lo que evidencia que el bandgap dominante del GaN y el débil acoplamiento cuántico limitan la extensión del espectro. Estas configuraciones, aunque poco favorables para captación multiespectral, pueden resultar útiles en dispositivos emisores o filtros ópticos donde se requiere una longitud de onda precisa y estable.

A medida que la fracción de indio aumenta hacia valores intermedios ( $x = 0.10 - 0.15$ ), se observa un equilibrio más favorable entre intensidad, simetría y cobertura espectral. En este intervalo, los cambios en el espesor del pozo tienen un efecto más significativo en el ensanchamiento de las curvas, permitiendo cubrir un rango mayor dentro del visible sin perder estabilidad del máximo de absorción. Esto sugiere que estas configuraciones representan un punto óptimo para aplicaciones fotovoltaicas que requieren sensibilidad multibanda y robustez estructural.

Cuando el contenido de indio alcanza valores moderados a altos ( $x = 0.20 - 0.45$ ), los espectros presentan un desplazamiento progresivo hacia longitudes de onda mayores junto con un ensanchamiento simétrico, principalmente para  $L \geq 10 \text{ nm}$ . Este comportamiento indica que la ingeniería del espesor del pozo se vuelve un elemento clave para maximizar la absorción y ajustar la región espectral de operación, manteniendo un compromiso aceptable entre cobertura y estabilidad.

Finalmente, para fracciones más elevadas ( $x = 0.50 - 0.60$ ), aunque la absorción cubre regiones aún más amplias del espectro y los picos se desplazan hacia el rojo, también aumenta la sensibilidad frente a variaciones en el espesor y a posibles defectos inducidos por tensiones de red y segregación de indio. En este rango, la optimización requiere mayor control epitaxial y un diseño cuidadoso de la estructura, especialmente para pozos delgados, en los que se aprecia un corrimiento hacia longitudes de onda más cortas debido al confinamiento cuántico.

En síntesis, los resultados corroboran la hipótesis planteada: la eficiencia cuántica y la cobertura espectral pueden optimizarse mediante el ajuste simultáneo de la composición de indio y del espesor del pozo cuántico. Los análisis evidencian que los rangos intermedios de ( $x = 0.10 - 0.15$ ) y los valores medios-altos ( $x = 0.40 - 0.45$ ) representan configuraciones especialmente prometedoras para celdas solares basadas en superredes activas, al combinar estabilidad estructural con una respuesta espectral amplia y controlable. Asimismo, se establece que composiciones muy bajas ( $x = 0.05$ ) deben considerarse para aplicaciones más específicas, mientras que composiciones muy altas ( $x \geq 0.50$ ) requieren estrategias de crecimiento más avanzadas.

Estas conclusiones consolidan el potencial de las heteroestructuras InGaN/GaN como plataformas ajustables y de alto rendimiento para dispositivos fotovoltaicos de nueva generación, ofreciendo una base sólida para futuras investigaciones que integren transporte de portadores, efectos térmicos y validación experimental. Con el fin de sintetizar las tendencias observadas en los espectros simulados, la Tabla 1 resume los principales comportamientos ópticos en función de la fracción de indio y del espesor del pozo, destacando cómo estas variables modifican tanto el confinamiento cuántico como el desempeño espectral global.

**Tabla 1. Resumen de tendencias espectrales en heteroestructuras InGaN/GaN simuladas**

Fracción de indio $x$	Longitud $L$ (nm)	Hallazgo principal	Desempeño espectral
<b>0.05</b>	4–10	Espectros estrechos y selectivos; picos en UV–violeta	Baja cobertura; útil en aplicaciones no solares
<b>0.05</b>	12–16	Ensanchamiento moderado y pico estable	Cobertura limitada pero controlable
<b>0.10</b>	4–6	Fuerte confinamiento y picos definidos	Cobertura reducida pero estable

---

<b>0.10</b>	8–10	Ensanchamiento progresivo	Adecuado para captación visible media
<b>0.10</b>	12–16	Cobertura amplia y simétrica	Buen desempeño multibanda
<b>0.15</b>	4–6	Líneas definidas, confinamiento marcado	Selectividad útil
<b>0.15</b>	8–10	Pico estable; buen balance espectral	Muy eficiente para celdas solares
<b>0.15</b>	12–16	Ensanchamiento uniforme	Alta amplitud y estabilidad
<b>0.20</b>	4–6	Confinamiento fuerte reduce intensidad	Cobertura limitada
<b>0.20</b>	8–10	Espectros amplios y definidos	Desempeño equilibrado
<b>0.20</b>	12–16	Ensanchamiento simétrico	Cobertura visible amplia
<b>0.25–0.35</b>	4–6	Confinamiento reduce intensidad	Poca utilidad en fotovoltaica
<b>0.25–0.35</b>	8–10	Mayor amplitud y estabilidad	Balance favorable
<b>0.25–0.35</b>	12–16	Alta cobertura visible	Alta eficiencia integrada
<b>0.40–0.45</b>	4–6	Picos sensibles a variaciones	Control difícil
<b>0.40–0.45</b>	8–10	Balance sobresaliente	Configuración altamente prometedora

---

<b>0.40–0.45</b>	12–16	Cobertura amplia y estable	Ideal para superredes
<b>0.50–0.60</b>	4–6	Picos estrechos; desplazamiento al azul	Alta sensibilidad a defectos
<b>0.50–0.60</b>	8–10	Amplios con menor intensidad	Buen desempeño teórico
<b>0.50–0.60</b>	12–16	Máxima cobertura	Riesgo estructural por segregación

En conjunto, los patrones sintetizados en la Tabla 1 ofrecen una base sólida para la selección de parámetros estructurales en el diseño de superredes activas o celdas solares con pozos múltiples, especialmente dentro de la región visible del espectro electromagnético. La clasificación de cada intervalo de  $x$  y  $L$  permite identificar configuraciones con mejor confinamiento, mayor estabilidad espectral o una cobertura más amplia según la aplicación deseada. Asimismo, estas tendencias sirven como punto de partida para futuras optimizaciones que integren efectos de transporte de portadores, recombinación no radiativa e influencia térmica, consolidando este enfoque como una herramienta predictiva eficaz para el diseño fotónico de dispositivos InGaN/GaN de nueva generación.

## 7.2 Perspectiva hacia el diseño de superredes de InGaN/GaN

Los resultados obtenidos a partir de pozos cuánticos individuales permiten comprender cómo la fracción molar de indio ( $x$ ) y el espesor del pozo ( $L$ ) influyen de manera directa en la posición y la forma de los espectros de absorción. Aunque estos pozos se analizaron de manera aislada, en dispositivos reales se emplean como unidades repetidas dentro de superredes (superlattices), donde los efectos se amplifican gracias al acoplamiento entre pozos consecutivos.

Una superred se construye mediante la repetición periódica de pozos y barreras con espesores nanométricos bien definidos. Esta periodicidad genera el acoplamiento entre los estados discretos de cada pozo, dando lugar a minibandas electrónicas y de huecos. En consecuencia, los

espectros dejan de estar limitados a picos únicos y pasan a transformarse en perfiles más continuos, con mayor cobertura dentro del rango visible.

Los espectros obtenidos en este estudio muestran que el ensanchamiento natural producido al aumentar  $L$ , junto con la progresiva variación de la absorción conforme se incrementa  $x$ , genera configuraciones especialmente útiles como bloques básicos de superredes. De acuerdo con los resultados actualizados:

- Para fracciones bajas ( $x \approx 0,05$ ), los espectros permanecen bien definidos, con máximos estrechos alrededor de  $\sim 380$  nm. Estos pozos podrían aportar estabilidad y selectividad cuando se integran en superredes donde se requiera control fino del confinamiento cuántico.
- En las fracciones intermedias ( $x \approx 0,10 - 0,20$ ), se observa un equilibrio notable entre estabilidad espectral, amplitud y suavidad del perfil. El máximo se desplaza lentamente hacia longitudes de onda mayores (390–430 nm), y la influencia del espesor del pozo produce un ensanchamiento moderado sin comprometer la intensidad máxima. Estos comportamientos los convierten en candidatos especialmente sólidos para superredes destinadas a cubrir de manera uniforme el visible cercano.
- En fracciones medias-altas ( $x \approx 0,25 - 0,45$ ), los espectros se vuelven más anchos y suaves, con máximos que pueden superar los 450–500 nm, dependiendo de  $L$ . La combinación periódica de pozos con estas características produciría minibandas de absorción amplias y progresivas, útiles para dispositivos multispectrales.
- En fracciones muy altas ( $x \approx 0,50 - 0,60$ ), la sensibilidad al espesor disminuye respecto a otras regiones, y los máximos se encuentran entre 500 y 580 nm. Aunque estas composiciones podrían aportar gran cobertura espectral en superredes, requieren mayor control epitaxial debido a la tendencia natural del In a generar tensiones o irregularidades estructurales.

En conjunto, estos resultados actualizados indican que el diseño de superredes basadas en configuraciones como las simuladas en este trabajo ofrece varias ventajas:

- Mayor cobertura espectral, al transformar picos aislados en minibandas continuas.
- Flexibilidad estructural, ya que la periodicidad y la relación pozo/barrera permiten refinar el perfil final de absorción.

- Adecuación para aplicaciones fotovoltaicas avanzadas, donde la eficiencia cuántica externa se beneficia de dispositivos capaces de captar simultáneamente distintas zonas del espectro solar.

## 8 Discusión

La presente investigación se propuso analizar cómo influyen la fracción de indio ( $x$ ) y el espesor del pozo cuántico ( $L$ ) en el comportamiento espectral de absorción de heteroestructuras InGaN/GaN orientadas a aplicaciones fotovoltaicas multispectrales. A partir de las simulaciones realizadas, se identificaron tendencias claras que permiten comprender el efecto combinado de ambos parámetros sobre la posición, amplitud y simetría del espectro de absorción.

En primer lugar, los resultados confirman que el incremento en la fracción de indio produce un desplazamiento progresivo del máximo de absorción hacia longitudes de onda mayores. Este comportamiento se explica por la reducción del bandgap efectivo  $E_g$  en aleaciones con mayor contenido de In, lo que facilita la absorción de fotones menos energéticos. En todas las simulaciones —desde  $x = 0,05$  hasta  $x = 0,60$ — se observó una tendencia consistente al corrimiento hacia el rojo, en concordancia con lo reportado en estudios experimentales y teóricos recientes. Esto evidencia que la composición del pozo puede utilizarse como una herramienta eficaz para ajustar la sensibilidad óptica del dispositivo hacia regiones específicas del espectro solar.

En segundo lugar, el espesor del pozo cuántico mostró un papel determinante sobre la forma del espectro. En composiciones bajas ( $x = 0,05 - 0,10$ ), los pozos delgados ( $L \leq 6 \text{ nm}$ ) generaron picos estrechos y bien definidos, característicos de sistemas altamente confinados. En contraste, al incrementar  $L$ , los espectros se ensancharon de manera progresiva, cubriendo rangos mayores del espectro visible. Esto revela una transición clara entre estados altamente confinados y estados más densos propios de pozos anchos, fenómeno coherente con la teoría cuántica de pozos finitos.

Sin embargo, este efecto cambió en composiciones más altas. Para  $x \geq 0,20$ , el ensanchamiento se vuelve más uniforme y menos sensible al aumento de  $L$ , debido a que los niveles electrónicos y de huecos se encuentran más cercanos energéticamente. En estos casos, el control del espesor del pozo resulta menos determinante que el contenido de indio, lo que sugiere que el diseño debe priorizar la estabilidad estructural antes que la selectividad espectral.

Un caso particularmente interesante se dio en las composiciones intermedias ( $x = 0,10 - 0,15$ ), donde las simulaciones muestran un balance notable entre corrimiento hacia el rojo, amplitud del espectro y estabilidad del pico máximo. Estas configuraciones produjeron espectros amplios, pero sin perder simetría ni intensidad relativa, lo que las convierte en opciones

---

especialmente favorables para dispositivos fotovoltaicos que requieren buena cobertura y mínima sensibilidad a imperfecciones estructurales.

Al comparar configuraciones con fracción moderada y alta de indio ( $x = 0,40 - 0,60$ ), se observó que  $x = 0,40$  y  $x = 0,45$  ofrecen un balance adecuado entre amplitud del espectro e intensidad máxima, especialmente cuando  $L \geq 12 \text{ nm}$ . Por el contrario, composiciones más elevadas ( $x = 0,50 - 0,60$ ) desarrollan espectros amplios, pero pierden estabilidad estructural y presentan mayor sensibilidad a la variación del espesor. Esto coincide con estudios que señalan la dificultad de mantener uniformidad cristalina en aleaciones InGaN con alto contenido de indio, debido a tensiones de red y riesgo de segregación.

Finalmente, al contrastar los resultados con la literatura científica, se encontró buena coherencia con modelos analíticos y simulaciones previas basadas en pozos finitos y masa efectiva. Asimismo, los desplazamientos espectrales y los cambios en anchura espectral coinciden con lo predicho por modelos dependientes del contenido de In, reforzando la consistencia del enfoque empleado. Estos resultados permiten proyectar la viabilidad de diseñar dispositivos de superredes y estructuras que optimicen la cobertura espectral mediante la combinación racional de grosor y composición, integrando gradientes de In o modulaciones de  $L$  según lo requieran aplicaciones multibanda.

En conjunto, los hallazgos obtenidos muestran que el ajuste simultáneo de  $x$  y  $L$  constituye una estrategia eficaz para modular el comportamiento óptico del sistema. Mientras que las composiciones bajas ofrecen espectros selectivos útiles para emisores o filtros, las composiciones medias e intermedias permiten obtener espectros equilibrados ideales para captación solar, y las composiciones altas brindan amplia cobertura, pero requieren control epitaxial riguroso. Con esta base, futuros trabajos podrán incorporar efectos térmicos, polarización piezoeléctrica o transporte de portadores para extender la comprensión del desempeño real de estas heteroestructuras bajo condiciones operativas.

## 9 Conclusiones

La presente investigación permitió analizar de manera detallada cómo la fracción de indio ( $x$ ) y el espesor del pozo cuántico ( $L$ ) modifican el comportamiento espectral de absorción en heteroestructuras InGaN/GaN, con el fin de evaluar su potencial para aplicaciones fotovoltaicas y optoelectrónicas. A partir de las simulaciones realizadas, se identificaron patrones consistentes y se establecieron tendencias que concuerdan con estudios experimentales y teóricos previos, reforzando la validez del modelo implementado.

En primer lugar, los resultados confirman que el aumento del contenido de indio produce un desplazamiento progresivo del espectro hacia longitudes de onda más largas. Este corrimiento al rojo se explica por la disminución de la brecha de energía efectiva a medida que crece la fracción molar de indio, lo cual permite ampliar la sensibilidad del dispositivo hacia regiones más profundas del espectro visible. Este comportamiento, presente en todas las configuraciones simuladas, valida el uso del contenido de indio como herramienta de ingeniería para ajustar la posición del máximo de absorción.

En segundo lugar, se observó que el espesor del pozo cuántico influye notablemente en la amplitud y la forma del espectro. Los pozos más delgados (4–6 nm) presentan perfiles estrechos y mayor selectividad espectral, propios de un confinamiento cuántico fuerte. Conforme  $L$  aumenta ( $\geq 10$ –12 nm), los espectros se ensanchan y cubren un rango mayor de longitudes de onda, lo que favorece la captación multibanda sin afectar de manera crítica la intensidad relativa en la mayoría de los casos simulados. No obstante, para composiciones altas de indio ( $x \geq 0,50$ ), el ensanchamiento viene acompañado de mayor sensibilidad estructural, lo cual puede limitar su implementación práctica si no se emplean técnicas de crecimiento epitaxial avanzadas.

Las configuraciones intermedias ( $x = 0,10$  y  $x = 0,15$ ) mostraron un comportamiento particularmente equilibrado, combinando amplitud espectral, estabilidad del pico de absorción e intensidad adecuada. Esta zona intermedia representa un compromiso atractivo para dispositivos que requieren eficiencia balanceada y buena respuesta multispectral. Por su parte, las configuraciones con baja fracción de indio ( $x = 0,05$ ) mantienen espectros estrechos y bien definidos, lo que las hace útiles para aplicaciones que demandan alta selectividad óptica.

En cuanto a las fracciones moderadas-altas ( $0,40 \leq x \leq 0,45$ ), los espectros mantienen un máximo estable alrededor de 500–520 nm, con un ensanchamiento simétrico y homogéneo que permite una amplia captación sin comprometer significativamente la intensidad relativa. Este rango

se destaca por combinar cobertura espectral, estabilidad del pico y menor riesgo de degradación estructural comparado con fracciones aún mayores. En cambio, con  $x \geq 0,55$ , los espectros presentan mayor sensibilidad al espesor y una tendencia más marcada al corrimiento hacia el azul en pozos delgados, evidenciando la relevancia del confinamiento cuántico aun en composiciones elevadas.

En síntesis, los resultados obtenidos permiten concluir que el comportamiento óptico de las heteroestructuras InGaN/GaN puede optimizarse mediante el ajuste simultáneo de la fracción molar de indio y del espesor del pozo cuántico. Se identifican como configuraciones especialmente prometedoras aquellas con indio moderado ( $x = 0,10-0,15$ ) y aquellas en la región media-alta ( $x = 0,40-0,45$ ) con espesores de  $L \geq 12$  nm, ya que dichas combinaciones ofrecen un equilibrio adecuado entre intensidad, estabilidad estructural y cobertura espectral. Estos hallazgos respaldan la hipótesis planteada y constituyen una base sólida para el diseño de superredes activas y dispositivos fotovoltaicos de nueva generación, así como para futuras simulaciones que integren efectos térmicos, de transporte de portadores y de recombinación.

## 10. Recomendaciones

Los resultados obtenidos permiten señalar líneas claras para continuar el desarrollo de heteroestructuras InGaN/GaN con un enfoque orientado al aprovechamiento óptico. Dado que la respuesta espectral depende de manera marcada tanto de la fracción de indio como del espesor del pozo, se recomienda que futuros trabajos amplíen los modelos hacia simulaciones que incorporen mecanismos de transporte y pérdida de portadores, con el fin de comprender mejor cómo estas estructuras podrían comportarse bajo condiciones reales de operación. Este tipo de análisis complementaría la caracterización espectral realizada y permitiría proyectar el rendimiento de manera más precisa.

Las configuraciones con valores intermedios de indio ( $0.15 \leq x \leq 0.35$ ) y espesores relativamente altos ( $L \geq 12$  nm) mostraron un comportamiento especialmente estable y amplio en el rango visible. Estos resultados sugieren que estructuras construidas a partir de estos parámetros tendrían un buen potencial para aplicaciones donde se busca capturar una porción extensa del espectro sin perder uniformidad en la respuesta óptica. Por su parte, las fracciones bajas ( $0.05 \leq x \leq 0.10$ ) mantienen espectros más definidos y estrechos, lo que las hace adecuadas para usos que requieren selectividad en la longitud de onda. En contraste, composiciones más altas ( $x \geq 0.50$ ) presentan una sensibilidad mayor a pequeñas variaciones en  $L$ , por lo que sería conveniente evaluar experimentalmente su viabilidad estructural y la estabilidad de sus propiedades ópticas durante el crecimiento.

También se recomienda profundizar en estudios sobre el impacto de la temperatura y del propio proceso de crecimiento sobre los estados confinados y el perfil espectral. La literatura evidencia que, cuando se trabaja con altos contenidos de indio, pueden aparecer variaciones que afecten la uniformidad y, por tanto, la calidad óptica del material. Considerar estos factores en simulaciones y ensayos experimentales contribuiría a validar o ajustar las configuraciones que, según los resultados actuales, se presentan como más prometedoras.

Finalmente, resulta pertinente explorar diseños alternativos que mejoren la interacción de la luz con el material sin necesidad de aumentar el espesor activo. Superficies texturizadas, geometrías tridimensionales o arreglos que favorezcan la dispersión controlada podrían incrementar la captación lumínica de estas estructuras, extendiendo el aprovechamiento óptico en un rango más amplio y estable. Estas aproximaciones complementan el estudio del pozo cuántico

realizado y abren nuevas rutas para el desarrollo de dispositivos basados en InGaN que respondan de manera eficiente a diversas condiciones de iluminación.

## 11. Referencias

- Abboudi, H., El Ghazi, H., Jorio, A., & Zorkani, I. (2021). Impurity-related photovoltaic efficiency of (In,Ga)N/GaN quantum well-single intermediate band solar cell considering heavy hole impact. *Superlattices and Microstructures*, *150*. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2020.106756>
- Alam, S., Sundaram, S., Li, X., El Gmili, Y., Elouneq-Jamroz, M., Robin, I. C., Patriarche, G., Salvestrini, J. P., Voss, P. L., & Ougazzaden, A. (2017). Emission wavelength red-shift by using “semi-bulk” InGaN buffer layer in InGaN/InGaN multiple-quantum-well. *Superlattices and Microstructures*, *112*, 279–286. <https://doi.org/10.1016/J.SPML.2017.09.032>
- Benslim, A., Meftah, A., Labed, M., Meftah, A., & Sengouga, N. (2021). Study and optimization of InGaN Schottky solar cell performance. *Optik*, *247*, 167984. <https://doi.org/10.1016/J.IJLEO.2021.167984>
- Cardona-Bedoya, J. A., Celemín Sanchez, H., Pulzara-Mora, Á., Cardona-Bedoya, J. A. ;, Celemín Sanchez, H. ;, Cardona-Bedoya, J. A., & Armando, J. (2021). Estudio de la influencia de la segregación de indio y del campo eléctrico interno en las propiedades ópticas de heteroestructuras de pozos cuánticos III-V. *Revista EIA*, *18*(36), 1–14. <https://doi.org/10.24050/reia>
- Cuadro, R. J., Teddy, A., & Buelvas, C. (2012). *SIMULACIÓN CON MATLAB Y SCILAB DE UN REACTOR TIPO TANQUE AGITADO. Autores.*
- Daudin, B., Bougerol, C., Camacho, D., Cros, A., Gayral, B., Hestroffer, K., Leclere, C., Mata, R., Niquet, Y. M., Renevier, H., Sam-Giao, D., & Tourbot, G. (2012). Growth, structural and optical properties of GaN/AlN and GaN/GaN nanowire heterostructures. *Physics Procedia*, *28*, 5–16. <https://doi.org/10.1016/J.PHPRO.2012.03.662>
- Dong, H., Jia, T., Liang, J., Zhang, A., Jia, Z., Jia, W., Liu, X., Li, G., Wu, Y., & Xu, B. (2020). Improved carrier transport and photoelectric properties of InGaN/GaN multiple quantum wells with wider well and narrower barrier. *Optics & Laser Technology*, *129*, 106309. <https://doi.org/10.1016/J.OPTLASTEC.2020.106309>
- Duarte, J. E., & Fernandez Morales, F. H. (2005). *La simulación por computador en investigación y desarrollo.*
- El Ghazi, H., Eker, Y. R., En-nadir, R., Zaki, S. E., & Mohamed, M. A. (2024). Enhancing performance of polar InGaN-based thin film solar cells through intrinsic layer impact

- optimization: Numerical modeling. *Results in Engineering*, 21, 101909. <https://doi.org/10.1016/J.RINENG.2024.101909>
- En-nadir, R., Kabatas, M. A. B. M., Tihtih, M., & El Ghazi, H. (2023). Linear and nonlinear optical absorption coefficients in InGaN/GaN quantum wells: Interplay between intense laser field and higher-order anharmonic potentials. *Heliyon*, 9(12), e22867. <https://doi.org/10.1016/J.HELIYON.2023.E22867>
- Gil, B. (1998). *Group III Nitride Semiconductor Compounds. Group III Nitride Semiconductor Compounds*.
- Gujrati, R., Karrakchou, S., Oliverio, L., Sundaram, S., Voss, P. L., Monroy, E., Salvestrini, J. P., & Ougazzaden, A. (2023). Design and fabrication process flow for high-efficiency and flexible InGaN solar cells. *Micro and Nanostructures*, 176, 207538. <https://doi.org/10.1016/J.MICRNA.2023.207538>
- Han, L., Kash, K., & Zhao, H. (2014). High-efficiency green light-emitting diodes based on InGaN-ZnGeN 2 type-II quantum wells . *Light-Emitting Diodes: Materials, Devices, and Applications for Solid State Lighting XVIII*, 9003, 90030W. <https://doi.org/10.1117/12.2038756>
- Heon Shin, S., Kim, D. K., Bae, S. bum, Lee, H. S., Lee, J. H., & Kim, D. S. (2024). Improvement of electrical performance in Normally-Off GaN MOSFET with regrown AlGaN layer on the Source/Drain region. *Solid-State Electronics*, 220, 108987. <https://doi.org/10.1016/J.SSE.2024.108987>
- Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State Physics* (Eighth edition).
- Li, Z., Roycroft, B., Kim, B., Hazarika, A., Genc, M., Min Lee, S., Hanser, D., & Corbett, B. (2024). Studies on suppressed surface recombination of InGaN-based red light-emitting diodes with V-pits. *Applied Surface Science*, 672, 160819. <https://doi.org/10.1016/J.APSUSC.2024.160819>
- McCluskey, M. D., Van de Walle, C. G., Romano, L. T., Krusor, B. S., & Johnson, N. M. (2003). Effect of composition on the band gap of strained In<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N alloys. *Journal of Applied Physics*, 93(7), 4340–4342. <https://doi.org/10.1063/1.1560563>
- Moneta, J., Kryśko, M., Domagała, J. Z., Grzanka, E., Muziol, G., Siekacz, M., Leszczyński, M., & Smalc-Koziorowska, J. (2024). Influence of GaN substrate miscut on the XRD

- quantification of plastic relaxation in InGaN. *Acta Materialia*, 276. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2024.120082>
- Nakamura, S., Mukai, T., & Senoh, M. (1994). Candela-class high-brightness InGaN/AlGaIn double-heterostructure blue-light-emitting diodes. *Applied Physics Letters*, 64(13), 1687–1689. <https://doi.org/10.1063/1.111832>
- Naranjo Vega Fernando. (2003). *Crecimiento, fabricación y caracterización de diodos electroluminiscentes basados en pozos cuánticos de InGaIn*.
- Nicoletto, M., Caria, A., De Santi, C., Buffolo, M., Huang, X., Fu, H., Chen, H., Zhao, Y., Meneghesso, G., Zanoni, E., & Meneghini, M. (2022). Role of p-GaN layer thickness in the degradation of InGaIn-GaN MQW solar cells under 405 nm laser excitation. *Microelectronics Reliability*, 138, 114727. <https://doi.org/10.1016/J.MICROREL.2022.114727>
- Pérez, F. R. & A.-G. S. M. (2024). *Light and matter, from pottery to quantum information*. IEEE.
- Pérez T. Jaime A. (2011). Propiedades estructurales y ópticas de compuestos (AlN, GaN, InN). *Revista Tumbaga*, 201–214.
- Razeghi, M. (2019). *Fundamentals of Solid State Engineering*. <https://doi.org/10.1007/978-3-319-75708-7>
- Roy, S., Tasmeeh Ahsan, S. M., Mondol, N., Mahmudul Hasan, M., Kundu, D., Mahmud Boby, S., Hassan, M., Sanwar Hossain, M., Rasidul Islam, M., Biplob Hossain, M., Dhar, S., & Amzad Hossain, M. (2022). Comparative investigation into key optoelectronic characteristics of semipolar InGaIn blue laser diodes: A strategy to mitigate quantum-confined Stark effect. *Results in Physics*, 34, 105246. <https://doi.org/10.1016/J.RINP.2022.105246>
- Saleh, B. E. A. ., & Teich, M. Carl. (1991). *Fundamentals of photonics*. Wiley.
- Singh Jasprit. (2003). *Electronic and Optoelectronic properties of semiconductor structures*. Cambridge University Press.
- Soley, S. S., Verma, S., & Khatri, N. (2025). Investigation of light trapping from P–N Interleaved Structure-based absorber layer for the efficiency enhancement of In<sub>0.4</sub>Ga<sub>0.6</sub>N homo junction solar cell. *Micro and Nanostructures*, 206. <https://doi.org/10.1016/j.micrna.2025.208250>
- Song, Y., Sun, H., Pan, P., Zhang, X., Zhao, D., & Zhou, M. (2024). Influence of low-temperature cap layer thickness on the structure and luminescence of InGaIn/GaN multiple quantum wells. *Micro and Nanostructures*, 194, 207943. <https://doi.org/10.1016/J.MICRNA.2024.207943>

- 
- Suzuki, N., Kouyama, K., Inose, Y., Kunugita, H., Ema, K., Sekiguchi, H., Kikuchi, A., & Kisino, K. (2009). Optical properties of InGaN/GaN SQD nanocolumn and InGaN nanocolumn. *Physics Procedia*, 2(2), 327–333. <https://doi.org/10.1016/J.PHPRO.2009.07.015>
- Tao, H., Xu, S., Zhang, Y., Su, H., Gao, Y., Liu, X., Ding, R., Xie, L., Wang, H., Zhang, J., & Hao, Y. (2024). Enhanced hole transport of nonpolar InGaN-based light-emitting diodes with lateral p-type superlattice doping structure. *Fundamental Research*. <https://doi.org/10.1016/J.FMRE.2024.03.028>
- Tapia-Rodríguez, L. E., Guevara-Macías, L. E., Lastras-Martínez, A., & Lastras-Martínez, L. F. (2023). Fabricación y caracterización de pozos cuánticos para el estudio de la interacción luz-materia. *CienciaUAT*, 06–23. <https://doi.org/10.29059/cienciauat.v17i2.1737>
- Tsai, C. L. (2016a). Effects of underlying InGaN/GaN superlattice structures on the structural and optical properties of InGaN LEDs. *Journal of Luminescence*, 174, 36–41. <https://doi.org/10.1016/J.JLUMIN.2016.01.033>
- Tsai, C. L. (2016b). Effects of underlying InGaN/GaN superlattice structures on the structural and optical properties of InGaN LEDs. *Journal of Luminescence*, 174, 36–41. <https://doi.org/10.1016/J.JLUMIN.2016.01.033>
- Vilbois, L. A., Cheknane, A., Bensaoula, A., Boney, C., & Benouaz, T. (2012). Simulation of a solar cell based on InGaN. *Energy Procedia*, 18, 795–806. <https://doi.org/10.1016/J.EGYPRO.2012.05.095>
- Wei, Z., Al-Nuaimi, N., & Gemming, S. (2025). Optimization of InGaN-based solar cells by numerical simulation: Enhanced efficiency and performance analysis. *Next Materials*, 6, 100325. <https://doi.org/10.1016/J.NXMATE.2024.100325>
- Yan, T., Li, J., Zhang, J., Li, M., & Hu, X. (2017). Experimentally study electron overflow from quantum wells into p-side GaN and its effect on the efficiency droop in InGaN/GaN blue-light-emitting-diodes. *Superlattices and Microstructures*, 109, 117–122. <https://doi.org/10.1016/J.SPML.2017.01.049>
- Yang, G. F., Zhang, Q., Wang, J., Lu, Y. N., Chen, P., Wu, Z. L., Gao, S. M., & Chen, G. Q. (2016). InGaN/GaN multiple quantum wells on selectively grown GaN microfacets and the applications for phosphor-free white light-emitting diodes. *Reviews in Physics*, 1, 101–119. <https://doi.org/10.1016/J.REVIP.2016.06.001>

- Yusof, A. S., Ould Saad Hamady, S., Hassan, Z., Ahmad, M. A., Ng, S. S., & Lim, W. F. (2024). IGaN based Schottky barrier solar cell: Study of the temperature dependence of electrical characteristics. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 172. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.108082>
- Zhang, M., Zhu, J., Li, J., Feng, H., Hu, D., Chen, X., & Li, Q. (2024). Chill and charge: A synergistic integration for future compact electronics. *Device*, 2(7), 100367. <https://doi.org/10.1016/J.DEVICE.2024.100367>
- Zhao, Y., Xu, M., Huang, X., Lebeau, J., Li, T., Wang, D., Fu, H., Fu, K., Wang, X., Lin, J., & Jiang, H. (2023). Toward high efficiency at high temperatures: Recent progress and prospects on InGaN-Based solar cells. In *Materials Today Energy* (Vol. 31). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.mtener.2022.101229>

## 12. Anexos

### 1 Cálculo de niveles permitidos

Script 1 (Anexos 1 y 2)

Banda de conducción:

<https://colab.research.google.com/drive/1eVYw4P5bXr0AXnndUWY4iXb4JnmK-1kI?usp=sharing>

Banda de valencia:

<https://colab.research.google.com/drive/18HI6z5qqiFs3zXsmMkKEbOCH294gsBB2?usp=sharing>

### 2 Obtención de espectros individuales y desviación estándar

Script 3

[https://colab.research.google.com/drive/1ct6h2JZ2RG3B\\_qK2mSnCJu7d6xftZN6b?usp=sharing](https://colab.research.google.com/drive/1ct6h2JZ2RG3B_qK2mSnCJu7d6xftZN6b?usp=sharing)

### 3 Construcción de espectros comparativos para diferentes longitudes del pozo

Script 4

<https://colab.research.google.com/drive/13nGU2OE0GLtVzqD6jMsJ1colN7E4dtmc?usp=sharing>