



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

**INSTITUTO DE INGENIERÍA
MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA**

***“ESTUDIO DE ENFRIAMIENTO ÓPTICO EN HETEROESTRUCTURAS
DE BAJA DIMENSIÓN DE Cds/CdTe”***

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA:

JULIO CÉSAR TARÍN CORDERO

DIRECTORES DE TESIS:

DR. CARLOS VILLA ANGULO

DR. ROGELIO ARTURO RAMOS IRIGOYEN

DEDICATORIA

A mi esposa Emma Luz Sagaste Rodríguez por todo el amor y paciencia brindados durante estos cuatro años que nos tocaron momentos buenos y difíciles que gracias a su apoyo logramos superar.

A mi hija Carolina porque siempre me andaba apurando a terminar este proceso de mi vida.

A mi hijo Julio César por no dejarme ver la televisión.

A mis padres Celia Yolanda Cordero Iribe y Tito Tarín Villa por la formación de valores que me dieron y por los ejemplos de responsabilidad y perseverancia.

AGRADECIMIENTOS

Al Doctor Carlos Villa Angulo por su apoyo en cada paso del proceso de mi doctorado, por sus enseñanzas tanto en cuestiones técnicas como en el plano humano y por su ejemplo de responsabilidad y dedicación al trabajo.

Al Doctor Rogelio Arturo Ramos Irigoyen por todo el apoyo brindado hacia mi persona tanto en el plano profesional como personal.

A la Universidad Autónoma de Baja California y al Instituto de Ingeniería, así como a sus cuerpos académicos, por permitirme un espacio y las facilidades brindadas para mi desarrollo en este proyecto.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo económico que me brindaron durante estos cuatro años lo cual me permitió completar el proceso doctorado.

RESUMEN

El mayor desafío para lograr temperaturas por debajo de 10° kelvin en materiales semiconductores a través de la conversión ascendente de fotoluminiscencia, es que a estas temperaturas, en los semiconductores los componentes de fonones-acústicos predominan y la tasa de dispersión de estos se vuelve comparable con la tasa de transición radiactiva de banda a banda. Este problema puede ser aliviado significativamente mediante el empleo de sistemas de confinamiento cuántico, donde la relajación de la conservación del vector de onda en la dirección de confinamiento reduce la magnitud de la conductividad del material casi tres veces su valor original. A pesar de que estudios previos han reportado análisis teóricos y experimentales de las características de enfriamiento óptico en materiales semiconductores burdos, la transición de electrones de banda a banda debido a la absorción y emisión de fotones en condiciones de enfriamiento óptico en sistemas de confinamiento exhiben efectos cuánticos debido a sus dimensiones de escala nano-métrica. Estos efectos no han sido completamente analizados en los estudios teóricos convencionales. En este trabajo, realizamos una investigación numérica de las condiciones de enfriamiento óptico en heteroestructuras de baja dimensión de CdS/CdTe con simple y múltiples cajas cuántica (MQW). En estas estructuras los portadores inyectados en la región activa son limitados a moverse mecánicamente en una dimensión (1D). Los efectos del confinamiento cuántico de cargas en el proceso de absorción de fotones y fotoluminiscencia se analizaron bajo condiciones de enfriamiento. Aún más importante, los espectros de absorción y fotoluminiscencia de la heteroestructura de CdS/CdTe para condiciones de enfriamiento se definieron en términos del espesor de la capa absorbidora (capa activa) y el número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa.

ABSTRACT

The major challenge for semiconductors to achieve temperatures below 10 kelvin, by luminescence up-conversion, is that at these lattice temperatures the acoustic phonon component dominates and the scattering rate becomes comparable to the band-to-band radiative transition rate. This problem can be significantly alleviated by employing quantum-confined systems, where relaxation of wave-vector conservation in the confined direction reduces material conductivity by nearly three orders of magnitude. Although, previous studies have reported theoretical and experimental analyses of cooling characteristics for bulk semiconductors, the electron band-to-band transition due to photon absorption or photon emission, under cooling conditions in quantum-confined semiconductor systems, which exhibit quantum effects at the dimensions of several nanometers have not been completely analyzed in conventional theoretical studies. In this paper, we realized a numerical investigation of optical cooling conditions for a low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well (MQW) heterostructure where injected carriers in the active region are quantum mechanically confined in 1D. Effects of such quantum mechanically confined carriers on photon absorption and photoluminescence were analyzed under cooling conditions. Most importantly, the CdS/CdTe heterostructure absorption and photoluminescence spectra for cooling conditions were defined in terms of the active layer width and number of quantum wells in the complete heterostructure.

CONTENIDO	PAG.
I. DEDICATORIA	i
II. AGRADECIMIENTOS	ii
III. RESUMEN	iii
IV. ABSTRACT	iv
CAPÍTULO 1. MARCO TEÓRICO	
1.1 ANTECEDENTES	1
1.2 ENFRIAMIENTO DE SÓLIDOS	4
1.2.1 ENFRIAMIENTO DE SÓLIDOS DOPADOS CON TIERRA RARAS	4
1.2.2 ENFRIAMIENTO DE SÓLIDO POR RADIACIÓN BALANCEADA	5
1.2.3 ENFRIAMIENTO ÓPTICO EN SEMICONDUCTORES	6
1.3 HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe	8
1.3.1 HETEROESTRUCTURA DE CAJA CUÁNTICA SIMPLE (QW)	8
1.3.2 HETEROESTRUCTURA DE CAJAS CUÁNTICAS MÚLTIPLES (MQW)	9
1.4 DIAGRAMA DE ENERGÍA VS MOMENTO DE HETEROESTRUCTURAS DE CdS/CdTe	9
1.4.1 PARA UNA CAJA CUÁNTICA SIMPLE (QW)	9
1.4.2 PARA CAJAS CUÁNTICAS MÚLTIPLES (MQW)	11
1.5 CRITERIOS DE TRANSICIÓN DE BANDA A BANDA	12
1.5.1 SELECCIÓN ESTRICTA DE MOMENTO	13
1.5.2 SIN SELECCIÓN DE MOMENTO	13
1.5.3 CON SELECCIÓN PARCIAL DE MOMENTO	14
1.6 CÁLCULO DE LOS NIVELES DE ENERGÍA ESTÁTICOS EN UN POZO CUÁNTICO	15
1.7 COEFICIENTE DE ABSORCIÓN BASADO EN EL CRITERIO DE SELECCIÓN PARCIAL DE MOMENTO	17
CAPÍTULO 2. INTRODUCCIÓN	
2.1 JUSTIFICACIÓN DEL ESTUDIO	22
2.2 OBJETIVOS	23
2.2.1 OBJETIVOS GENERALES	23
2.2.2 OBJETIVOS PARTICULARES	24
2.3 HIPÓTESIS	24

CAPÍTULO 3. DESARROLLO Y SIMULACION

3.1 INTRODUCCION	26
3.2 FORMULACION TEORICA	27
3.3 CALCULOS Y RESULTADOS	31
3.3.1 VALOR DE LOS PARAMETROS UTILIZADOS EN LOS CALCULOS	31
3.3.2 PRIMER Y SEGUNDO NIVEL DE ENERGÍA EN LA BANDA DE CONDUCCIÓN DE LA HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe	32
3.3.3 PRIMER Y SEGUNDO NIVEL DE ENERGIA EN LA BANDA DE VALENCIA DE LA HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe	33
3.3.4 CALCULO DEL COEFICIENTE DE ABSORCION DE LA HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe	33
3.3.5 CALCULO DE LA FOTOLUMINISCENCIA Y ABSORCION CON RESPECTO AL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA	35
3.3.6 CALCULO DE LA DENSIDAD DE POTENCIA CONTRA EL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA	37
3.3.7 CALCULO DE LA DENSIDAD DE POTENCIA CONTRA EL NUMERO DE CAJAS CUANTICAS EN LA HETEROESTRUCTURA	37
3.3.8 CÁLCULO DEL GRADIENTE DE TEMPERATURA ALCANZADO CONTRA EL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA	38
3.3.9 CÁLCULO DE LA EFICIENCIA DE ENFRIAMIENTO CONTRA EL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA	39

CAPÍTULO 4. PRESENTACION DE LAS PUBLICACIONES REALIZADAS

4.1 PUBLICACIÓN #1: <i>“Low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well hetero-structure for optical refrigeration”</i>	40
4.1.1 PARTICIPACION DE CADA AUTOR EN LA PUBLICACION	41
4.2 PUBLICACIÓN #2: <i>“Comparison of Bamboo and Cotton Performance in Warm Environment ”</i>	42
4.2.1 PARTICIPACION DE CADA AUTOR EN LA PUBLICACION	42

CAPÍTULO 5. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

5.1. CONCLUSIONES	44
5.2. TRABAJO FUTURO	45

ANEXOS

ANEXO 1 (Low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well heterostructure for optical refrigeration)

ANEXO 2 (Comparison of Bamboo and Cotton Performance in Warm Environment)

CAPÍTULO 1.

MARCO TEORICO

1.1 ANTECEDENTES

En el presente trabajo el término enfriamiento óptico “Optical Cooling” o enfriamiento laser “Laser Cooling”, lo cual no implica el enfriamiento de la luz o del láser, es usado para describir el enfriamiento de átomos o iones, por efectos opto-térmicos, a temperaturas extremadamente bajas. Hay diferentes métodos de enfriamiento óptico de átomos o iones, por ejemplo, enfriamiento Doppler [1], donde la intensidad de la luz incidente es la principal fuente para el proceso de absorción y posterior emisión espontanea de fotones. La tasa de estos procesos depende del efecto de corrimiento Doppler (Doppler shift) en la temperatura de los átomos o iones. Este método está limitado en términos de la temperatura alcanzable por el límite Doppler. El enfriamiento Sisyphus [2], el cual implica un gradiente de polarización por lo que a veces se le llama gradiente de polarización refrigerante, el cual permite obtener sustancialmente temperaturas por debajo del límite Doppler.

Esta área de la ciencia ha progresado rápidamente en las últimas tres décadas y ha facilitado la observación de la condensación Bose-Einstein y otros fenómenos relacionados [3], [4]. Es sorprendente que ha poco más de medio siglo de haber observado el enfriamiento Doppler de átomos y más de treinta y cinco años antes de la invención del láser, el físico Alemán Peter Pringsheim propuso el enfriamiento de solidos por fluorescencia (up-conversión) [5]. Se ha demostrado que algunos materiales emiten luz en longitudes de onda más cortas que aquella con la que el material es iluminado debido a interacciones termales (fonones) con los átomos excitados, tal como se muestra en la Figura 1. Electrones de la banda de valencia hacen la transición a la banda conducción absorbiendo un fotón con energía $h\nu$ de la luz incidente. Los electrones en la banda de conducción experimenta un intercambio de energía a través de colisiones inelásticas absorbiendo vibraciones térmicas del material. Después de ganar energía en las colisiones, electrones de la banda de conducción decaen a la banda de valencia emitiendo fotones incoherentes con longitud de onda disminuida (incoherent blueshifted photon) con energía $h\nu_f$ la cual es generada a través de recombinación radiactiva disipando calor del material. Como resultado, el material es enfriado por la luz incidente [5].

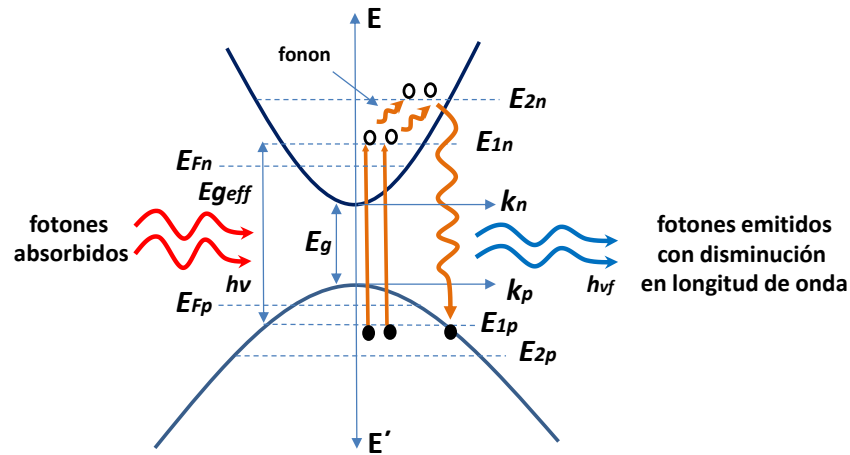


Figura 1. Diagrama esquemático del ciclo de enfriamiento óptico de sólidos.

Este proceso fue llamado fluorescencia anti-Stokes, en oposición a la fluorescencia Stokes en la que la longitud de onda emitida es mayor que la absorbida. Ya que la fluorescencia anti-Stokes implica la emisión de fotones de energía más altos que aquellos que fueron absorbidos, la fluorescencia anti-Stokes neta puede provocar la eliminación de la energía térmica a partir del material iluminada y, como consecuencia, su refrigeración. Por supuesto, es esencial que la eficiencia cuántica sea alta, y que casi toda la luz de fluorescencia anti-Stokes pueda dejar el material sin ser reabsorbida. Contrariamente a lo que sucede en los gases, donde las partículas (moléculas, átomos, iones, electrones, etc.) están en movimiento aleatorio, en los sólidos, los átomos no tienen movimiento de traslación relativa. En los sólidos la energía térmica se encuentra en gran medida en los modos vibratorios de la red estructural del material (fonones). Enfriamiento láser de sólidos (también llamado refrigeración láser, refrigeración óptica o enfriamiento por fluorescencia anti-Stokes) es similar al enfriamiento láser de átomos y iones: fotones en el lado rojo del espectro son absorbidos a partir de una fuente monocromática seguidos de fluorescencia anti-Stokes de fotones con corrimiento al azul con mayor energía. Estos fotones anti-Stokes remueven los fonones del material y por consiguiente lo enfrían.

Esta idea del enfriamiento óptico de sólidos estimuló una discusión entre Vavilov y Pringsheim relativo al aspecto termodinámico de este proceso. Vavilov creía [6], [7] que el enfriamiento óptico de sólidos por fluorescencia anti-Stokes contradecía la segunda ley de la termodinámica. Vavilov argumentaba que el ciclo, el cual incluye la excitación y la fluorescencia, es un ciclo reversible y el rendimiento de energía mayor que la unidad sería equivalente a la transformación completa de calor

en trabajo. Pringsheim por el contrario argumentaba [8] que en el enfriamiento anti-Stokes, un haz de entrada monocromático y unidireccional se transforma en la fluorescencia de banda ancha isotrópica, y por lo tanto este proceso debe ser irreversible. En 1946, Landau [9] llegó a la conclusión de esta controversia, proporcionando una teoría termodinámica del proceso considerando la entropía de la luz incidente y dispersada. Usando la estadística de Bose calculó una temperatura efectiva para la radiación llegando a la conclusión de que es posible que la producción de energía exceda la unidad. En 1950, Kastler [10] y en 1961, Yatsiv [11] sugirieron utilizar sólidos dopados con tierras raras (RE) para el enfriamiento por láser. La ventaja principal de los iones de tierras raras es que los electrones ópticamente activos (4f) son protegidos por los de las capas llenas (5s) y capas exteriores (5p), que limita la interacción con la red que rodea el ion de las tierras raras y suprime la decadencia no-radiativa. Materiales anfitriones con baja energía de fonones, por ejemplo, vidrios y cristales de fluoruro, pueden disminuir la decadencia no-radiativa y aumentar la eficiencia cuántica. En 1968, Kushida y Geusic [12] en un intento de enfriar un cristal de Nd³⁺:YAG observaron una reducción del calentamiento. El enfriamiento neto por fluorescencia anti-Stokes en materiales sólidos fue observado experimentalmente por primera vez hasta 1995 por el equipo de investigación de Epstein en el Laboratorio Nacional de Los Alamos (LANL) en un vidrio de fluorocirconato dopado con iterbio ZrF₄-BaF₂-LaF₃-AlF₃-NaF-PbF₂ (ZBLANP) [13]. Una muestra de vidrio ZBLANP dopado con Yb³⁺ en forma de paralelepípedo rectangular de volumen de 43 mm³, se enfrió 0.3 K por debajo de la temperatura ambiente.

Actualmente el enfriamiento láser de sólidos se puede dividir ampliamente en tres áreas: Refrigeración láser en vidrios o cristales con iones dopados, enfriamiento láser de semiconductores (burdo o confinados, como las estructuras de pozo cuántico), y láseres de radiación balanceada, donde la longitud de onda de la luz excitadora se ajusta de modo que el enfriamiento por fluorescencia anti-Stokes compense el calentamiento del láser. Las dos primeras áreas se enfocan en la elaboración de un enfriador criogénico “cryocooler” totalmente de estado sólido. Los enfriadores ópticos de estado sólido tienen la ventaja de ser compactos, de no tener vibraciones mecánicas ni piezas o fluidos en movimiento. Ellos tienen muchos beneficios potenciales sobre los refrigeradores termoeléctricos y mecánicos. Por ejemplo, los refrigeradores ópticos comparten el beneficio de bajas vibraciones mecánicas con los refrigeradores termoeléctricos (TEC), basados en el efecto Peltier, pero no sufren de la necesidad de eliminar el calor por contacto físico con un disipador de calor. Los TECs

son capaces de alcanzar aproximadamente 180° K por lo que son más eficaces que los enfriadores ópticos para operaciones de alta temperatura (> 190 K), mientras que los enfriadores anti-Stokes pueden enfriar a temperaturas aproximadamente de 80° K para vidrios o cristales dopados con tierras raras RE o aproximadamente 55° K para los semiconductores con bandgap directo. Enfriadores mecánicos tales como el enfriador de ciclo Stirling pueden alcanzar temperaturas del orden de 10 K, pero son grandes y causan vibraciones que pueden no ser adecuados para muchas aplicaciones.

1.2 ENFRIAMIENTO DE SOLIDOS

1.2.1 ENFRIAMIENTO DE SOLIDOS DOPADOS CON TIERRAS RARAS

Como ya se mencionó anteriormente el enfriamiento por láser de un sólido ha sido observado en una serie de vidrios y cristales dopados con iones de Yb^{3+} , Tm^{3+} y Er^{3+} . La selección apropiada del material huésped es el factor más significativo para el enfriamiento láser de sólidos. Los materiales con fonones de energías más bajas, tales como ZBLANP u otros fluoruros, donde las transiciones no radiactivas son relativamente lentas, son la mejor opción para el material huésped. Los materiales huésped a base de sulfuro y de cloruro tienen una energía de fonón menor que los materiales huésped a base de flúor. Esto causa una reducción significativa de las velocidades de relajación multifonónica (multiphonon relaxation rates). Sin embargo, estos materiales son difíciles de sintetizar y tienen pobres propiedades mecánicas. En los materiales huésped, tales como vidrios o cristales de óxido, las rápidas tasas de decaimiento no radiactivas pueden evitar el enfriamiento láser. La pureza del material huésped es un factor muy importante para el proceso de enfriamiento por láser, ya que el enfriamiento de los iones excitados por las impurezas, tales como hierro y cobre, sirve como una importante fuente de calefacción en el material. Un estudio reciente muestra que la eficiencia de enfriamiento casi ideal en vidrio fluorocirconato ZBLAN dopado con Yb^{3+} se puede lograr cuando la concentración de impurezas tales como Cu^{2+} es inferior a 0.01 ppm y que para Fe^{2+} es inferior a 0.1 ppm [14]. La forma de la muestra es el segundo factor importante, que tiene que ser tomado en cuenta si se quiere maximizar la caída de temperatura de esta. La captura de fluorescencia anti-Stokes y su re-absorción sirve como una fuente adicional de calefacción parasitaria y tiene que ser minimizada. El mejor candidato para la muestra enfriada que cumple los criterios sería una pequeña esfera. Pero la forma esférica de la muestra de enfriamiento limitaría significativamente la cantidad

de energía de la bomba absorbida. Una geometría en la que el haz de bombeo puede viajar una larga distancia a través de la muestra, pero la fluorescencia todavía exista dentro de una distancia corta es preferible para el enfriamiento láser de sólidos. El cálculo de la eficiencia cuántica externa causada por la fluorescencia de reabsorción y re-emisión para las muestras con geometrías cilíndricas y cuboides utilizando el método Monte-Carlo han demostrado que la geometría cilíndrica (fibra) es la mejor opción para el enfriamiento de la muestra [15]. El radio del haz del bombeo incidente tiene que ser mucho menor que el radio de la muestra de la fibra, y se propaga a lo largo de su eje. El radio de la fibra tiene que ser optimizado para el valor de la potencia de la bomba [16], [17].

1.2.2 ENFRIAMIENTO DE SÓLIDOS POR RADIACION BALANCEADA

El proceso de excitación y emisión estimulada en los láseres convencionales de estado sólido resulta en la generación de calor en el medio láser debido al cambio de energía Stokes entre los fotones de bombeo y los fotones de salida del láser comúnmente llamado efecto cuántico. Es decir los láseres de estado sólido convencionales son siempre exotérmicos. El exceso de calor puede causar cambios indeseables en los materiales del láser, como la fractura por estrés térmico y efecto de lente térmico. Se puede cambiar sustancialmente la ganancia del láser. Estos efectos térmicos limitan el rendimiento de los de los láseres de alta potencia, donde las cargas de calor de hoy en día por lo general exceden de 500 W/cm^3 . La geometría de la fibra del láser de estado sólido con su razón muy alta entre superficie y volumen que proporciona una excelente disipación de calor. La tecnología láser de disco delgado ha proporcionado un enorme progreso en el desarrollo de dispositivos de fibra de alta potencia en los últimos años. Pero hoy las intensidades ópticas en dispositivos de fibra de alta potencia casi han alcanzado el umbral de daño del material.

En 1999, Bowman sugirió un nuevo diseño de láser burdo de estado sólido sin generación interna de calor llamado láser de radiación balanceada o atérmica [18]. Se sugirió el uso de enfriamiento por fluorescencia anti-Stokes dentro del láser para equilibrar el calor generado por la emisión estimulada Stokes en un láser burdo de estado sólido. De acuerdo con los procesos conceptuales de Bowman de acción láser y enfriamiento anti-Stokes ocurren en el mismo sistema de iones. En 2001, Andrianov y Samartsev [19] propusieron un esquema, donde la acción láser se produce en un sistema de iones, mientras que la refrigeración anti-Stokes se lleva a cabo en otro sistema de iones. En 2007, se propuso una solución novedosa para reducir la generación de calor en

potentes láseres Raman de bombeo óptico [20]. Un fenómeno no lineal llamado dispersión coherente Raman anti-Stokes (CARS) fue usado para minimizar el calor generado por el fenómeno de defecto cuántico. En 2009, también se propusieron esquemas de amplificadores atórmicos con enfriadores integrados [21], [22].

1.2.3 ENFRIAMIENTO OPTICO EN SEMICONDUCTORES

Los recientes avances en el desarrollo y fabricación de láseres semiconductores han estimulado el creciente interés hacia los semiconductores como candidatos para la refrigeración óptica. La diferencia esencial entre semiconductores y materiales dopado con tierras raras está en sus ciclos de enfriamiento. En el caso de los vidrios o cristales dopados con tierras raras, la transición de enfriamiento se produce en iones donantes localizados dentro del material huésped. En el caso de los semiconductores, el ciclo de enfriamiento implica la transición entre las bandas extendidas de valencia y conducción de un semiconductor con banda prohibida directa, tal como se muestra en la Figura 1. Fotones con energía $h\nu_p$ crean una distribución fría de los portadores electrón-hueco. Los portadores luego se calientan al absorber fonones seguido de una luminiscencia ascendente $h\nu_f$ (up-conversion).

Indudablemente, los portadores de carga en las distribuciones de Fermi-Dirac permiten a los semiconductores ser enfriados a temperaturas más bajas que los materiales dopados con tierras raras. De hecho, en los sistemas dopados con tierras raras las bandas de energía se vuelven menos pobladas tan pronto como la temperatura descende, debido a la distribución de Boltzmann. El ciclo de enfriamiento en materiales huésped dopados con tierras raras cesa cuando la constante de Boltzmann multiplica la temperatura del cristal llegando a ser comparable a la amplitud del estado fundamental. Tales limitaciones no existen en los semiconductores sin dopar. Estudios teóricos sugieren que se pueden lograr temperaturas por debajo 10° K en enfriadores láser de semiconductores [23]. Estudios teóricos detallados de enfriamiento láser de semiconductores se han llevado a cabo por la base de la Fuerza Aérea en Kirtland [24]–[26]. El cambio en la distribución de portadores con la temperatura, así como la difusión de temperatura de fonones se han estudiado extensamente. Se ha demostrado que el material y los portadores pueden tener diferentes temperaturas que varían en espacio y tiempo. Por lo que se ha sugerido la excitación multi-fotónica

para el bombeo de semiconductores de banda prohibida ancha [26]. Teóricamente el esquema de excitación lineal parece más favorable para el enfriamiento láser. Sin embargo, la excitación no lineal permite utilizar una gama diferente de energías de fotones para lograr el enfriamiento láser de semiconductores de banda prohibida grande.

Investigaciones experimentales de enfriamiento láser de semiconductores se ha discutido en una serie de documentos [27]–[29]. En el primer trabajo [27], que se realizó en la Universidad de Colorado, se logró una impresionante eficiencia cuántica externa del 96% en el GaAs, pero no se observó enfriamiento neto. Más tarde, un consorcio europeo anunció sobre el enfriamiento en heteroestructuras con pozos cuánticos de AlGaAs [28]. Estos resultados fueron posteriormente atribuidas a una mala interpretación de los espectros causada por el efecto “Coulomb screening” de los excitones [30]. Aunque los semiconductores son materiales muy prometedores para el enfriamiento láser de sólidos y su eficiencia cuánticas externas aumentan con la disminución de la temperatura, hay algunos problemas, que se tienen de superar para lograr enfriamiento neto de un semiconductor. En primera instancia la tasa de recombinación superficial tiene que ser reducida. Con la técnica de crecimiento epitaxial así como la de deposición de vapor químico metal-orgánico (MOCVD), pueden proporcionar una tasa muy baja de recombinación superficial ($< 10^4 \text{ seg}^{-1}$) por lo que estas se pueden considerar como una solución prometedora del problema. En este caso una capa activa de GaAs se intercala entre dos capas delgadas de AlGaAs o InGaP llamadas barreras. Estas barreras proporcionan pasivación de la superficie así como el confinamiento del portador. De la misma manera se debe reducir la absorción parasita y tiene que mejorarse la eficiencia de luminiscencia. La absorción parasita puede reducirse mediante el crecimiento del material usando técnicas de crecimiento epitaxial. La eficiencia de luminiscencia se puede mejorar si se previene la reflexión interna total que es lo que provoca la captura y re-absorción de emisión espontánea. En la actualidad la pureza de los materiales es el principal obstáculo de enfriamiento neto laser en semiconductores. Un método nuevo y muy prometedor basado en la eliminación de la reflexión interna a través de un vacío “nan-gap”, donde la heteroestructura de enfriamiento y absorción de luminiscencia se pone en contacto ópticamente pero está aislada térmicamente está en fase de desarrollo en la Universidad de Nuevo México [31].

1.3 HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe.

1.3.1. HETEROESTRUCTURA DE CAJA CUANTICA SIMPLE (QW)

La Figura 2, muestra esquemáticamente una heteroestructura de caja cuántica simple (QW) de CdS/CdTe. Regularmente el sustrato es un vidrio transparente que no absorbe el espectro de la luz incidente. El vidrio es el contacto frontal de la heteroestructura en la cual incide la luz. La barrera de la heteroestructura es el semiconductor sulfuro de cadmio (CdS) el cual es usado como material emisor también conocido como el semiconductor “ventana” por su banda prohibida directa. Este material es usado para establecer el campo eléctrico colector de los portadores de carga. El CdS puede ser de tipo-n debido al exceso de Cd ó a las ausencias de S provocada al momento de la preparación del compuesto (desviación estequiométrica).

El semiconductor de la capa activa es el telurio de cadmio (CdTe) el cual es usado como material absorbente también conocido como semiconductor “activo” por su banda prohibida directa. Dentro de sus características principales se encuentra su facilidad para depositarse a través de diversas técnicas, su masa efectiva en la banda de conducción es $0.1 m_0$, y en banda en la banda de valencia es $m_p = 0.4 m_0$, donde m_0 es la masa del electrón en el vacío. El CdTe es usualmente tipo-p debido al exceso de Te ó a las ausencias de Cd. A temperaturas altas aparece una pequeña desviación estequiométrica en forma de una reducida carencia o ausencia de Cd.

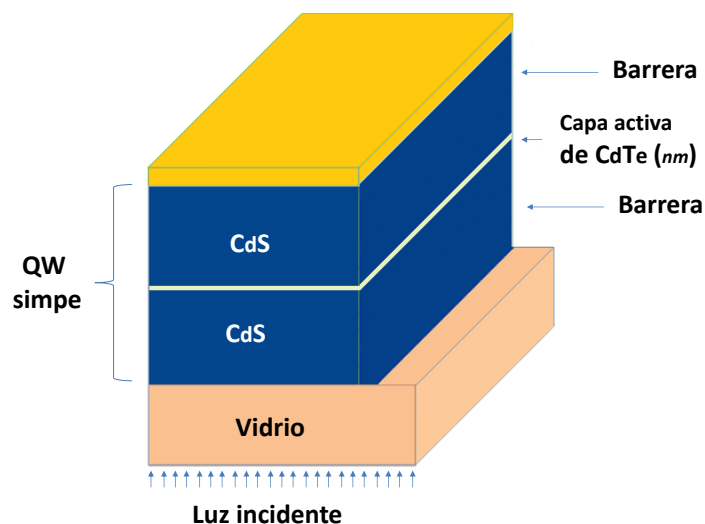


Figura 2. Diagrama esquemático de una heteroestructura de caja cuántica simple de CdS/CdTe.

1.3.2. HETEROESTRUCTURA DE MULTIPLE CAJAS CUANTICAS (MQW)

Si ahora consideramos una heteroestructura donde se crecen una concatenación alternada de películas delgadas de CdTe y CdS, donde el ancho de las películas alternadas es igual o menor a la longitud de onda de DeBroglie, en el dominio energético de la heteroestructura se origina la formación de pozos cuánticos dando origen a una heteroestructura de tipo MQW, tal como se muestra en la Figura 3. Las cargas atrapadas en los pozos cuánticos son limitadas a moverse solo en dos direcciones, lo que origina que el comportamiento de dichas cargas sean gobernadas por efectos cuánticos, los cuales son descritos y modelados por principios de mecánica cuántica.

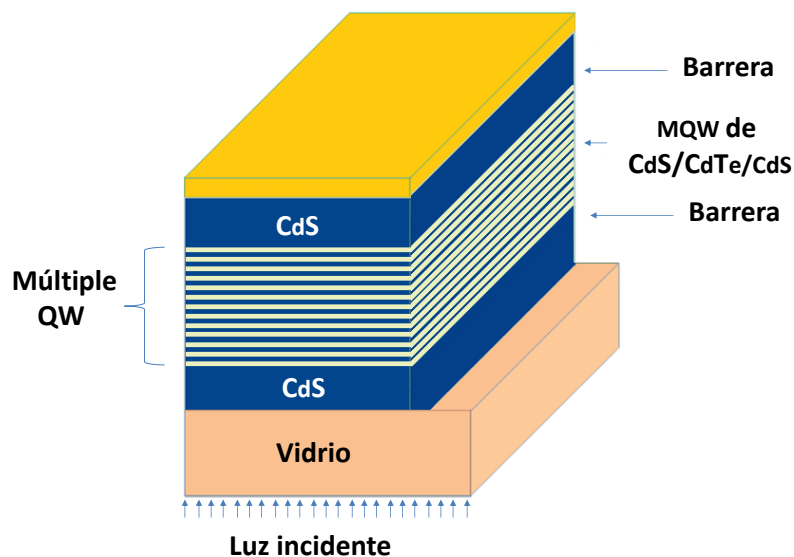


Figura 3. Diagrama esquemático de una heteroestructura de múltiple cajas cuánticas de CdS/CdTe.

1.4 DIAGRAMA DE ENERGÍA VS MOMENTO DE HETEROESTRUCTURAS DE CdS/CdTe

1.4.1 PARA UNA CAJA CUANTICA SIMPLE (QW)

La Figura 4(a) y Figura 4(b) muestran el diagrama esquemático de energía contra momento de una heteroestructura con caja cuántico simple de CdS/CdTe en equilibrio y bajo la influencia de un campo eléctrico, respectivamente. La estructura está formada por una película delgada de CdTe con ancho en (L_z) el orden de los nanómetros. Esta capa, está colocada entre dos capas de CdS con anchos mucho mayor. El CdS normalmente tipo n tiene una banda prohibida de 2.4 eV y es un material ventana que permite gran parte de la radiación solar llegar al absorbente. El CdTe normalmente tipo

p es un semiconductor con banda prohibida directa de 1.45 eV cercana a la de un absorbente perfecto [32]. En el caso del pozo cuántico en equilibrio (Figura 4(a)) en la capa activa formada por el CdTe se muestra la posición de los dos primeros niveles de energía tanto para la banda de valencia como para la de conducción, de la misma manera se ilustra el ancho de la banda prohibida efectiva (E_{geff}) así como la de la capa activa (E_{gqw}). Para el caso del pozo cuántico bajo la influencia de un campo eléctrico en equilibrio (Figura 4(b)) adicionalmente se muestra la posición de los niveles cuasi-fermi (E_{Fn} y E_{Fp}) que parece debido al desequilibrio provocado por el campo eléctrico.

La presencia o ausencia de cargas libres en el pozo cuántico depende de la posición de los niveles E_{Fn} y E_{Fp} . De la misma manera, la capacidad del material de absorber fotones depende de la disponibilidad de cargas libres. En la Figura 4, se asume un nivel de energía $E' = 0$ en el borde de la banda de conducción e incrementa a medida que nos movemos hacia arriba en la banda de conducción. De la misma manera se asume un nivel de energía $E' = 0$ en el borde de la banda de valencia e incrementa a medida que se nos movemos hacia abajo en la banda de valencia. La tasa de absorción de fotones de banda a banda es la tasa a la cual los electrones con energía E' en la banda de valencia hacen la transición a la banda de conducción con energía E absorbiendo un fotón con energía $h\nu$. Adicionalmente, en la Figura 4 se muestran Δ_{EC} y Δ_{EV} que son las discontinuidades (offsets) de la banda de conducción y de valencia respectivamente. Δ_{EC} y Δ_{EV} son las energías requeridas por las cargas para escapar de los pozos cuánticos.

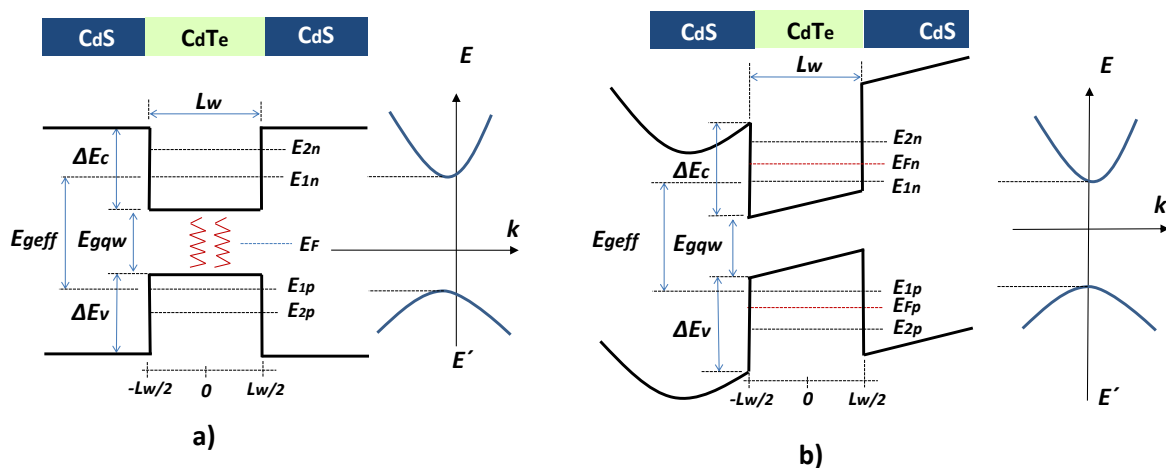


Figura 4. Diagrama esquemático de energía vs momento de una heteroestructura de CdS/CdTe con caja cuántica simple. a) en equilibrio, b) bajo la influencia de un campo eléctrico.

1.4.2 PARA CAJAS CUANTICAS MULTIPLE (MQW)

Si ahora consideramos una heteroestructura idéntica a la descrita anteriormente, pero con la concatenación alternada de películas delgadas de CdTe y CdS, donde el ancho de las películas alternadas es igual o menor a la longitud de onda de DeBroglie, en el dominio energético de la heteroestructura se origina la formación de pozos cuánticos, dando origen a una heteroestructura MQW, tal como se muestra en la Figura 5. Las cargas atrapadas en los pozos cuánticos son limitadas a moverse solo en dos direcciones, lo que origina que el comportamiento de dichas cargas sean gobernadas por efectos cuánticos, los cuales son descritos y modelados por principios de mecánica cuántica.

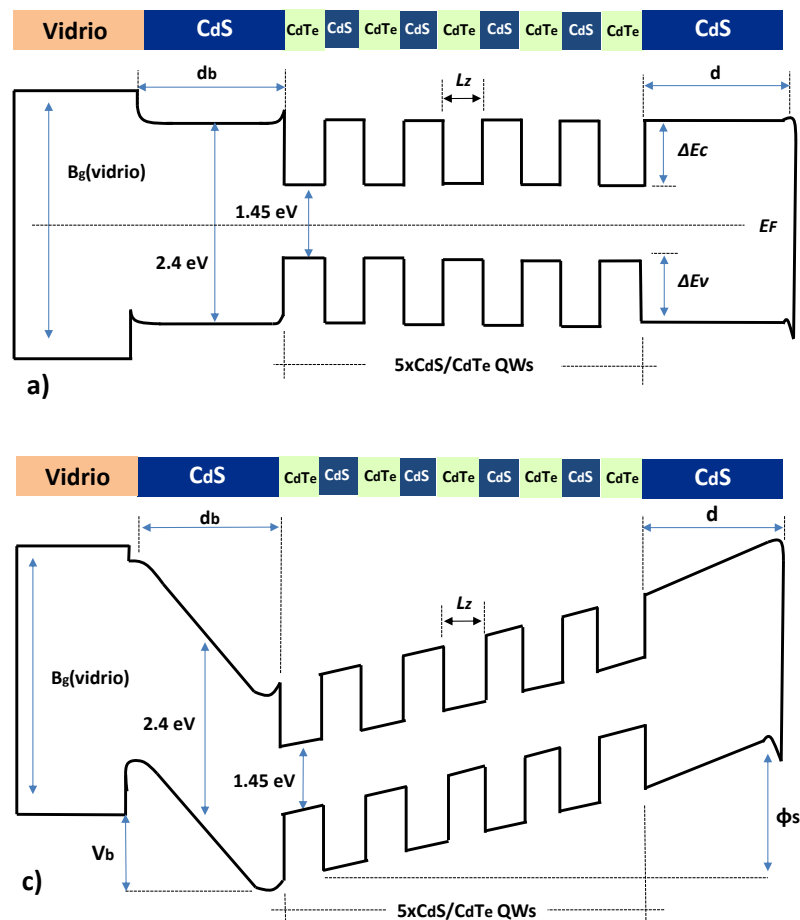


Figura 5. Diagrama esquemático de energía vs momento de una heteroestructura de quintuple pozo cuántico de CdS/CdTe. a) en equilibrio, b) bajo la influencia de un campo eléctrico.

1.5 CRITERIOS DE TRANSICIÓN DE ELECTRONES DE BANDA A BANDA.

La absorción de fotones es el mecanismo principal de generación de pares electrón-hueco en hetero-uniones de CdS/CdTe usadas en dispositivos fotónicos y opto electrónicos, tales como celdas solares y foto detectores. La hetero-unión de CdS/CdTe tiene propiedades únicas que la hacen ideal para la conversión de radiación solar en energía eléctrica con eficiencias comparables a las obtenidas con tecnología de Silicio, pero con la ventaja de requerir menor área sensitiva [33], [34]. A pesar de que eficiencias cuánticas mayores al 17% se han reportado para celdas solares tipo PIN basadas en heteroestructuras de CdS/CdTe, las pérdidas de recombinación en las interfaces de la unión del CdS y CdTe son las que aun limitan el incremento de la eficiencia de las celdas [35], [36].

Heteroestructuras de baja dimensión de un solo o múltiples pozos cuántico (MQW) de CdS/CdTe se han propuesto como alternativa para incrementar la eficiencia cuántica de dispositivos tipo PIN [37], [38]. En estas heteroestructuras de baja dimensión, la determinación exacta del coeficiente de absorción (α) es muy importante dado que las dimensiones físicas óptimas de la heteroestructura depende de este parámetro [39]. El desarrollo de modelos teóricos para la determinación de α son aun escasos y a su vez necesarios para que los diseñadores puedan comparar resultados teóricos con mediciones reales.

Casi todas las técnicas reportadas para el cálculo del coeficiente de absorción en estructuras con pozos cuánticos están basadas en el principio de transición establecido en el trabajo pionero de Lasher y Stern [40], [41]. En este trabajo pionero, el coeficiente de absorción es determinado considerando la ecuación de la tasa de absorción estimulada para un modo de operación simple a una frecuencia específica. Posteriormente, una nueva técnica en donde la ecuación de la tasa de absorción depende de la densidad espectral del flujo de fotones incidente incluyendo términos de pérdida de fotones fue reportada por G. W. Taylor [42]. En ambos casos, tres diferentes criterios para la transición de cargas de la banda de valencia a la de conducción son utilizados: Selección estricta de momento (*K-selection*), sin selección de momento (*no k-selection*) y selección parcial de momento (*partial k-selection*).

1.5.1 CRITERIO DE SELECCIÓN ESTRICTA DE MOMENTO.

En el criterio de selección estricta de momento, la tasa de transición neta es una suma de las transiciones de banda a banda evaluada para cada energía del fotón ($h\nu$). El coeficiente de absorción es calculado utilizando un conjunto de ecuaciones simplificadas asumiendo que el momento del electrón es significativamente mayor que el del fotón ($k_n \gg k_{photon}$). De aquí que, el momento del fotón puede ser ignorado en la transición de banda a banda. Se asume que la transición de los electrones es puramente vertical, donde el estado inicial y el final tienen el mismo momento, $k_n = k_p$ (Figura 6). Algunas limitaciones de este criterio es el decrecimiento de α con el incremento de la energía y el pequeño valor de α para valores de energía por encima del valor de la banda prohibida efectiva [43].

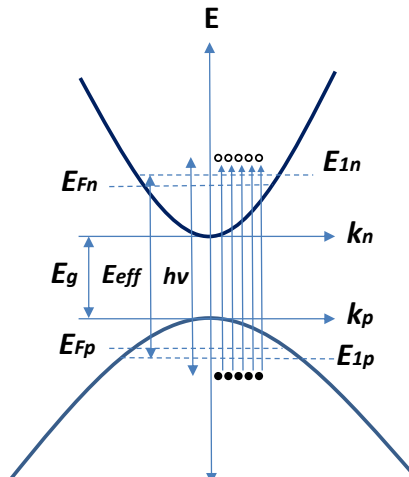


Figura 6. Diagrama de energía vs momento del proceso de transición de banda a banda para en caso de selección estricta de momento.

1.5.2 CRITERIO DE SIN SELECCIÓN DE MOMENTO.

Un criterio que considera más estados disponibles para la transición de electrones es el criterio de sin selección de momento. En este criterio, todos los estados separados por la energía del fotón están disponibles para la transición (Figura 7). Esto requiere la integración de las ecuaciones de las tasas de transición, las cuales incrementan el espectro de absorción para la banda prohibida efectiva debido a la densidad de estados disponibles. De cualquier manera, este criterio arroja valores teóricos más grandes que los medidos de manera experimental [43]. Adicionalmente, el espectro muestra un incremento continuo de α por encima de la banda prohibida, lo que significa la existencia de demasiados estados disponibles para las transiciones.

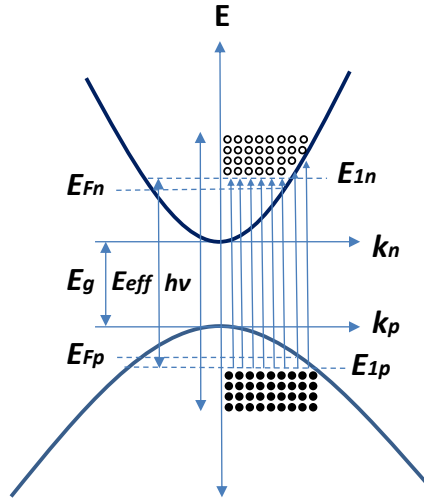


Figura 7. Diagrama de energía vs momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de sin selección de momento.

1.5.3 CRITERIO DE SELECCIÓN PARCIAL DE MOMENTO.

En el criterio de selección parcial de momento un rango de estados separados por la energía del fotón puede participar en la transición para un rango de valores de momentos (Figura 8). Esto significa la inclusión de mecanismos de colisión intra-banda que permiten la conservación del momento para cada transición. La colisión intra-banda creará un acotamiento en energía (colisiones inelásticas) y en momento (colisiones elásticas). Una función de peso es introducida en las ecuaciones de las tasas de transición. Esta función de peso selecciona el rango de transiciones con más probabilidad para cada energía de transición. Idealmente, la implementación del criterio de selección parcial de momento es lo más cercano a la realidad dado que este se aproxima al criterio de selección estricta de momento para un rango infinitamente delgado de transiciones disponibles, y se aproxima al criterio de sin selección de momento para un rango infinitamente ancho de transiciones disponibles.

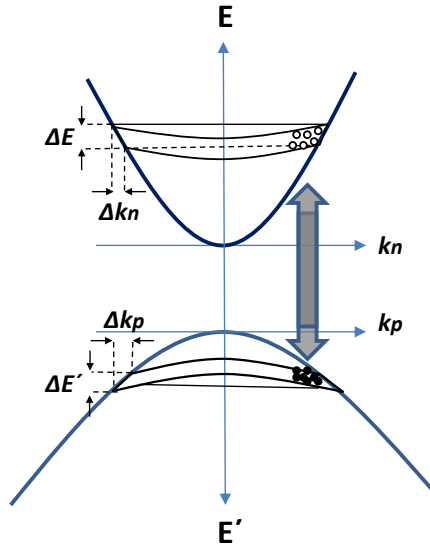


Figura 8. Diagrama de energía vs momento del proceso de transición de banda a banda para el caso de selección parcial de momento.

1.6 CÁLCULO DE LOS NIVELES DE ENERGÍA ESTÁTICOS EN UN POZO CUÁNTICO.

Una capa delgada de CdTe colocada entre dos capas de CdS forma un pozo cuántico finito, el cual usando la aproximación de la función de contorno y la masa efectiva tiene la apariencia de la Figura 4. Considerando la diferencia de las masas efectivas entre los materiales que forman la heterounión, los niveles estáticos de energía en la banda de conducción para cada uno de los materiales del pozo pueden ser calculados usando la siguiente ecuación de Schrodinger [44]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{nb}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi(z) + V_0 \varphi(z) = E \varphi(z), \quad z \leq -\frac{L_w}{2} \quad (1)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{nw}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi(z) = E \varphi(z), \quad -\frac{L_w}{2} \leq z \leq \frac{L_w}{2} \quad (2)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{nb}^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi(z) + V_0 \varphi(z) = E \varphi(z), \quad +\frac{L_w}{2} \leq z \quad (3)$$

donde m_{nw}^* y m_{nb}^* son la masa efectiva del electrón en el pozo y en la barrera respectivamente. V_0 es el potencial de confinamiento y L_w es el ancho del pozo cuántico. Debido a que el potencial de

confinamiento en el pozo es simétrico, los niveles de energía resultantes también tendrán simetría definida. Considerando la mitad del pozo como el origen, las energías en el rango entre 0 y V_0 están dadas por

$$\varphi(x) = \begin{cases} Ae^{Kz} & z \leq -\frac{L_w}{2} \\ C \sin(K_{II}z) + D \cos(K_{II}z) & -\frac{L_w}{2} \leq z \leq \frac{L_w}{2} \\ Be^{-Kz} & +\frac{L_w}{2} \leq z \end{cases} \quad (4)$$

donde

$$K = \frac{\sqrt{2m_{nw}^*E}}{\hbar} \quad (5)$$

$$K_{II} = \frac{\sqrt{2m_{nb}^*(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (6)$$

Los niveles con posición par de energía serán términos coseno, mientras que los niveles con posición impar serán términos seno. Usando las condiciones de frontera en las cuales las funciones seno y sus primeras derivadas divididas sobre la masa efectiva son continuas en la interface entre la barrera y el pozo, esto es $\varphi(L_w^+/2) = \varphi(L_w^-/2)$ y $(1/m_{nb}^*)\varphi'(L_w^+/2) = (1/m_{nw}^*)\varphi'(L_w^-/2)$, entonces en la interface $z = +L_w/2$, obtenemos

$$A \cos\left(\frac{KL_w}{2}\right) = B \exp\left(-\frac{K_{II}L_w}{2}\right) \quad (7)$$

igualando $1/m_{nw,b}^*$ por la derivada resulta

$$-\frac{KA}{m_{nw}^*} \sin\left(\frac{KL_w}{2}\right) = -\frac{K_{II}B}{m_{nb}^*} \exp\left(-\frac{K_{II}L_w}{2}\right) \quad (8)$$

Dividiendo la ecuación (8) sobre la ecuación (7) obtenemos los valores de los niveles de energía discretos pares de la forma

$$K = \frac{m_{nb}^*}{m_{nw}^*} K_{II} \tan\left(K_{II} \frac{L_w}{2}\right) \quad (9)$$

De manera similar, para la solución impar, obtenemos los valores de los niveles discretos de la forma

$$K = -\frac{m_{nb}^*}{m_{nw}^*} K_{II} \cot\left(K_{II} \frac{L_w}{2}\right) \quad (10)$$

Dado que K_{II} en la ecuación (6) depende de la energía, entonces las ecuaciones (9) y (10) son también dependientes de la energía. Debido a esto, los niveles de energía pueden ser encontrados gráficamente. Los puntos de intersección entre la ecuación (5) y (9) y la ecuación (5) y (10) dan los niveles discretos pares e impares de energía respectivamente.

Adicionalmente, cuando la heterounión de CdS/CdTe está bajo la influencia de un campo eléctrico, la presencia o ausencia de cargas libres en el pozo cuántico dependerá de la posición de los niveles de energía cuasi-fermi E_{Fn} y E_{Fp} , esto a su vez proveerán la habilidad de obtener absorción de fotones. Una vez que los niveles estáticos de energía en el pozo cuántico son conocidos, E_{Fn} y E_{Fp} pueden ser encontrados resolviendo numéricamente la ecuación de neutralidad de cargas (ecuación (11)) aplicada al pozo cuántico [43]

$$\left(1 + e^{E_{Fn}/kT}\right)\left(1 + e^{(E_{Fn}-\Delta E_n)/kT}\right) = \left(1 + e^{E_{Fp}/kT}\right)^Z \left(1 + e^{(E_{Fp}-\Delta E_p)/kT}\right)^Z, \quad (11)$$

donde $Z = m_{pw}^*/m_{nw}^*$; ΔE_n y ΔE_p son las separaciones entre la primera y segunda sub-banda en el pozo para electrones y huecos-pesados, respectivamente.

1.7 COEFICIENTE DE ABSORCIÓN BASADO EN EL CRITERIO DE SELECCIÓN PARCIAL DE MOMENTO.

La interacción de la luz con un semiconductor puede ser descrita a partir de un flujo arbitrario de fotones $\phi(\nu)$ con densidad espectral $F(\nu) = \phi(\nu)/v_g$, donde v_g es la velocidad de grupo que impacta una unidad de volumen del material. Una vez que el flujo de fotones, el cual tiene una densidad espectral $F_{in}=F(\nu)\delta\nu$ en un intervalo pequeño de frecuencias $\delta\nu$, ha penetrado la parte frontal del material, el comportamiento de los fotones es determinado por la tasa de absorción, emisión (espontánea y estimulada) y las pérdidas. Por conservación de energía, la generación neta de fotones debe balancear la recombinación de estos por unidad de volumen del semiconductor. Esto puede ser descrito como [45], [46]:

$$v_g \frac{dF_{in}}{dx} = -R_{abs} + R_{stim} + R_{spont} - R_{loss} \quad (12)$$

La cual describe el cambio en el flujo de fotones en función de la posición, donde R_{abs} representa el volumen total de la tasa de absorción, R_{stim} representa el volumen total de la tasa de emisión estimulada, R_{spont} representa el volumen total de la tasa de emisión espontánea y R_{loss} representa el volumen total de las pérdidas de fotones del material. Aquí, el volumen de la tasa de absorción es la tasa a la cual los electrones en la banda de valencia con energía E' hacen la transición a la banda de conducción con energía E absorbiendo un fotón con energía $h\nu$. Esta tasa debe ser proporcional al número de estados llenos en la banda de Valencia y el número de estados vacíos en la banda de conducción. El número de estados electrónicos llenos en la banda de valencia es igual a la densidad de estados disponibles con energía E' , expresado como $N_v(E')$ por la distribución de probabilidades de Fermi-Dirac para la banda de Valencia, expresada como, $f_v(E')$. De manera similar, el número de estados electrónicos libres en la banda de conducción está dado por la densidad de estados disponible con energía E , expresado como $N_c(E)$, por $[1-f_c(E)]$, que es la probabilidad de que un estado en la banda de conducción este vacío.

Por lo tanto, el volumen de la tasa de absorción de fotones y pérdida de fotones están dados por la ecuaciones (13) y (14), respectivamente [47]:

$$R_{abs} = N_v(E')f_v(E')N_c(E)[1-f_c(E)]B(\nu)F(\nu)h\nu dE dE', \quad (13)$$

$$R_{loss} = \frac{F(\nu)\delta\nu}{\tau_{loss}}, \quad (14)$$

Con distribución de Fermi-Dirac dada por:

$$f_c(E) = \frac{1}{1 + \exp(E - E_{Fn})/kT}, \quad (15)$$

y

$$1 - f_c(E') = \frac{1}{1 + \exp(E' - E_{Fp})/kT}, \quad (16)$$

donde $B(\nu) = A_b C^3 / 8\pi\nu^2$ es el coeficiente de Einstein para la absorción de fotones con unidades de $cm^6 j^{-1} s^{-2}$, A_b es el coeficiente Einstein para la probabilidad de recombinación espontánea con unidades de $cm^3 s^{-1}$, c es la velocidad de la luz, $\tau_{loss} = \Gamma \tau(\nu)$ es una constante de tiempo que define las pérdidas de fotones, Γ es el factor de confinamiento de fotones, y $\tau(\nu)$ es el tiempo de vida de los fotones con frecuencia ν .

En el criterio de selección parcial de momento, una función de peso es introducida en la ecuación de la tasa de absorción de fotones para seleccionar el rango de energías con más alta probabilidad de transición. Esta función de peso es una función Lorentziana con máximo en $E = E_T$, de la forma:

$$g(E) = \frac{1}{4} \left(\frac{(h\delta\nu)^2}{(E - E_T) + (h\delta\nu/2)^2} \right), \quad (17)$$

donde $\delta\nu$ representa el ancho a la mitad del pico máximo (FWHM) de la función definida por $\delta(\nu) = 1/(2\pi\tau_{in})$, donde τ_{in} es el tiempo de relajación o de colisiones intra-banda. Para formular la ecuación de la tasa total de absorción de fotones que considere todas las transiciones posibles para una energía de fotón dada así como todas las frecuencias posibles donde las transiciones pueden ocurrir, es necesario integrar la tasa de absorción de fotones dada por la ecuación (13) en todas las energías de la banda de conducción y valencia e igualmente integrar en todo el rango de frecuencias del flujo incidente de fotones (de ν_1 to ν_2), considerando la función de peso $g(E)$:

$$R_{abs} = \int_{\nu_1}^{\nu_2} B(\nu) F(\nu) h\nu \int_0^{h\bar{\nu}} N_v(E') f_v(E') N_c(E) [1 - f_c(E)] g(E) dE dE', \quad (18)$$

$$R_{loss} = \int_{\nu_1}^{\nu_2} \frac{F(\nu) - F_{eq}(\nu)}{\tau_{loss}(\nu)} d\nu, \quad (19)$$

donde $E' = h\nu - E_g - E \equiv h\bar{\nu} - E$ es obtenida de la figura 3b y nos permite escribir $dE' = d(h\nu)$, E_g es la banda prohibida efectiva del material, $\delta\nu$ es reemplazado por $d\nu$, y $F_{eq}(\nu)$ es la densidad espectral de fotones en equilibrio térmico, la cual debe ser incluida en la ecuación (19) para las pérdidas cuando no existe flujo incidente de fotones. Utilizando las ecuaciones (15), (16), (17) y (18) tenemos:

$$R_{abs} = \int_{\nu_1}^{\nu_2} B(\nu)F(\nu)h\nu \int_0^{h\bar{\nu}} \frac{D_{1n}(E)}{L_z} \frac{D_{1p}(h\bar{\nu}-E)}{L_z} \frac{1}{1 + \exp[(E_{Fn} - E)/kT]} \frac{1}{1 + \exp[(E_{Fp} - h\bar{\nu} + E)/kT]} \times \frac{1}{4} \frac{[h\delta\nu(E_{Fn})]^2}{[E - E_T(E_{Fn})]^2 + [h\delta\nu(E_{Fn})/2]^2} dE \quad (20)$$

Tomando como

$$T_{AB}(E) = \int_0^{h\bar{\nu}} \frac{D_{1n}(E)}{L_z} \frac{D_{1p}(h\bar{\nu}-E)}{L_z} \frac{1}{1 + \exp[(E_{Fn} - E)/kT]} \frac{1}{1 + \exp[(E_{Fp} - h\bar{\nu} + E)/kT]} \times \frac{1}{4} \frac{[h\delta\nu(E_{Fn})]^2}{[E - E_T(E_{Fn})]^2 + [h\delta\nu(E_{Fn})/2]^2} dE \quad (21)$$

e integrando en todo el rango de frecuencias del flujo de fotones incidente tenemos:

$$R_{abs} = T_{AB}(E)\bar{B}(\nu)F(\nu)\delta\nu. \quad (22)$$

Si los niveles Cuasi-Fermi E_{Fn} y E_{Fp} están por debajo de los bordes de sus respectivas bandas E_{1n} y E_{1p} , entonces la tasa de absorción es mucho más grande que la tasa de emisión. Esta consideración nos permite tomar las funciones de Fermi dadas en las ecuaciones (15) y (16) iguales a uno para todas las energías mayores al valor efectivo de la banda prohibida de los pozos cuánticos. Entonces, $R_{stim} = R_{spont} = 0$. Entonces, debido a que las funciones de Fermi son cero para valores de energía por encima del valor efectivo de la banda prohibida, y de igual manera las densidades de estados son cero para energías por debajo del valor efectivo de la banda prohibida, entonces podemos escribir la ecuación (12) como:

$$\nu_g \frac{dF_{in}}{dx} = -(R_{abs} + R_{loss}) \quad (23)$$

dado que $F_{in}=F(\nu)\delta\nu$, entonces:

$$\frac{dF_{in}}{F_{in}} = -\frac{1}{\nu_g} \left[\bar{B}(\nu)hT_{AB}(E) + \frac{1}{\tau_{loss}} \right] dx \quad (24)$$

Aquí, el término del lado izquierdo de la ecuación es el cambio relativo en el flujo de fotones el cual está relacionado con el coeficiente de absorción $\alpha(\nu)$, a través de la relación $d\phi(\nu)/\phi(\nu) = -\alpha(\nu)dx$ donde $\alpha(\nu)$ es la fracción de cambio en $\phi(\nu)$ por unidad de longitud. Por lo tanto el coeficiente de absorción en el pozo cuántico está dado por:

$$\alpha(\nu) = \frac{1}{v_g} \left[\bar{B}(\nu) h T_{AB}(E) + \frac{1}{\tau_{loss}} \right], \quad (25)$$

con unidades de cm^{-1} .

La diferencia de aplicar la ecuación (25) a una estructura absorbente de pozo cuántico único o una estructura de múltiples pozos cuánticos está principalmente el tiempo que define las pérdidas de fotones o vida efectiva de los fotones dada por [48]:

$$\tau_{loss} = \Gamma_m \tau_p = \left\{ v_g \left[\frac{1}{\Gamma_m L} \ln \left(\frac{1}{R} \right) + \alpha_m \right] \right\}^{-1}, \quad (26)$$

donde

$$\Gamma_m = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m L_z}{W_0}, \quad (27)$$

donde, Γ_m es el factor de confinamiento para m pozos cuánticos, R es la reflectividad, α_m es un término de pérdida de fotones que incluye colisiones libres y colisiones de absorción, W_0 y L el ancho y lo largo, respectivamente, de la hetero-estructura completa. De la ecuación (27) se puede observar que el volumen efectivo de la región activa de absorbancia varía con el número de pozos cuánticos. De aquí que, la ecuación (27) es una buena aproximación para ilustrar el incremento en el factor de confinamiento y absorción de fotones cuando el número de pozos incrementa.

CAPITULO 2.

INTRODUCCIÓN

2.1 JUSTIFICACIÓN

La capacidad tecnológica de la humanidad para producir, mediante enfriamiento por láser, muestras de átomos ultra fríos (casi en el límite mismo de la temperatura más fría que permiten las leyes de la física) revolucionó la física atómica experimental, y permitió construir dispositivos portentosos, desde relojes atómicos (que son el corazón del Sistema de Posicionamiento Global (GPS)) hasta otros más experimentales y del todo nuevos, como son algunas de las piezas que se necesitarán para fabricar una computadora cuántica.

El concepto de enfriamiento por láser puede sonar imposible, debido a que un rayo láser tiende a calentar todo aquello que toca, no a enfriarlo. Sin embargo, a escala atómica, es factible empujar átomos y moléculas del modo deseado utilizando impactos leves producidos por una corriente constante de fotones (partículas de luz), emitidas por un láser. Usando haces láser para, por ejemplo, golpear desde direcciones opuestas los átomos seleccionados, se puede reducir la velocidad de sus movimientos. Las técnicas láser de este tipo son conocidas como enfriamiento por láser, porque la temperatura es una medida directa de las velocidades del movimiento de un grupo de moléculas o átomos. En ese sentido, reducir los movimientos de los átomos hasta por ejemplo dejarlos casi inmóviles es equivalente a bajar sus temperaturas hasta casi el Cero Absoluto (273 grados centígrados bajo cero), la temperatura más fría que puede existir.

Sin embargo, las técnicas láser actuales que se emplean comúnmente para enfriar átomos desde la temperatura ambiente hasta muy cerca del Cero Absoluto están limitadas a átomos con una estructura electrónica idónea. Como resultado de ello, solo una pequeña parte de los elementos atómicos, junto con unas cuantas moléculas diatómicas, han sido enfriadas de esta manera. Por otro lado, el mayor desafío para lograr temperaturas por debajo de 10° kelvin en materiales semiconductores a través de la conversión ascendente de fotoluminiscencia (enfriamiento óptico), es que a estas temperaturas, en los semiconductores los componentes de fonones-acústicos predominan y la tasa de dispersión de estos se vuelve comparable a la tasa de transición radiactiva de banda a banda. Este problema puede ser aliviado significativamente mediante el empleo de sistemas de confinamiento cuántico, donde la relajación de la conservación del vector de onda en la

dirección de confinamiento reduce la magnitud de la conductividad del material casi tres veces su valor original. A pesar de que estudios previos han reportado análisis teóricos y experimentales de las características de enfriamiento óptico en materiales semiconductores burdos, la transición de electrones de banda a banda debido a la absorción y emisión de fotones en condiciones de enfriamiento óptico en sistemas de confinamiento exhiben efectos cuánticos debido a sus dimensiones de escala nano-métrica. Estos efectos no han sido completamente analizados en los estudios teóricos convencionales. Por lo que este trabajo es justificado con el hecho de realizar una investigación numérica de las condiciones de enfriamiento óptico en heteroestructura de baja dimensión con simple y múltiples cajas cuántica (MQW). En estas estructuras los portadores inyectados en la región activa son limitados a moverse mecánicamente en una dimensión (1D). Así mismo, analizar los efectos del confinamiento cuántico de cargas en el proceso de absorción de fotones y fotoluminiscencia bajo condiciones de enfriamiento. Aún más importante, definir los espectros de absorción y fotoluminiscencia de la heteroestructura para condiciones de enfriamiento en términos del espesor de la capa absorbedora (capa activa) y el número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa.

2.2 OBJETIVOS

2.2.1 OBJETIVO GENERAL.

El objetivo general de este trabajo de tesis es realizar una investigación numérica de las condiciones de enfriamiento óptico en heteroestructura de baja dimensión de CdS/CdTe con simple y múltiples cajas cuántica (MQW) considerando la primicia de que para estas estructuras los portadores inyectados en la región activa son limitados a moverse mecánicamente en una dimensión (1D). De igual manera, analizar los efectos del confinamiento cuántico de cargas en la absorción de fotones y fotoluminiscencia bajo condiciones de enfriamiento. Así como identificar y definir, en términos del espesor de la capa absorbedora (capa activa) y el número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa, los espectros de absorción y fotoluminiscencia de la heteroestructura de CdS/CdTe para condiciones de enfriamiento.

2.2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.

Para el logro del objetivo general de este trabajo de tesis se plantean los siguientes objetivos específicos:

- Proponer una heteroestructuras absorbente de fotones basad en CdS/CdTe con capacidad de obtener enfriamiento óptico usando como fuente excitadora el espectro de radiación solar.
- Desarrollar los modelados matemáticos de los fenómenos de absorción de fotones y enfriamiento óptico en la estructura propuesta.
- Realizar un estudio comparativo de la absorción de fotones y capacidad de enfriamiento en la estructura propuesta utilizando diferentes criterios de selección de momento.
- Ddefinir los espectros de absorción y fotoluminiscencia de la heteroestructura propuesta para condiciones de enfriamiento óptico en términos del espesor de la capa absorbedora (capa activa) y el número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa.
- Definir el dimensionamiento óptimo de la capa activa de la estructura propuesta, para obtener un máximo de absorción de fotones y enfriamiento óptico basado en el espectro de irradiación solar.

2.3 HIPÓTESIS

Dentro de las principales limitantes existentes para lograr temperaturas bajas en materiales semiconductores a través de la conversión ascendente de fotoluminiscencia, se encuentra la alta tasa de fonones-acústicos existente a temperaturas menores a 10° kelvin, aunada a la alta tasa de dispersión de estos que se vuelve comparable a la tasa de transición radiactiva de banda a banda. Y sabiendo que este problema puede ser aliviado significativamente mediante el empleo de sistemas de confinamiento cuántico, donde la relajación de la conservación del vector de onda en la dirección de confinamiento reduce la magnitud de la conductividad del material casi tres veces su valor original, **la hipótesis de este trabajo de tesis se establece de la siguiente manera**; considerando heteroestructura de baja dimensión de CdS/CdTe con simple y múltiples cajas cuántica (MQW) donde los portadores inyectados en la región activa sean limitados a moverse mecánicamente en una dimensión (1D), se puede realizar un estudio numérico que ayude a definir los espectros de absorción y fotoluminiscencia de dicha heteroestructura para condiciones de enfriamiento óptico en

términos del espesor de la capa absorbadora (capa activa) y el número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa.

CAPÍTULO 3.

DESARROLLOS Y SIMULACIÓN

En este capítulo se presenta el desarrollo, simulación y resultados obtenidos en este trabajo. Específicamente, se muestran las condiciones de enfriamiento óptico en heteroestructura de baja dimensión de CdS/CdTe con simple y múltiples cajas cuántica (MQW). Se discuten los efectos del confinamiento cuántico de cargas en el proceso de absorción de fotones y fotoluminiscencia se analizaron bajo condiciones de enfriamiento. Aún más importante, se muestran los espectros de absorción y fotoluminiscencia de la heteroestructura de CdS/CdTe para condiciones de enfriamiento definidos en términos del espesor de la capa absorbedora (capa activa) y el número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa.

3.1 INTRODUCCION

En 1929, fue reconocido por Pringsheim que energía térmica puede ser removida por fluorescencia anti-Stokes si el material es excitado por fotones con una energía menor que la energía media de fluorescencia [5]. Esto es conocido como enfriamiento laser (refrigeración óptica) por luminiscencia de conversión ascendente. Sin embargo, la refrigeración óptica fue observada hasta 1995 en vidrios dopados con Iterbio y Tulio [13], [51], [52]. En 1997, Gauck propuso la refrigeración óptica en semiconductores para la fabricación de dispositivos semiconductores auto-enfriados, donde un dispositivo semiconductor y un enfriador semiconductor pueden ser crecidos en el mismo sustrato [27]. En el mecanismo de conversión ascendente por luminiscencia en un semiconductor burdo, como se muestra en la Figura 1, electrones de la banda de valencia hacen la transición a la banda de conducción mediante la absorción de la luz incidente un fotón con energía $h\nu$. Los electrones en la banda de conducción experimentan intercambios de energía a través de colisiones inelásticas, absorbiendo vibraciones térmicas en la red del material. Después de ganar energía durante las colisiones, los electrones de la banda de conducción bajan a la banda de valencia emitiendo un fotón incoherente con energía $h\nu_f$ que posee una longitud de onda menor a la del fotón absorbido. Este fotón se genera a través de recombinación radiactiva y disipa calor del material. Como resultado, el material es enfriado por la luz incidente [9].

Los semiconductores obedecen a la estadística de Fermi-Dirac; en consecuencia, los niveles de energía más bajos de la banda de valencia estando poblada incluso a temperaturas de cero absoluto. Por lo tanto, los semiconductores tienen el potencial de alcanzar temperaturas inferiores a las logradas por el vidrio dopado. El mayor desafío para lograr temperaturas por debajo de 10° kelvin en materiales semiconductores a través de la conversión ascendente de fotoluminiscencia, es que a estas temperaturas, en los semiconductores los componentes de fonones-acústicos predominan y la tasa de dispersión de estos se vuelve comparable a la tasa de transición radiativa de banda a banda. Este problema puede ser aliviado significativamente mediante el empleo de sistemas de confinamiento cuántico, donde la relajación de la conservación del vector de onda en la dirección de confinamiento reduce la magnitud de la conductividad del material casi tres veces su valor original [53]. A pesar de que estudios previos han reportado análisis teóricos y experimentales de las características de enfriamiento óptico en materiales semiconductores burdos [49], la transición de electrones de banda a banda debido a la absorción y emisión de fotones en condiciones de enfriamiento óptico en sistemas de confinamiento exhiben efectos cuánticos debido a sus dimensiones de escala nano-métrica. Estos efectos no han sido completamente analizados en los estudios teóricos convencionales. En este capítulo, realizamos una investigación numérica de las condiciones de los fenómenos involucrados en el proceso de enfriamiento óptico en heteroestructura de baja dimensión de CdS/CdTe con simple y múltiples cajas cuántica (MQW).

3.2 FORMULACION TEORICA

La Figura 2, muestra esquemáticamente la heteroestructura de caja cuántica simple (QW) de CdS/CdTe utilizada para el desarrollo de este trabajo. De igual manera, la Figura 4(a) y Figura 4(b) muestran el diagrama esquemático de energía contra momento de esta heteroestructura en equilibrio y bajo la influencia de un campo eléctrico, respectivamente. Para el caso de la heteroestructura de tipo MQW utilizada la Figura 3 muestra un diagrama esquemático de esta heteroestructura así como la Figura 5(a) y Figura 5(b) muestran el diagrama esquemático de energía contra momento de esta heteroestructura en equilibrio y bajo la influencia de un campo eléctrico, respectivamente.

La generación de pares electrón-hueco debido a la absorción de fotones en un material semiconductor puede ser descrita a partir de un flujo de fotones con intensidad "I" con energía del

fotón $h\nu$ que incide sobre el material. Una vez que el flujo de fotones pasa a través de la superficie frontal del material, la generación por electrón-hueco está determinada por la tasa de recombinación no radiante (AN), la tasa de recombinación radiactiva (BN^2) y la tasa de Auger (CN^3). Adicionalmente, si asumimos que sólo una fracción η_e de la luminiscencia total puede escapar del material mientras que la fracción restante ($1 - \eta_e$) queda atrapada y es reabsorbida. Por el principio de conservación de energía, la tasa neta de generación de pares electrón-hueco debe equilibrar la recombinación neta de los fotones. Esto se puede escribir como [23], [54]

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\alpha(\nu, N)}{h\nu} I - AN - BN^2 - CN^3 + (1 - \eta_e)BN^2 \quad (28)$$

esta ecuación describe la razón de cambio en la densidad de pares electrón-hueco con respecto al tiempo. Aquí $\alpha(\nu)$ es el coeficiente de absorción entre bandas. El último término representa el aumento de N debido a la reabsorción de la luminiscencia atrapada. Además, cuando un semiconductor con heteroestructura de QWs está bajo la influencia de un campo eléctrico debido a una luz uniformemente irradiada, la presencia o ausencia de portadores libres en el QW depende de la posición de los nivel de energía cuasi-Fermi E_{F_n} y E_{F_p} , y esto determina la capacidad de obtener una respuesta de absorción. Una vez que los niveles de energía estática en el pozo cuántico de un absorbedor son conocidos, E_{F_n} y E_{F_p} se puede obtener mediante la resolución numérica de la siguiente ecuación que representa la neutralidad de cargas aplicada en el QW [43]

$$\left(1 + e^{E_{F_n}/kT}\right) \left(1 + e^{(E_{F_n} - \Delta E_n)/kT}\right) = \left(1 + e^{E_{F_p}/kT}\right)^Z \left(1 + e^{(E_{F_p} - \Delta E_p)/kT}\right)^Z, \quad (29)$$

donde $Z = m_{pw}^*/m_{nw}^*$; mientras ΔE_n y ΔE_p son las separaciones entre la primera y segunda sub-banda en el pozo para electrones y huecos-pesados, respectivamente. Entonces la tasa de volumen de absorción en las capas activas debe ser proporcional al número de estados electrónicos llenos en la banda de valencia y el número de estados electrónicos vacíos en la banda de conducción. El número de estados electrónicos llenos en la banda de valencia es igual a la densidad de estados que están disponibles en energía E' denotado como $N_v(E')$ por la probabilidad de ocupación dada por la distribución de Fermi-Dirac para la banda de valencia, $f_v(E')$. Del mismo modo, el número de estados electrónicos vacíos en la banda de conducción está dado por la densidad de estados que están

disponibles en la energía E , denotados como f_c , y $[1 - f_c(E)]$, que es la probabilidad de que el estado de la banda de conducción está vacía. Por lo tanto, el coeficiente de absorción en el QW se describe por la ecuación (25).

Dado que el tiempo de vida de fotón (τ_{loss}) depende del número de QWs, τ_{loss} se puede utilizar para ilustrar el aumento de la absorción de fotones mientras el número de pozos se incrementa en una estructura acoplada de pozos múltiples [42]:

$$\tau_{loss} = \Gamma_m \tau_p = \left\{ v_g \left[\frac{1}{\Gamma_m L} \ln \left(\frac{1}{R} \right) + \alpha_{ab}(v) + \frac{(1 - \Gamma_m)}{\Gamma_m} \alpha_{sc}(v) \right] \right\}^{-1} \quad (30)$$

Aquí, τ_p es la vida útil del fotón, Γ_m es el factor de confinamiento para el m^{th} pozo dada por $\Gamma_m = \sqrt{2/\pi} [mL_z/W_0]$, R es la reflectividad, $\alpha_{ab}(v)$ es la pérdida de fotones de portadores libres, y $\alpha_{sc}(v)$ es la pérdida de dispersión, mientras que W_0 y L son el ancho y longitud, respectivamente, de la estructura absorbente completa.

Por otro lado, en condiciones de estado estable, la ecuación (28) puede reescribirse como

$$0 = \frac{\alpha(v)}{hv} I - AN - \eta_e BN^2 - CN^3 \quad (31)$$

donde la emisión espontánea aparece sólo a través de $\eta_e B$ que se inhibe por la captura de fluorescencia [19][55]. Es importante señalar que η_e es una cantidad promedio sobre todo el espectro de luminiscencia:

$$\eta_e = \frac{\int S(v)R(v)dv}{\int R(v)dv} \quad (32)$$

donde $S(v)$ es la probabilidad de escape a la geometría dependiente de fotones con energía hv , y $R(v)$ es la densidad espectral de PL, también conocida como la ecuación de Kubo-Martin-Schwinger [50], [56]:

$$R(v) = \frac{8\pi n^2 v^2}{c^2} \alpha(v) \left\{ \frac{f_c(1 - f_v)}{(f_v - f_c)} \right\} \quad (33)$$

donde n es el índice de refracción. La densidad de potencia neta distribuida en el semiconductor es la diferencia entre la potencia absorbida de la luz incidente (P_{abs}) y la de la luminiscencia que se escapa (P_{le}):

$$P_{net} = P_{abs} - P_{le} = [\alpha(\nu)I + \Delta P] - [\eta_e BN^2 h \bar{\nu} f] \quad (34)$$

donde la densidad de potencia absorbida incluye la absorción de resonancia $[\alpha(\nu)I]$ y un término ΔP que considera los efectos indeseables tales como la absorción de portador libre y otros procesos de absorción parasitarios. El segundo término es la densidad de potencia de luminiscencia de escape a una energía de luminiscencia media $h\nu_f$, definida como

$$h\nu_f = \frac{\int S(\nu)R(\nu)h\nu d\nu}{\int S(\nu)R(\nu)d\nu} \quad (35)$$

Es importante tener en cuenta que la energía de luminiscencia media que escapa puede desviarse (i.e., desplazamiento hacia el rojo) a partir de su valor interno ($S = 1$) dependiendo del espesor de la capa activa o de las condiciones de reciclado del fotones. Con la ayuda de la ecuación (28), podemos reescribir la ecuación (34) como

$$P_{net} = \eta_e BN^2(h\nu - h\nu_f) + ANh\nu + CN^3h\nu + \Delta P \quad (36)$$

La ecuación (36) describe el enfriamiento óptico de un semiconductor en una forma sencilla mediante la introducción de una recombinación radiativa inhibida ($\eta_e B$) y una energía fotónica media desplazada $h\nu_f$ de la luminiscencia escapada. Además, esta ecuación indica que se produce el enfriamiento óptico cuando $P_{net} < 0$, lo que requiere una contribución dominante de la recombinación radiativa con $h\nu < h\nu_f$. La eficiencia de enfriamiento η_c se define como la relación:

$$\eta_c = -\frac{\eta_e BN^2(h\nu - h\nu_f) + ANh\nu + CN^3h\nu + \Delta P}{\eta_e BN^2h\nu + ANh\nu + CN^3h\nu + \Delta P} \quad (37)$$

esta ecuación (37) indica que se puede obtener eficiencia de enfriamiento $> 100\%$ si la energía del fotón emitido es desplazado al azul por lo menos dos veces la energía del fotón absorbido ($h\nu_f > 2h\nu$). La diferencia de temperaturas entre la muestra y el medio ambiente está definida por $\Delta T = T_S - T_R$, donde T_S y T_R son las temperaturas de la muestra y el medio ambiente, respectivamente. ΔT es una

expresión que se refiere a la temperatura de estado estable alcanzada por la muestra a la carga neta de calor de los alrededores a esa temperatura. Por lo tanto, la ecuación (38) puede estar relacionada con la carga de calor derivada de la absorción neta de la radiación de cuerpo negro de temperatura ambiente [57], [58]:

$$T = - \frac{[\alpha(\nu)I + \Delta P] - [\eta_e B N^2 h \tilde{\nu}_f]}{4A_v \epsilon_{eff} \sigma_B T_R^3} \quad (38)$$

donde A_v es el volumen neto de la muestra, ϵ_{eff} es la emisividad efectiva, y σ_B es la constante de Stefan-Boltzmann.

3.3. CALCULOS Y RESULTADOS

3.3.1 VALOR DE LOS PARAMETROS USADOS EN LOS CALCULOS

Los valores típicos utilizando valores típicos de la tabla 1.

TABLA 1
VALORES TÍPICOS DE LOS PARÁMETROS USADOS EN LOS CÁLCULOS

Parámetro	Símbolo	Valor
Constante de Planck	h	$4.13566733 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$ $6.63 \times 10^{-34} \text{ m}^2\cdot\text{Kg}\cdot\text{s}^{-1}$
Constante de Dirac	\hbar	$6.582118 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$
Masa efectiva del electrón en CdTe	m_{nw}	$0.1m_0$
Masa efectiva del electrón en CdS	m_{nb}	$0.2m_0$
Masa efectiva del hueco en CdTe	m_{pw}	$0.4m_0$
Masa efectiva del hueco en CdS	m_{pb}	$0.7m_0$
Masa del electrón en el vacío	m_0	$9.1093 \times 10^{-31} \text{ Kg}$
Índice de grupo del CdTe	n_g	3.2
Tiempo de pérdidas	τ_{loss}	$2.5 \times 10^{-11} \text{ s}$
Tiempo de scattering entre bandas	τ_{in}	$1 \times 10^{-12} \text{ s}$
Velocidad de la luz	c	$299792458 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$
Reflectividad de faceta	R	0.3
Coefficiente de Einstein para la probabilidad de recombinación Espontanea	A_b	$2 \times 10^{-10} \text{ cm}^{-3}\cdot\text{s}^{-1}$
Coefficiente de recombinación no radiativa	B	$4 \times 10^{-16} \text{ m}^3\cdot\text{s}^{-1}$
Coefficiente de Auger	C	$4 \times 10^{-42} \text{ m}^6\cdot\text{s}^{-1}$
Constante de Stefan-Boltzmann	σ_B	$5.67 \times 10^{-8} \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-4}$

3.3.2 PRIMER Y SEGUNDO NIVEL DE ENERGIA EN LA BANDA DE CONDUCCION DE LA HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe

Para los cálculos del primer y segundo nivel de energía en la banda de conducción de la heteroestructura analizada, se utilizaron las diferencias de banda prohibida entre CdS y CdTe de $q\Delta E_c = 654$ meV para la banda de conducción y $q\Delta E_v = 436$ meV para la banda de valencia, que corresponden respectivamente a 60% y el 40% de la diferencia total. Se resolvió la ecuación estándar de Schrödinger bajo la consideración de masa efectiva utilizando los valores típicos de la Tabla 1, tal como se describe en el punto 1.6. El primer y segundo nivel de energía, E_{1n} y E_{2n} , en la banda de conducción calculados se muestra en Figura 9.

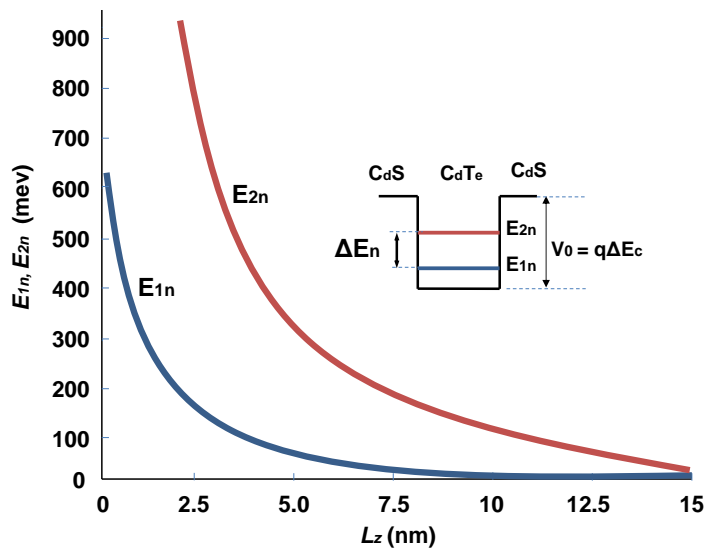


Figura 9. Los niveles de energía de la banda de conducción E_{1n} y E_{2n} en función del ancho del pozo.

De la Figura 9 se puede observar que a medida que el ancho de la capa activa en el pozo cuántico de CdS/CdTe/CdS, tanto el primer como el segundo nivel de energía disminuyen y que a partir de 5 nm de ancho, el primer nivel E_{1n} posee energías menores a 50 meV mientras que el segundo nivel E_{2n} posee energías menores a 300 meV.

3.3.3 PRIMER Y SEGUNDO NIVEL DE ENERGIA EN LA BANDA DE VALENCIA DE LA HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe

Similar que para el caso de la banda de conducción, para los cálculos del primer y segundo nivel de energía en la banda de valencia se utilizaron las diferencias de banda prohibida entre CdS y CdTe de $q\Delta E_c = 654$ meV para la banda de conducción y $q\Delta E_v = 436$ meV para la banda de valencia, que corresponden respectivamente a 60% y el 40% de la diferencia total. Se resolvió la ecuación estándar de Schrödinger bajo la consideración de masa efectiva utilizando los valores típicos de la Tabla 1, tal como se describe en el punto 1.6. El primer y segundo nivel de energía, E_{1p} y E_{2p} , en la banda de conducción calculados se muestra en la Figura 10.

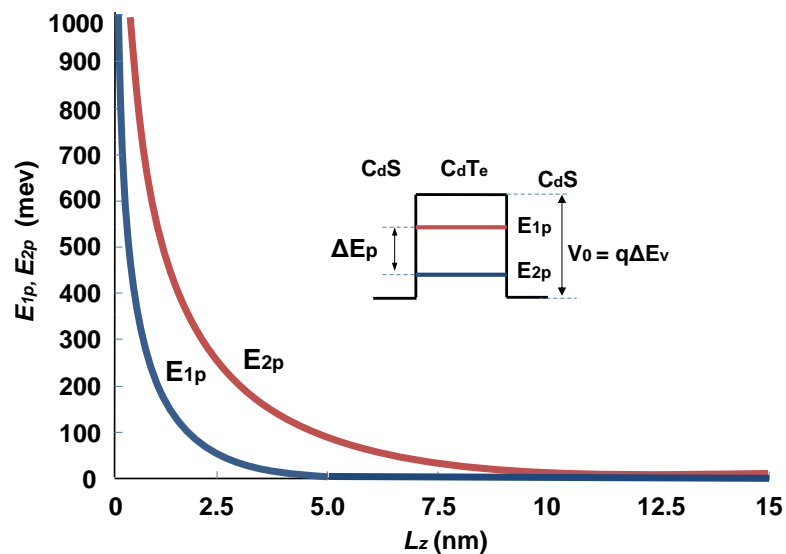


Figura 10. Los niveles de energía de la banda de valencia E_{1p} y E_{2p} en función del ancho del pozo.

De la Figura 10 se puede observar que a medida que el ancho de la capa activa en el pozo cuántico de CdS/CdTe/CdS, tanto el primer como el segundo nivel de energía disminuyen y que a partir de 2.5 nm de ancho el primer nivel E_{1p} posee energías menores a 50 meV mientras que el segundo nivel E_{2p} posee energías menores a 300 meV.

3.3.4 CALCULO DEL COEFICIENTE DE ABSORCION DE LA HETEROESTRUCTURA DE CdS/CdTe

Los niveles energéticos cuasi-Fermi, E_{Fn} y E_{Fp} , se obtienen resolviendo numéricamente la ecuación de neutralidad de cargas [ecuación (11)] aplicado en un QW. Una vez obtenidos los niveles cuasi-

fermi, el coeficiente de absorción $\alpha(\nu)$ se obtiene usando la ecuación (25). La Figura 11 muestra el espectro de absorción para dos valores diferentes de E_{Fn} . El borde de absorción para la curva de $E_{Fn} = 75 \text{ meV}$ comienza a aumentar a 1,58 eV. Adicionalmente, la Figura 11 muestra el corrimiento de la longitud de onda hacia el azul del borde de absorción mientras el nivel de Fermi se mueve hacia la banda de conducción. En los cálculos, $g(E)$ se consideró con un tiempo de dispersión constante $\tau_{in} = 1 \times 10^{-12} \text{ s}$, y $E_g = ah\nu$, donde $a = (mn/mp + 1)^{-1}$, y $h\nu = h\nu - E_g - E_{1n} - E_{1p}$. De la misma manera la Figura 12 muestra el coeficiente de absorción con respecto al número de QWs en la heteroestructura. Se observa que por cada capa activa adicional de CdTe, se logra un aumento relativo de $0.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ en la absorción de fotones. Además, para todos los anchos de QW analizados, se predijo un aumento significativo en la absorción antes que la heteroestructura completa alcance los 25 QW.

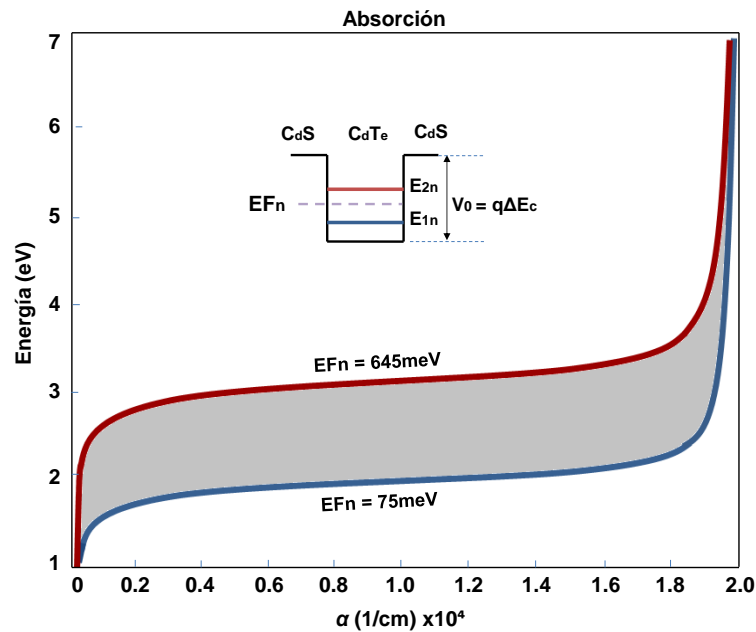


Figura 11. Coeficiente de absorción calculado para un QW de CdS / CdTe con 5 nm de ancho mientras el nivel de Fermi se mueve por encima del borde de la banda.

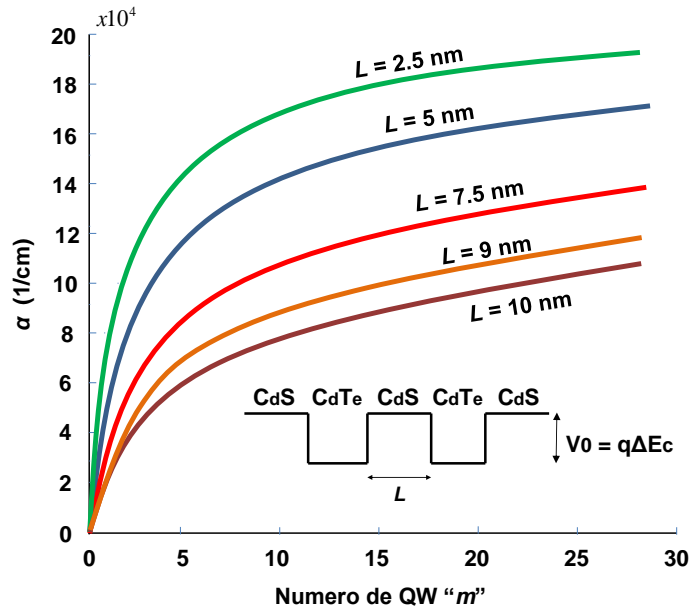


Figura 12. Coeficiente de absorción (α) versus el número de capas activas de CdTe para diferentes anchos de la capa activa L_z .

3.3.5 CALCULO DE LA FOTOLUMINICENCIA Y ABSORCION CON RESPECTO AL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA

La Figura 13 muestra una gráfica de la longitud de onda efectiva de absorción (λ_{eff}) y longitud de onda de emisión de la PL (λ_{pl}) con respecto al ancho del QW. La longitud de onda de absorción efectiva se calculó utilizando la ecuación $\lambda_{eff} = 1.24 / (E_g + E_{1n} + E_{1p})$. De la Figura 13 se observa que λ_{eff} aumenta a medida que incrementa el ancho de la capa activa en el QW, esto es debido a la disminución de los niveles de energía E_{1n} y E_{1p} de la banda conducción y de la de valencia. Inversamente, λ_{pl} disminuye a medida que aumenta el ancho de la capa activa del QW. Este comportamiento permite observar un corrimiento hacia el azul de λ_{pl} con respecto a λ_{eff} a partir del punto de intersección entre las dos curvas el cual se da en un ancho de 1.1 nm del QW. Por lo tanto, el fotón emitido acarreará calor del material ya que la energía emitida será más alta que la energía absorbida. Como resultado, el material se enfriará.

La Figura 14 muestra el ancho de la capa activa del QW contra la longitud de onda de emisión y la densidad espectral de fotoluminiscencia de un QW de CdSe/CdTe. Para obtener la Figura 14 el ancho del QW se varió desde 0.5 nm a 10.5 nm en el cálculo de $f_c(E)$ y se usó la ecuación (33). En la

Figura 14 se puede observar un pico de densidad PL superior a $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ para un ancho de 9 nm en la capa activa del QW. Este pico se da a una longitud de onda de emisión de $0.4 \mu\text{m}$. El ancho del QW de 9 nm es un ancho óptimo para emisión de luminiscencia en el rango mostrado en la figura.

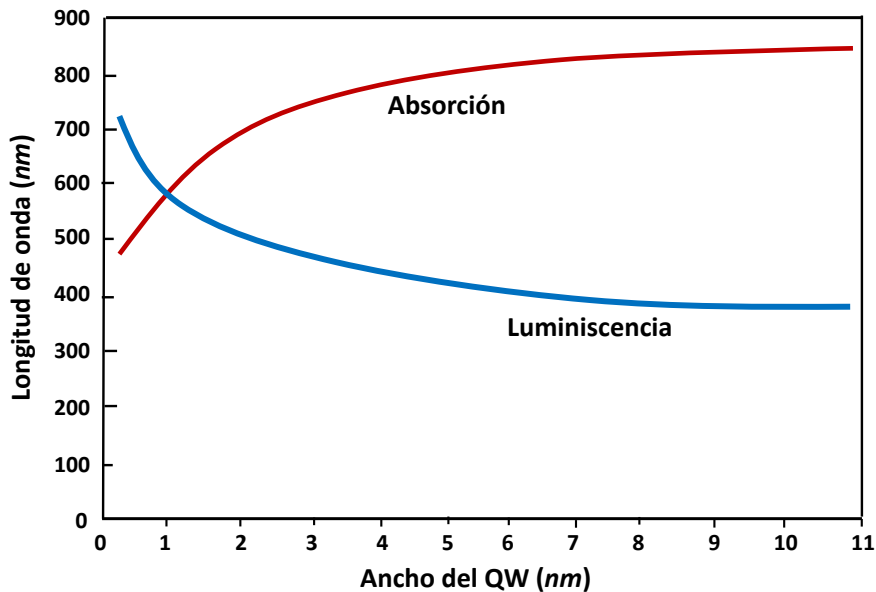


Figura 13. Longitud de onda efectiva de absorción (λ_{eff}) y la longitud de onda de emisión de fotoluminiscencia (PL) (λ_{pl}) versus anchura del QW.

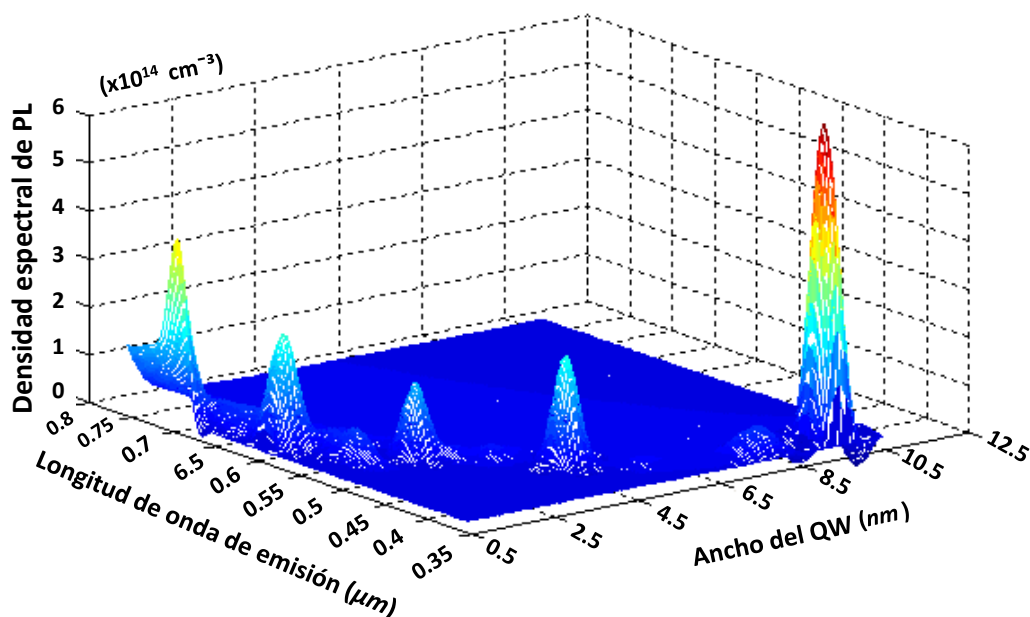


Figura 14. Ancho del pozo cuántico contra la longitud de onda de emisión y la densidad espectral de fotoluminiscencia de un QW de CdSe/CdTe.

3.3.6 CALCULO DE LA DENSIDAD DE POTENCIA CON RESPECTO AL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA

La Figura 15 muestra una gráfica de la densidad de potencia neta contra con el ancho de la capa activa del QW. La densidad de potencia neta se calculó como la diferencia entre la potencia absorbida de la luz incidente (P_{abs}) y la potencia de la luminiscencia que se escapa (P_{le}). Se observa en la Figura 15 que la densidad de potencia neta disminuye a medida que aumenta el ancho de la capa activa del QW. Este comportamiento confirma que se produce enfriamiento óptico cuando se satisface que $P_{net} < 0$. Esta condición satisface una contribución dominante de la recombinación radiactiva con $h\nu < h\nu_f$. Además, la Figura 15 muestra una $P_{net} < -5 \text{ W/m}^2$ para un ancho de la capa activa del QW de 9 nm.

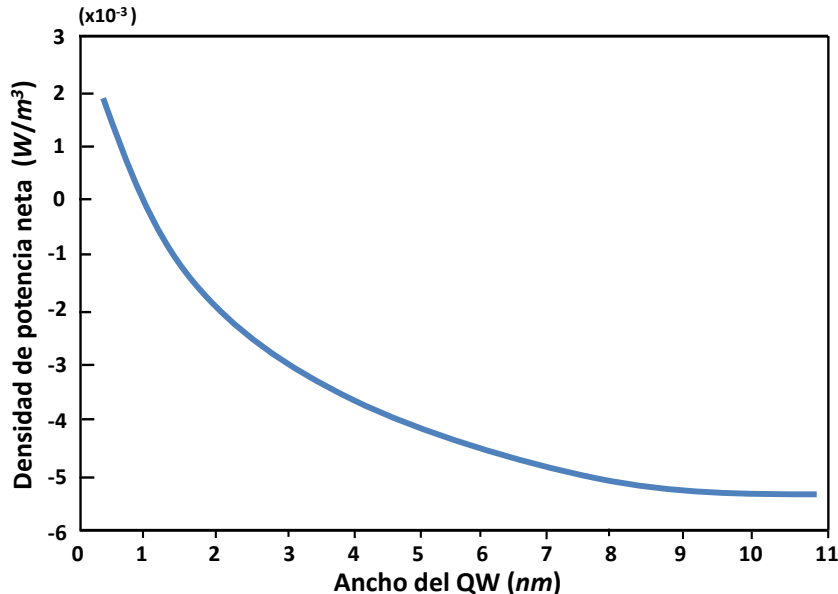


Figura 15. Densidad de potencia neta contra el ancho de la capa activa el QW. La densidad de potencia neta se calculó como la diferencia entre la potencia absorbida de la luz incidente (P_{abs}) y la de la luminiscencia que se escapa (P_{le}).

3.3.7 CALCULO DE LA DENSIDAD DE POTENCIA CONTRA EL NUMERO DE CAJAS CUANTICAS EN LA HETEROESTRUCTURA

La Figura 16 muestra una gráfica de la densidad de potencia neta contra al número de QW en la heteroestructura completa. El ancho del QW considerado fue 9 nm. En la Figura 17 se observa que la densidad de potencia neta disminuye a medida que el número de QW aumenta en la

heteroestructura completa. Este comportamiento es el esperado ya que el área de absorbanza aumenta a medida que se incrementa el número de QWs. Por otra parte, también se observa que por cada cinco capas activas adicionales de CdTe, disminuye relativamente de $0.5 \times 10^{-2} \text{ W/m}^2$ la densidad de potencia neta.

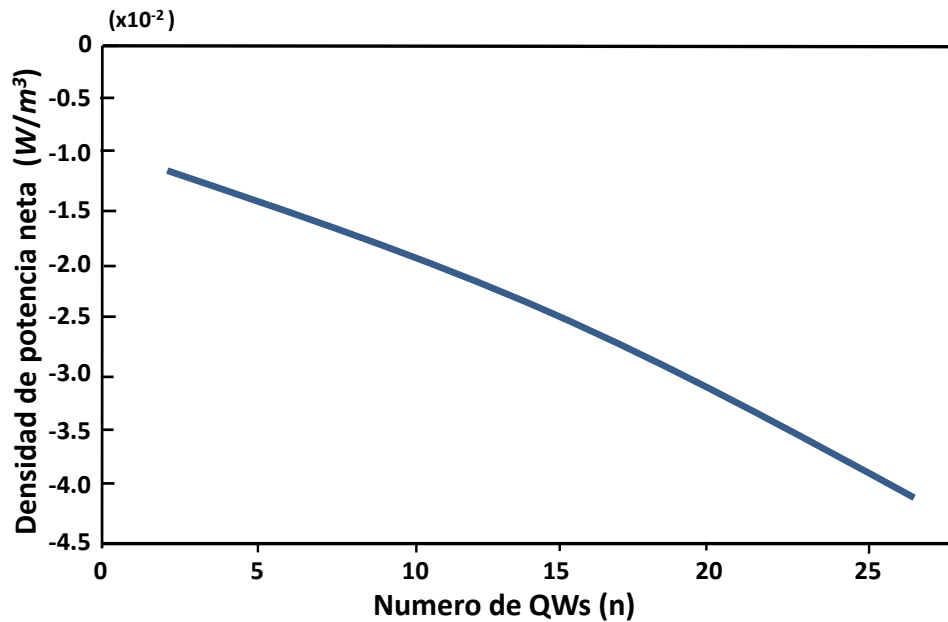


Figura 16. Densidad de potencia neta contra el número de QWs en la heteroestructura completa. El ancho del QW considerado fue 9 nm.

3.3.8 CALCULO DEL GRADIENTE DE TEMPERATURA ALCANZADO CONTRA EL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA

El comportamiento descrito anteriormente, donde la densidad de potencia neta disminuye a medida que el ancho del QW y el número de QWs se incrementan en la hetero-estructura completa, sugiere reducción en la temperatura del material. Para investigar esta hipótesis, calculamos el cambio de temperatura del material y la eficiencia de enfriamiento como funciones del ancho de la capa activa del QW. El ancho del QW se varió de 0.1 a 11 nm. La Figura 17 muestra una gráfica del gradiente de temperatura contra el ancho de la capa activa del QW para un volumen de heteroestructura completa de 10 mm^3 suponiendo $\epsilon_{\text{eff}} = 1$. De la Figura 17 se observa que a medida que el ancho de capa activa del QW aumenta el gradiente de temperatura también aumenta.

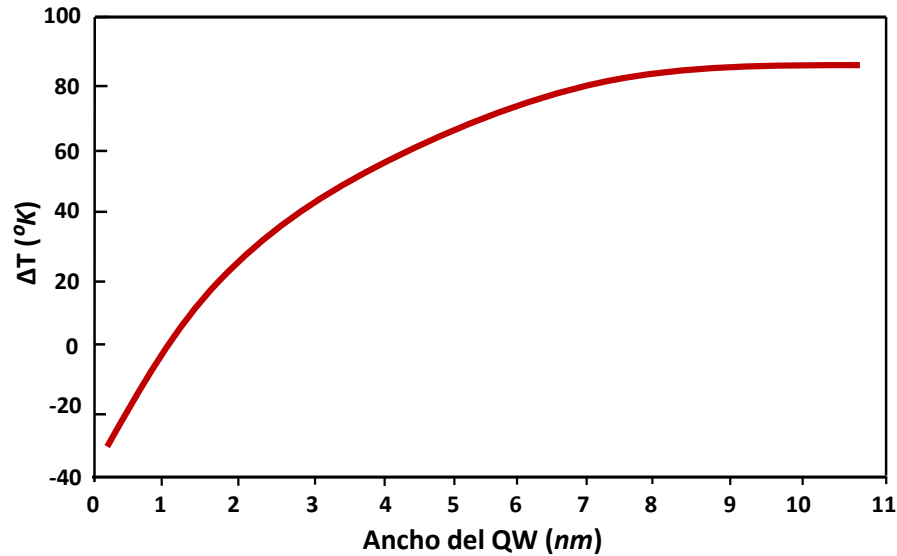


Figura 17. Gradiente de temperatura contra el ancho del QW.

3.3.9 CALCULO DE LA EFICIENCIA DE ENFRIAMIENTO CONTRA EL GROSOR DE LA CAPA ACTIVA

La Figura 18 muestra una gráfica de la eficiencia de enfriamiento (η_c) contra el ancho de la capa activa del QW. Se observa que la eficiencia de enfriamiento aumenta a medida que el ancho de la capa activa del QW aumenta. Por otra parte, se predice una eficiencia de enfriamiento superior al 100% cuando el ancho de la capa activa del QW se aproxima a 9 nm. Se espera una eficiencia de enfriamiento $> 100\%$ cercano a 9 nm ya que λ_{eff} es el doble de λ_{pl} , por lo tanto $h\nu_f > 2h\nu$.

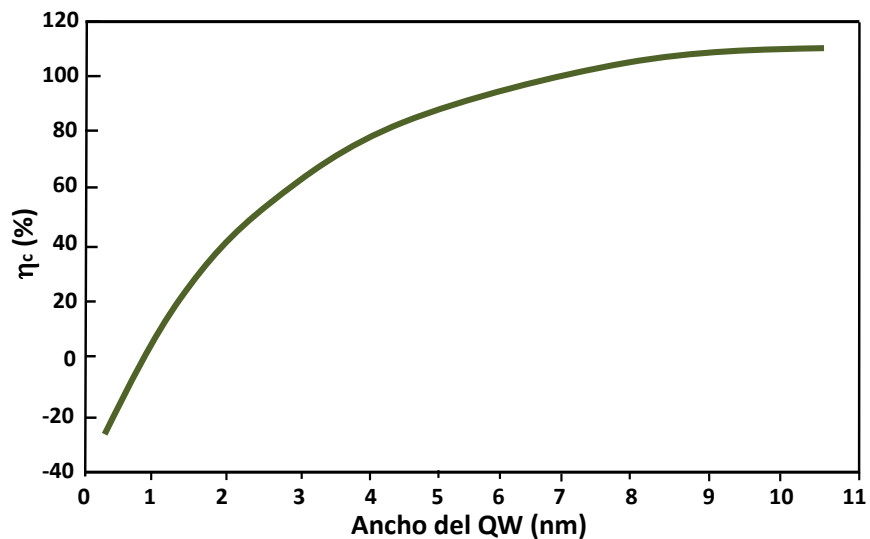


Figura 18. Gráfico de la eficiencia de enfriamiento (η_{cool}) contra el ancho de pozo cuántico.

CAPÍTULO 4.

PRESENTACIÓN DE LAS PUBLICACIONES REALIZADAS

Los métodos, resultados y conclusiones de los diferentes artículos científicos publicados en este trabajo, pueden ser consultados en los anexos correspondientes. En el anexo uno se encuentra el artículo titulado “Low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well heterostructure for optical refrigeration” en el anexo dos se encuentra el artículo titulado “Comparison of Bamboo and Cotton Performance in Warm Environment”. El primero publicado en el Journal of Nanophotonics de la asociación internacional del óptica y fotónica (SPIE), y el segundo se encuentra actualmente en revisión por pares expertos en la revista DYNA editada por la Universidad Nacional de Colombia facultad de Minas.

4.1 LOW DIMENSIONAL CdS/CdTe MULTIPLE-QUANTUM WELL HETEROSTRUCTURE FOR OPTICAL REFRIGERATION

En este artículo, realizamos una investigación numérica de las condiciones de enfriamiento óptico en hetero-estructura de baja dimensión de CdS/CdTe con simple y múltiples cajas cuántica (MQW). En estas estructuras los portadores inyectados en la región activa son limitados a moverse mecánicamente en una dimensión (1D). Los efectos del confinamiento cuántico de cargas en el proceso de absorción de fotones y fotoluminiscencia se analizaron bajo condiciones de enfriamiento. Aún más importante, los espectros de absorción y fotoluminiscencia de la heteroestructura de CdS/CdTe para condiciones de enfriamiento se definieron en términos del espesor de la capa absorbidora (capa activa) y el número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa.

La realización de la investigación para este artículo está basado en el hecho de que en la actualidad el mayor desafío para lograr temperaturas por debajo de 10° kelvin en materiales semiconductores a través de la conversión ascendente de fotoluminiscencia, es que a estas temperaturas, en los semiconductores los componentes de fonones-acústicos predominan y la tasa de dispersión de estos se vuelve comparable a la tasa de transición radiactiva de banda a banda. Este problema puede ser aliviado significativamente mediante el empleo de sistemas de confinamiento cuántico, donde la relajación de la conservación del vector de onda en la dirección de confinamiento reduce la magnitud de la conductividad del material casi tres veces su valor original. A pesar de que

estudios previos han reportado análisis teóricos y experimentales de las características de enfriamiento óptico en materiales semiconductores burdos, la transición de electrones de banda a banda debido a la absorción y emisión de fotones en condiciones de enfriamiento óptico en sistemas de confinamiento exhiben efectos cuánticos debido a sus dimensiones de escala manométrica. Estos efectos no han sido completamente analizados en los estudios teóricos convencionales.

4.1.1 PARTICIPACION DE CADA AUTOR EN LA PUBLICACION

Para la obtención de los resultados publicados en este artículo, se contó con la colaboración de otros investigadores. El artículo científico elaborado fue sometido a un proceso de revisión arbitrada ante los comités de evaluación y edición de las revistas correspondientes. A continuación se presenta para el nombre de los autores participantes y las contribuciones realizadas por cada uno de ellos:

Revista: Journal of Nanophotonics

Editorial: SPIE, International Society for Optics and Photonics

SPIE (E-ISSN: 1934-2608)

AUTOR	RESPONSABILIDAD
Julio César Tarín Cordero	Planteamiento de los modelos matemáticos, análisis de los mismos e implementación en computadora para simulación de desempeño, interpretación de resultados y redacción del artículo.
Carlos Villa Angulo	Director de tesis, asesoría en el planteamiento de los modelos matemáticos del sistema de absorción fotónica y revisión del contenido de la publicación.
Rafael Villa Angulo	Apoyo en el planteamiento de los modelos de implementación por computadora de los mismos, asesoría en el manejo de las diferentes técnicas de análisis así como revisión de análisis de información.

José Ramón Villa Angulo	Asesoría en el manejo de las diferentes técnicas de análisis así como revisión de artículo.
-------------------------	---------------------------------------------------------------------------------------------

4.2 COMPARISON OF BAMBOO AND COTTON PERFORMANCE IN WARM ENVIRONMENT

Diferentes materiales se han utilizado para fabricar ropa para ambiente cálido. Por ejemplo, algodón, nailon, neopreno, poliéster y 100% fibras sintéticas. De cualquier manera, debido a propiedades mecánicas y térmicas, la ropa de nailon y poliéster tiende a irritar la piel en condiciones de alta humedad. Igualmente, ropa de neopreno hacen a algunos usuarios sentirse incómodos debido a la alta sudoración alcanzada por el cuerpo. Por otro lado, bambú y algodón tienen baja conductividad térmica, por lo que son excelentes materiales para fabricar ropa de verano. En este estudio, las propiedades térmicas de tres estructuras producidas a partir de tres mezclas de fibras (100% bambú, 100% algodón y 50:50% bambú: algodón) son utilizadas para comparar el desempeño de bambú y algodón en ambiente cálido. Resultados teóricos muestran que el grosor de la ropa y la tasa de almacenamiento de calor en el cuerpo se reducen significativamente usando 100% bambú.

4.2.1 PARTICIPACION DE CADA AUTOR EN LA PUBLICACION

Para la obtención de los resultados publicados en este artículo, se contó con la colaboración de otros investigadores. El artículo científico elaborado fue sometido a un proceso de revisión arbitrada ante los comités de evaluación y edición de las revistas correspondientes. A continuación se presenta para el nombre de los autores participantes y las contribuciones realizadas por cada uno de ellos:

Revista: DYNA

Editorial: Universidad Nacional de Colombia, Medellín Facultad de Minas

DYNA (E-ISSN: 2346-2183)

AUTOR	RESPONSABILIDAD
Karina Solorio-Ferrales	Planteamiento de los modelos matemáticos, análisis de los mismos e implementación en computadora para simulación de desempeño,

	interpretación de resultados y redacción del artículo.
Rafael Villa-Angulo	Apoyo en el planteamiento de los modelos de implementación por computadora de los mismos, asesoría en el manejo de las diferentes técnicas de análisis así como revisión de análisis de información.
José Ramón Villa-Angulo	Asesoría en el manejo de las diferentes técnicas de análisis así como revisión de artículo.
Julio C. Tarín-Cordero	Asesoría en el manejo de las diferentes técnicas de análisis así como revisión de artículo.
Carlos Villa-Angulo	Director de tesis, asesoría en el planteamiento de los modelos matemáticos y revisión del contenido de la publicación.

CAPÍTULO 5.

CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

5.1 CONCLUSIONES

En este trabajo de tesis presentamos los resultados obtenidos en la investigación numérica de las características de enfriamiento óptico de una heteroestructura de CdS/CdTe con múltiples cajas cuánticas (MQW), así como los procedimientos y metodologías utilizadas durante el desarrollo de la misma. Los efectos del confinamiento cuántico en la absorción de fotones y la luminiscencia bajo condiciones de enfriamiento también son analizados y reportados. Los espectros de absorción y luminiscencia para condiciones de enfriamiento fueron definidos en términos del ancho y número de pozos cuánticos en la heteroestructura completa.

La heteroestructura de CdS/CdTe con múltiples cajas cuánticas analizada muestra un incremento relativo de $0.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ en la absorción de fotones por cada capa activa adicional de CdTe en la estructura completa. Un corrimiento de la absorción de fotones hacia longitudes de onda más cortas (blueshift) a medida que el nivel de Fermi penetraba en la banda de conducción también fue observado. Adicionalmente, resultaron incrementos en la longitud de onda efectiva (λ_{eff}) a medida que el ancho de la capa activa en el pozo incrementa, esto es debido al decrecimiento de los niveles de energía en la banda de conducción y valencia, E_{1n} y E_{1p} (tal como se muestra en las Fig. 4 y 5). De manera contraria, la longitud de onda de luminiscencia (λ_{pl}) decrece a medida que el ancho de la capa activa en el pozo cuántico incrementa. Este comportamiento resulta en un corrimiento hacia longitudes de onda más cortas (blueshift) de λ_{pl} con respecto a λ_{eff} que empieza en el punto de intersección dado en 1.1 nm del ancho del QW (tal como se muestra en figura 8). De aquí que el fotón emitido removerá calor hacia fuera del material dado que la energía emitida será mayor que la energía absorbida. Por lo tanto la temperatura del material descenderá.

Para un QW con ancho de 9 nm a una longitud de onda de emisión de 0.4 μm , se encontró una densidad de luminiscencia mayor a $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (tal como se muestra en la figura 9). El ancho de 9 nm en el QW puede ser considerado como óptimo para emisión de luminiscencia y enfriamiento óptico debido al corrimiento en longitud de onda (blueshift) obtenido mayor a 400 nm de λ_{pl} con respecto a λ_{eff} . Adicionalmente, a medida que ancho del QW incrementa el gradiente de temperatura y la eficiencia de enfriamiento también incrementan. Pero de lo más significativo es el hecho de que

eficacias de enfriamiento mayores a 100% son precedidas con un ancho en ña capa activa del QW cercano a 9 nm. Eficiencias de enfriamiento mayores a 100% resultan cuando λ_{eff} es por lo menos dos veces λ_{pl} . De aquí que $hv_f > 2hv$.

Aun cuando los resultados numéricos de este trabajo de tesis son para el sistema de materiales CdS/CdTe, el procedimiento propuesto en este trabajo puede ser utilizado para otros sistemas de materiales. Pero aún más importante, más allá de mejorar las técnicas existentes de análisis de enfriamiento óptico en materiales semiconductores puede ser usado para explorar las siguientes generaciones de este tipo de dispositivos.

5.2 TRABAJO FUTURO

Debido a que este trabajo de tesis se concentró en el análisis numérico de los efectos de enfriamiento óptico en heteroestructuras de CdS/CdTe de baja dimensión, no se ha probado de manera práctica los resultados encontrados. Por lo que el trabajo futuro planteado con mayor importancia es el crecimiento de las estructuras estudiadas. Sintetizar CdS y CdTe bajo la técnica solvotérmica para la síntesis de esferas coloidales aprovechando la reacción que se da entre una matriz polimérica (PVP), una sal de cadmio/telurio/sulfuro y la tiourea en una solución tampón amoniacal alcalina; técnica que permite controlar tamaños y distribución de partículas, por lo que es posible la obtención de películas de CdS y CdTe que sean delgadas, homogéneas, duras, adherentes y transparentes. Posteriormente, caracterizar las propiedades ópticas de los materiales y las películas mediante técnicas de espectrofotometría FTIR, UV-visible y Fotoluminiscencia (PL) para estudiar de manera teórico - práctica su capacidad para absorber fotones en diferentes espectros de emisión así como su capacidad practica de enfriamiento óptico.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] T. W. Hänsch and A. L. Schawlow, "Cooling of gases by laser radiation," *Opt. Commun*, vol. 13, pp. 68–69, 1975.
- [2] J. Dalibard and C. Cohen-Tannoudji, "Dressed-atom approach to atomic motion in laser light: the dipole force revisited," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 2, no. 11, pp. 1707–1720, 1985.
- [3] W. D. Chu, S. Cohen-Tannoudji, C. Philips, "for Development of methods to cool and trap atoms with laser light.," *Nobel Prize Phys.*, 1997.
- [4] E. A. Cornell, W. Ketterle, and C. E. and Weiman, "for the achievement of Bose-Einstein condensation in dilute gases of alkali atoms, and for early fundamentals studies of the properties of the condensates.," *Nobel Prize Phys.*, 2001.
- [5] P. Pringsheim, "Zwei Bemerkungen über dan Unterschied von Lumineszenz und Temperaturstrahlung," *ZeitschriftPhysik*, vol. 57, no. 11, pp. 739–746, 1929.
- [6] S. I. Vavilov, "Some remarks on the Stokes of fluorescent liquids," *J. Physics-USSR*, vol. 9, pp. 68–73, 1945.
- [7] S. I. Vavilov, "Photoluminescence and thermodynamics," *J. Physics-USSR*, vol. 10, pp. 499–501, 1946.
- [8] P. Pringsheim, "Some remarks concerning the difference between luminescence and temperature radiation, anti-Stokes photoluminescence," *J. Physics-USSR*, vol. 10, pp. 495–498, 1946.
- [9] L. D. Landau, "On the thermodynamics of photoluminescence," *J. Physics-USSR*, vol. 10, pp. 503–506, 1946.
- [10] A. Kastler, "Some suggestions concerning the production and detection by optical means of inequalities in populations of levels of spatial quantization in atoms," *J. Phys. Radium*, vol. 11, pp. 255–265, 1950.
- [11] S. Yatsiv, "Anti-Stokes fluorescence as a cooling process," *Adv. Quantum Electron. (ed. Singer, J.R.)*, pp. 200–213, 1961.
- [12] T. Kushida and J. E. Geusic, "Optical Refrigeration in Nd-Doped Yttrium Aluminum Garnet," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 21, no. 16, pp. 1172–1175, 1968.
- [13] R. I. Epstein, M. I. Buchwald, B. C. Edwards, T. R. Gosnell, and C. E. Mungan, "Observation of laser-induced fluorescent cooling of a solid.," *Nature*, vol. 377, pp. 500–503, 1995.
- [14] M. P. Hehlen, R. I. Epstein, and H. Inoue, "Model of laser cooling in the Yb³⁺-doped fluorozirconate glass ZBLAN," *Phys. Rev. B*, vol. 75, pp. 144302:1–13, 2007.
- [15] X. Wang, S. Chang, J. Yang, M. Zhou, D. Cao, and J. Tan, "Fluorescence reabsorption calculation and influence on solid-state optical cooling.," *Appl. Opt.*, vol. 46, pp. 8446–8452, 2007.
- [16] G. Nemova and R. Kashyap, "Optimization of the dimensions of an Yb³⁺:ZBLAP optical fiber sample for laser cooling of solids.," *Opt. Lett.*, vol. 33, pp. 2218–2220, 2008.
- [17] G. Nemova and R. Kashyap, "Optimization of tapered fiber sample for laser cooling of solids.," *Proc. SPIE*, vol. 7228, pp. 72280J:1–11, 2009.

- [18] S. R. Bowman, "Laser without internal heat generation.," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 35, pp. 115–122, 1999.
- [19] S. N. Andrianov and V. V. Samartsev, "Solid-state lasers with internal laser refrigeration effect.," in *Proceeding of the SPIE*, 2001, vol. 4605, pp. 208–213.
- [20] N. Vermeulen, C. Debaes, P. Muys, and H. Theinpont, "Mitigating heat dissipation in Raman lasers using coherent anti-Stokes Raman scattering.," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 093903: 1–4, 2007.
- [21] G. Nemova, "Laser cooled high-power fiber amplifier.," 2009.
- [22] G. Nemova and R. Kashyap, "High-power fiber amplifier with laser cooled cladding.," Munich, Germany, 2009.
- [23] G. Rupper, N. H. Kwong, and R. Binder, "Large Excitonic enhancement of optical refrigeration in semiconductor," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 97, pp. 117401:1–4, 2006.
- [24] D. Huang, T. Apostolova, P. M. Alsing, and D. A. Cardimona, "Theoretical study of laser cooling of a semiconductor," *Phys. Rev. B*, vol. 70, pp. 033203:1–4, 2004.
- [25] D. Huang, T. Apostolova, P. M. Alsing, and D. A. Cardimona, "Spatially selective laser cooling of carriers in semiconductor quantum wells," *Phys. Rev. B*, vol. 72, pp. 195308:1–8, 2005.
- [26] T. Apostolova, D. Huang, P. M. Alsing, and D. A. Cardimona, "Comparison of laser cooling of the lattice of wide band-gap semiconductors using nonlinear or linear optical excitations," *Phys. Rev. A*, vol. 71, pp. 013810:1–6, 2005.
- [27] H. Gauck, T. H. Gfroerer, M. J. Renn, E. A. Cornell, and K. A. Bertness, "External radiative quantum efficiency of 96% from a GaAs/GaInP heterostructure.," *Appl. Phys. A.*, vol. 64, pp. 143–147, 1997.
- [28] E. Finkeissen, M. Potemski, P. Wyder, L. Vina, and G. Weimann, "Cooling of a semiconductor by luminescence up-conversion.," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 75, pp. 1258–1260, 1999.
- [29] S. Eshlaghi, W. Worthoff, A. D. Wieck, and D. Suter, "Luminescence upconversion in GaAs quantum wells," *Phys. Rev. B*, vol. 77, p. 245317: 1–7, 2008.
- [30] M. P. Hasselbeck, M. Sheik-Bahae, and R. I. Epstein, "Effect of high carrier density on luminescence thermometry in semiconductors.," in *Proceeding of the SPIE*, 2007, vol. 6461, p. 646107: 1–5.
- [31] R. P. Martin, J. Velten, A. Stintz, K. J. Malloy, R. I. Epstein, M. Sheik-Bahae, M. P. Hasselbeck, B. Imangholi, S. T. P. Boyd, and T. M. Bauer, "Nanogap experiments for laser cooling: a progress report.," in *Proceeding of the SPIE*, 2007, vol. 6461, p. 64610h: 1–4.
- [32] L. Jian, C. Jie, M. N. Sestak, and R. W. Collins, "Optics of CdS/CdTe Thin-Films Photovoltaics," *IEEE J. Photovoltaics*, vol. 1, no. 2, pp. 187–193, 2011.
- [33] J. G. Werthem, A. L. Fahrenburch, A. L. Bube, and J. C. Zesch, "Surface Preparation Effects on Efficient Indium-tin-Oxide-CdTe and CdS-CdTe Heterojunction Solar Cells," *J. Appl. Phys.*, vol. 54, pp. 2750–2756, 1983.
- [34] M. Wimbor, A. Romero, and M. Igalson, "Electrical characterization of CdS/CdTe Photovoltaic devices," *Opto-Electronics Rev.*, vol. 8, pp. 375–377, 2000.

- [35] S. H. Demtsu and J. R. Sites, "Quantification of Losses in Thin-Film CdS/CdTe Solar Cells," in *IEEE Photovoltaics Specialists Conference*, 2005, pp. 347–350.
- [36] A. Rios-Flores, O. Ares, J. M. Camacho, V. Rejon, and J. L. Pena, "Procedure to obtain higher than 14% efficient thin film CdS/CdTe solar cells activated with HCF₂Cl gas," *Sol. Energy*, vol. 86, pp. 780–785, 2011.
- [37] T. Potlog, J. R. Sites, P. Gashing, and L. Ghimpu, "Thickness dependent properties of CdS/CdTe hetero-photo-element," in *IEEE CAS proceeding international*, 2002, pp. 223–226.
- [38] R. Kapadia, Z. Fan, and A. Javey, "Design constraints and guidelines for CdS/CdTe nanopillar based photovoltaics," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 96, pp. 103–116, 2010.
- [39] O. Virgil-Galan, E. Martín, J. Sastre-Hernández, E. Saucedo, C. M. Ruiz, G. Contreras-Puente, and A. Calderón, "A study of the optical absorption in CdTe by photoacoustic spectroscopy," *J. Mater. Sci.*, vol. 42, no. 3, pp. 7176–7179, 2007.
- [40] G. Lasher and F. Stern, "Spontaneous and stimulated recombination radiation in semiconductors," *Phys. Rev. A*, vol. 113, pp. 553–563, 1964.
- [41] J. Yao, W. Zheng, H. Opper, J. Cai, and G. W. Taylor, "Intersubband absorption in modulation doped heterostructures," *J. Appl. Phys.*, vol. 108, no. 1, p. 013104, 2010.
- [42] G. W. Taylor, "Theory of operation of the quantum-well injection laser without k-selection," *J. Appl. Phys.*, vol. 70, no. 5, pp. 2508–2535, 1991.
- [43] G. W. Taylor, "A new theoretical approach for the quantum well semiconductor laser," *Progr. Quantum Electron.*, vol. 16, pp. 73–133, 1992.
- [44] P. Harrison, *Quantum well, wires and dots*, 2nd ed. Chichester England: Wiley, 2005.
- [45] L. A. Colden and S. W. Corzine, *Diode laser and photonics integrated circuits*. New York NY: John Wiley & Sons, Inc, 1995.
- [46] P. S. Zory, *Quantum well lasers*. San Diego Ca: Academic Press Inc., 1993.
- [47] G. W. Taylor, "The use of Einstein's coefficient to predict the theory of operation of a semiconductor laser," *J. Appl. Phys.*, vol. 68, pp. 3122–3139, 1990.
- [48] L. A. Kosyachenco, E. V. Grushko, O. L. Maslyanchuk, and X. Mathew, "Effect of absorber layer parameters on charge collection in thin-film CdS/CdTe solar cell," in *IEEE Photovoltaics Specialists Conference*, 2008, pp. 1–4.
- [49] M. Sheik-Bahae and R. I. Epstein, "Can laser light cool Semiconductors?," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, p. 247403, 2004.
- [50] P. K. Basu, *Theory of optical processes in semiconductors: bulk and microstructures*. New York: Oxford University Press, 1997.
- [51] J. L. Clark and G. Rumbles, "Laser Cooling in the condensed phase by frequency up-conversion.," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 76, no. 12, pp. 2037–2040, 1996.
- [52] C. W. Hoyt, M. Sheik-Bahae, R. I. Epstein, B. C. Edwards, and J. E. Anderson, "Observation of anti-Stokes fluorescence cooling in thulium-doped glass.," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, p. 3600, 2000.

- [53] L. V. Butov, C. W. Lai, A. L. Ivanov, A. C. Gossard, and D. S. Chemla, "Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps.," *Nature*, vol. 417, pp. 47–52, 2002.
- [54] V. V. Mitin, D. I. Sementson, and N. Z. Vagidob, *Quantum Mechanics for Nanostructures*. New York: Cambridge University, 2010.
- [55] P. Asbeck, "Self-absorption effects on radiative lifetime in GaAs-GaAlAs double heterostructures," *J. Appl. Phys.*, vol. 48, pp. 820–822, 1977.
- [56] W. Van Roosbroeck and W. Shockley, "Photon-radiative recombination of electrons and holes in Germanium.," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 94, p. 1558, 1954.
- [57] X. Luo, M. D. Eisaman, and T. R. Gosnell, "Laser cooling of a solid by 21 K starting from room temperature.," *Opt. Lett.*, vol. 23, no. 8, pp. 639–641, 1998.
- [58] R. I. Epstein and M. Sheik-Bahae, *Optical Refrigeration*. Germany: Wiley-V ch, 2009.

ANEXO 1

(Low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well heterostructure for optical refrigeration)

Journal of Nanophotonics

Nanophotonics.SPIEDigitalLibrary.org

Low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well heterostructure for optical refrigeration

Julio C. Tarín-Cordero
Rafael Villa-Angulo
José R. Villa-Angulo
Carlos Villa-Angulo

SPIE.

Low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well heterostructure for optical refrigeration

Julio C. Tarín-Cordero, Rafael Villa-Angulo, José R. Villa-Angulo, and Carlos Villa-Angulo*

Autonomous University of Baja California, Institute of Engineering, s/n De la Normal Avenue, Insurgentes, Mexicali, B.C. 21280, Mexico

Abstract. The major challenge for semiconductors to achieve temperatures below 10 K by luminescence upconversion, is that at these lattice temperatures the acoustic phonon component dominates and the scattering rate becomes comparable to the band-to-band radiative transition rate. This problem can be significantly alleviated by employing quantum-confined systems, where relaxation of wave-vector conservation in the confined direction reduces material conductivity by nearly three orders of magnitude. Although previous studies have reported theoretical and experimental analyses of cooling characteristics for bulk semiconductors, the electron band-to-band transition due to photon absorption or photon emission under cooling conditions in quantum-confined semiconductor systems which exhibit quantum effects at the dimensions of several nanometers have not been completely analyzed in conventional theoretical studies. We realized a numerical investigation of optical cooling conditions for a low-dimensional CdS/CdTe multiple-quantum well heterostructure where injected carriers in the active region are quantum mechanically confined in one dimension. Effects of such quantum mechanically confined carriers on photon absorption and photoluminescence (PL) were analyzed under cooling conditions. Most importantly, the CdS/CdTe heterostructure absorption and PL spectra for cooling conditions were defined in terms of the active layer width and number of quantum wells in the complete heterostructure. © 2015 Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers (SPIE) [DOI: 10.1117/1.JNP.9.093085]

Keywords: quantum-confined system; optical refrigeration; low-dimensional CdS/CdTe heterostructure.

Paper 14109 received Oct. 2, 2014; accepted for publication Feb. 9, 2015; published online Mar. 2, 2015.

1 Introduction

In 1929, it was recognized by Pringsheim that thermal vibrational energy could be removed by anti-Stokes fluorescence if the material is excited by photons with an energy lower than the mean fluorescence energy.¹ This is known as laser cooling (optical refrigeration) by luminescence upconversion. However, optical refrigeration was not observed in ytterbium- and thulium-doped glasses until 1995.²⁻⁴ In 1997, Gauck proposed optical refrigeration in semiconductors by fabricating self-cooling semiconductor devices, where a semiconductor device and a semiconductor cooler can be grown on the same substrate.⁵ In the upconversion mechanism for bulk semiconductor luminescence, as shown in Fig. 1, electrons from the valence band make the transition to the conduction band by absorbing a photon with energy $h\nu$ from the incident light. The electrons in the conduction band experience energy exchange through inelastic collision, absorbing thermal lattice vibrations in the material. After getting energy during collisions, electrons from the conduction band move down to the valence band emitting an incoherent blue-shifted photon with energy $h\nu_f$ which is generated through radiative recombination and carries heat away from the material. As a result, the material is cooled by the incident light.⁶

*Address all correspondence to: Carlos Villa-Angulo, E-mail: villac@uabc.edu.mx

1934-2608/2015/\$25.00 © 2015 SPIE

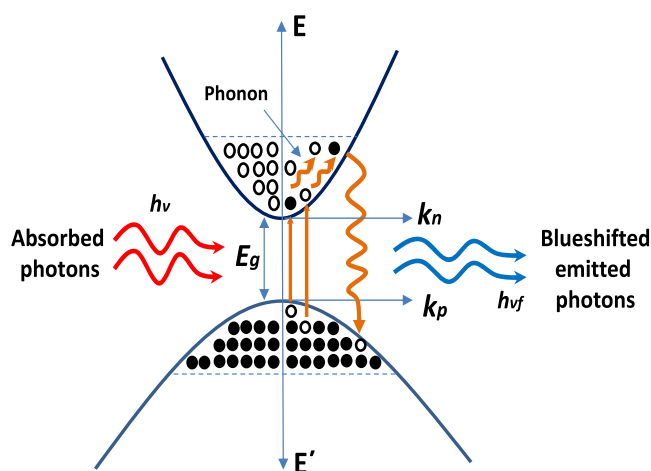


Fig. 1 Schematic of the cooling cycle in the light refrigeration of a bulk semiconductor.

Semiconductors obey Fermi–Dirac statistics; thus, the lower energy valence band remains populated even at absolute zero. Therefore, semiconductors have the potential to achieve temperatures lower than those achieved by doped glass. The major challenge for semiconductors to achieve temperatures below 10 K is that at these lattice temperatures, the acoustic phonon component dominates and the scattering rate becomes comparable to the band-to-band radiative transition rate. This allows for band-to-band radioactive transition before complete thermalization of the lattice. This problem can be significantly alleviated by employing quantum-confined systems, where relaxation of wave-vector conservation in the confined direction reduces material conductivity by nearly three orders of magnitude.⁷ Although previous studies have reported theoretical and experimental analyses of cooling characteristics for bulk semiconductors,⁸ the electron band-to-band transition due to photon absorption or photon emission, under cooling conditions in quantum-confined semiconductor systems, which exhibit quantum effects at the dimensions of several nanometers have not been completely analyzed in conventional theoretical studies. When an electron is confined within a nanometer semiconductor structure of size comparable to the de Broglie wavelength of the electron, its propagation is limited in one direction, and the electron can be described by a standing wave. The electron energy in the confining direction is no longer continuous; instead, its spectrum consists of a set of separate energy levels.⁹

In the literature, low-dimensional heterostructures of a single quantum well (QW) and multiple-quantum wells (MQWs), where injected carriers in the active region are quantum mechanically confined in one dimension (1D), have been reported as potential alternatives to circumvent the acoustic phonon component scattering rate becoming comparable to the band-to-band radiative transition rate.¹⁰ In addition, a net cooling by about 40 K using nanoribbons and nanobelts has been reported.¹¹ However, precise understanding and design of these low-dimensional heterostructures for semiconductor cooling require accurate calculation of fundamental parameters, such as static energy levels within QWs, effective absorption wavelength, quasi-Fermi level positions, photon absorption coefficient (α), photoluminescence (PL) density (R), and power cooling density (P).^{12,13,7} In addition, the optimum choice of absorber layer thickness in these low-dimensional heterostructures, which determines the cooling efficiency, relies on the exact determination of the above-mentioned parameters. Hence, theoretical models for the determination of the above-mentioned parameters would be of great importance to experimentalists, who are interested in obtaining numerical estimates and correlating these theoretical results with practical measurements.

In this paper, we report a numerical investigation of the optical cooling characteristics of a CdS/CdTe MQW heterostructure. The effects of 1-D quantum mechanical confinement in the calculation of fundamental parameters such as photon absorption coefficient, PL density, and power cooling density were analyzed. Most importantly, the CdS/CdTe heterostructure absorption and PL spectra for cooling conditions were defined in terms of the active layer width and number of QWs in the complete heterostructure.

2 Energy Diagram of a CdS/CdTe Multiple-Quantum Well Heterostructure

Figures 2(a) and 3(a) show the schematic energy-momentum diagrams of the analyzed CdS/CdTe MQW heterostructures grown on an $S_nO_2:F$ substrate in equilibrium and under the influence of an incident light, respectively. The structure consists of a set of CdS/CdTe QWs surrounded by a p -doped CdTe layer and an n -doped CdS layer. The n -type CdS with a bandgap of 2.4 eV is a suitable window material that permits the incident light to reach the absorber. However, p -type CdTe has a direct bandgap of 1.45 eV that makes it a nearly ideal absorber material.¹⁴ To illustrate the photon absorption mechanism, Figs. 2(b) and 3(b) show an enlarged image of the QW region. These diagrams show only the first QW since for most parameters it is the principal contributor. However, the effects of the other QWs may also be involved as we discuss later.

The presence or absence of free carriers in the QWs depends on the position of the quasi-Fermi level energies EF_n and EF_p , and thus, the ability to obtain an absorption response. The energy E is assumed to be zero at the conduction band edge, and increases as we move up into the conduction band. The energy E' is assumed to be zero at the valence band edge, and increases as we move down into the valence band. The rate of band-to-band absorption is the rate at which electrons in the valence band at energy E' make the transition to the conduction band at energy E by absorbing a photon with energy $h\nu$. Conversely, the rate of band-to-band PL emission is the rate at which electrons in the conduction band at energy E make the transition to the valence band at energy E' by emitting a photon with energy $h\nu_f$. In addition, ΔE_c and ΔE_v , which show the discontinuities (offsets) of the conduction and valence bands, respectively, are shown in Figs. 2(b) and 2(d). ΔE_c and ΔE_v are the energies required for the carriers to escape from the QW.

3 Theoretical Formulation

Electron-hole pair generation due to photon absorption in a semiconductor material can be described by considering a flux of photons with intensity I at photon energy $h\nu$ impinging

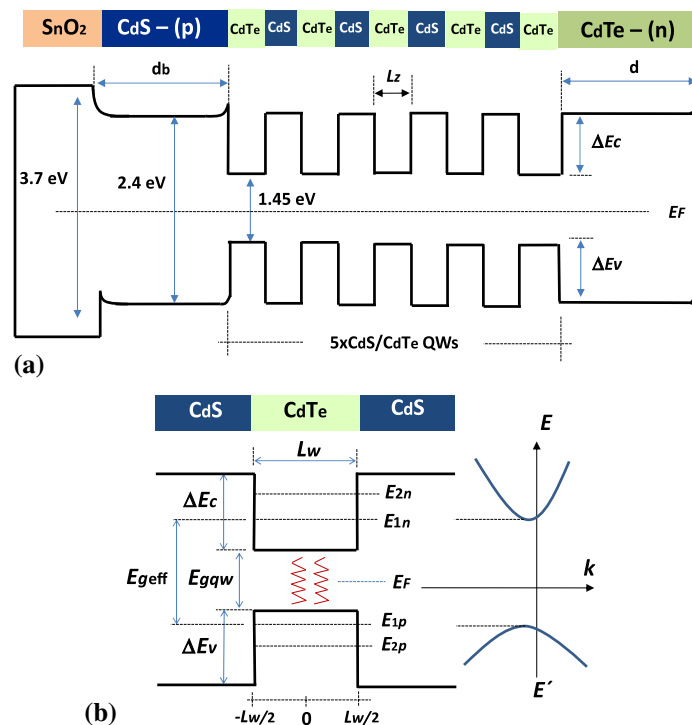


Fig. 2 Energy-momentum diagram for a CdS/CdTe multiple-quantum well (MQW) heterostructure grown on a S_nO_2 substrate. (a) Structure in equilibrium condition and (b) expanded QW region in equilibrium.

on the material. Once the flux of photons passes through the surface of the material, the electron-hole pair generation is determined by the nonradiative (AN) recombination rate, radiative recombination rate (BN^2), and Auger (CN^3) rate. Furthermore, we assume that only a fraction η_e of the total luminescence can escape the material while the remaining fraction $(1 - \eta_e)$ is trapped and recycled. By conservation of energy, the net electron-hole generation rate must balance the net recombination to photons. This can be written as^{9,15}

$$\frac{dN}{dt} = \frac{\alpha(v)I}{hv} - AN - BN^2 - CN^3 + (1 - \eta_e)BN^2, \quad (1)$$

which describes the change in electron-hole pair density as a function of time. Here $\alpha(v)$ is the inter-band absorption coefficient. The last term represents the increase in N due to reabsorption of the trapped luminescence.

Additionally, when a semiconductor QW heterostructure is under the influence of an electric field due to a uniformly irradiated light, the presence or absence of free carriers in the QWs depends on the position of the quasi-Fermi level energies EF_n and EF_p , and this determines the ability to obtain an absorption response. Once the static energy levels at the well of a quantum absorber are known, EF_n and EF_p can be obtained by numerically solving the charge neutrality equation [Eq. (2)] applied to the QW¹⁶

$$(1 + e^{EF_n/kT})(1 + e^{(EF_n - \Delta E_n)/kT}) = (1 + e^{EF_p/kT})^Z(1 + e^{(EF_p - \Delta E_p)/kT})^Z, \quad (2)$$

where $Z = m_{pw}^*/m_{nw}^*$, while ΔE_n and ΔE_p are the first-to-second electric sub-band spacing for electrons and heavy holes, respectively. Then the volume rate of absorption at the absorber layers must be proportional to the number of filled electron states in the valence band and the number of empty electron states in the conduction band. The number of filled electron states in the valence band is equal to the density of states that are available at energy E' denoted as $N_V(E')$ times the probability of occupancy given by the Fermi–Dirac distribution for the valence band, $f_V(E')$. Similarly, the number of empty electron states in the conduction band is given by the density of states that are available at energy E , denoted as $N_C(E)$, times $[1 - f_C(E)]$, which is the probability of the conduction band state being empty. Hence, the QW absorption coefficient is written as¹⁷

$$\alpha(\nu) = \frac{1}{\nu_g} \left[\bar{B}(\nu)hT_{AB}(E) + \frac{1}{\tau_{\text{loss}}} \right], \quad (3)$$

and has units of cm^{-1} . Here $\bar{B}(\nu) = A_b C^3 / 8\pi\nu^2$ is the Einstein coefficient for photon absorption with units of $\text{cm}^6 \text{J}^{-1} \text{s}^{-2}$, A_b is the Einstein coefficient for the probability of spontaneous recombination which has units of $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, c is the speed of light, $\tau_{\text{loss}} = \Gamma\tau p(\nu)$ is a time constant defining photon losses, Γ is the photon confinement factor, and $\tau p(\nu)$ is the photon lifetime for photons with frequency ν , and

$$T_{AB}(E) = \int_0^{h\bar{\nu}} \frac{D_{1n}(E)}{L_z} \frac{D_{1p}(h\bar{\nu} - E)}{L_z} \frac{1}{1 + \exp[(EF_n - E)/kT]} \frac{1}{1 + \exp[(EF_p - h\bar{\nu} + E)/kT]} \times \frac{1}{4} \frac{[h\delta\nu(EF_n)]^2}{[E - E_T(EF_n)]^2 + [h\delta\nu(EF_n)/2]^2} dE, \quad (4)$$

with the Fermi–Dirac distributions given by $f_c(E) = 1/[1 + \exp(E - EF_n)/kT]$ and $1 - f_c(E) = 1/[1 + \exp(E' - EF_p)/kT]$, where $\delta\nu$ represents the full width at half maximum of the function defined by $\delta(\nu) = 1/(2\pi\tau_{\text{in}})$, where τ_{in} is the intra-band scattering or relaxation time.

Since photon lifetime (τ_{loss}) defined by Eq. (5) depends on the number of QWs [Eq. (3)], τ_{loss} can be used to illustrate the increase in photon absorption as the number of wells increases in a multiple-coupled-well structure:¹⁸

$$\tau_{\text{loss}} = \Gamma_m \tau_p = \left\{ v_g \left[\frac{1}{\Gamma_m L} \ln \left(\frac{1}{R} \right) + \alpha_{ab}(v) + \frac{(1 - \Gamma_m)}{\Gamma_m} \alpha_{sc}(v) \right] \right\}^{-1}. \quad (5)$$

Here, τ_p is the photon lifetime, Γ_m is the confinement factor for the m 'th well given by $\Gamma_m = \sqrt{2/\pi} [mL_z/W_0]$, R is the facet reflectivity, $\alpha_{ab}(v)$ is the free-carrier photon loss, and $\alpha_{sc}(v)$ is the scattering loss, while W_0 and L are the width and length, respectively, of the complete absorber structure.

Under steady-state conditions, Eq. (1) can be rewritten as

$$0 = \frac{\alpha(v)}{hv} I - AN - \eta_e BN^2 - CN^3, \quad (6)$$

where spontaneous emission appears only through $\eta_e B$ that is inhibited by fluorescence trapping.¹⁹ It is important to note that η_e is a quantity averaged over the entire luminescence spectrum:

$$\eta_e = \frac{\int S(v)R(v)dv}{\int R(v)dv}, \quad (7)$$

where $S(\nu)$ is the geometry-dependent escape probability of photons with energy $h\nu$, and $R(\nu)$ is the PL spectral density, also known as the Kubo–Martin–Schwinger relation.^{20,21}

$$R(v) = \frac{8\pi n^2 v^2}{c^2} \alpha(v) \left\{ \frac{f_c(1 - f_v)}{(f_v - f_c)} \right\}, \quad (8)$$

where n is the index of refraction. The net power density that is deposited in the semiconductor is the difference between the power absorbed from the incident light (P_{abs}) and that of the luminescence that escapes (P_{le}):

$$P_{\text{net}} = P_{\text{abs}} - P_{\text{le}} = [\alpha(v)I + \Delta P] - [\eta_e BN^2 h\tilde{v}_f], \quad (9)$$

where the absorbed power density includes the resonant absorption $[\alpha(v)I]$ and a term ΔP that accounts for undesirable effects such as free-carrier absorption and other parasitic absorptive processes. The second term gives the escaped luminescence power density at a mean luminescence energy $h\tilde{v}_f$, defined as

$$h\tilde{v}_f = \frac{\int S(v)R(v)hvdv}{\int S(v)R(v)dv}. \quad (10)$$

It is important to note that the escaped mean luminescence energy can deviate (i.e., redshift) from its internal value ($S = 1$) depending on the thickness or photon recycling conditions. With the aid of Eq. (1), we can rewrite Eq. (9) as

$$P_{\text{net}} = \eta_e BN^2(hv - h\tilde{v}_f) + ANhv + CN^3hv + \Delta P. \quad (11)$$

Equation (11) describes the optical cooling of a semiconductor in a simple form by introducing inhibited radiative recombination ($\eta_e B$) and a shifted mean photon energy $h\tilde{v}_f$ for the escaped luminescence. In addition, this equation indicates that optical cooling occurs when $P_{\text{net}} < 0$, requiring a dominant contribution from radiative recombination with $h\nu < h\tilde{v}_f$. The cooling efficiency η_c is defined as the ratio:

$$\eta_c = - \frac{\eta_e BN^2(hv - h\tilde{v}_f) + ANhv + CN^3hv + \Delta P}{\eta_e BN^2hv + ANhv + CN^3hv + \Delta P}. \quad (12)$$

Equation (12) indicates that cooling efficiency $> 100\%$ can be obtained if the energy of the emitted photon is blue shifted to at least two times the energy of the absorbed photon ($h\tilde{v}_f > 2hv$).

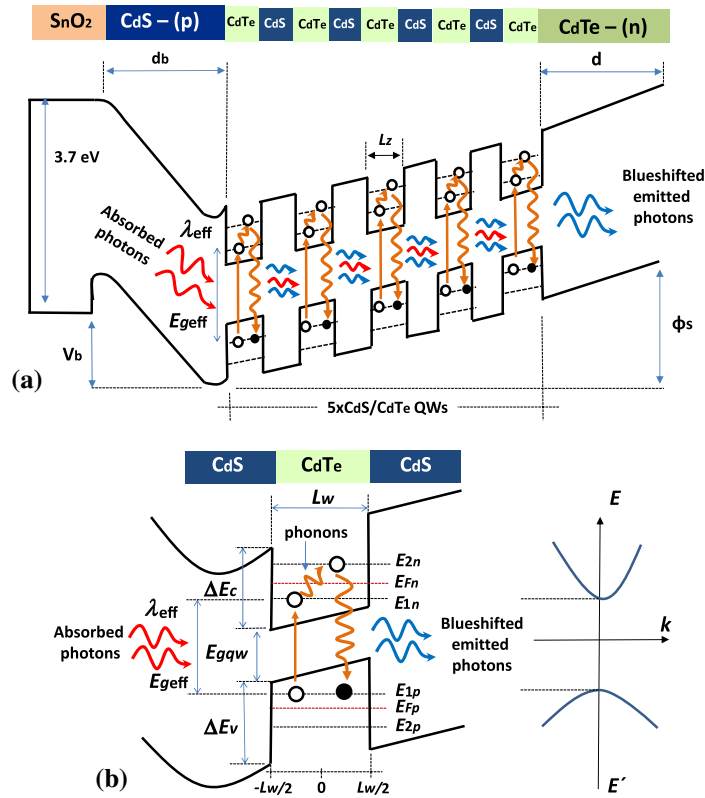


Fig. 3 Energy-momentum diagram for a CdS/CdTe MQW heterostructure grown on a S_nO_2 substrate. (a) Structure under the influence of an incident light and (b) expanded QW region under the influence of an incident light.

The observed temperature change is defined as $\Delta T = T_S - T_R$, where T_S and T_R are the temperatures of the sample and environment, respectively. ΔT is an expression that relates the steady-state temperature attained by the sample to the net heat load from the surroundings at that temperature. Hence, Eq. (9) can be related to the heat load derived from the net absorption of room temperature blackbody radiation.^{22,23}

$$T = - \frac{[\alpha(v)I + \Delta P] - [\eta_e B N^2 h \tilde{\nu}_f]}{4A_v \epsilon_{\text{eff}} \sigma_B T_R^3}, \tag{13}$$

where A_v is the net volume of the sample, ϵ_{eff} is the effective emissivity, and σ_B is the Stefan-Boltzmann constant.

4 Calculations and Results

For calculations, a bandgap difference between CdS and CdTe of $q\Delta Ec = 654$ meV for the conduction band and $q\Delta Ev = 436$ meV for the valence band, which respectively correspond to 60% and 40% of the total difference, were used. In addition, the energy levels shown in Fig. 4, E_{1n} and E_{2n} for the conduction band, and energy levels shown in Fig. 5 E_{1p} and E_{2p} for the valence band were obtained by solving the standard Schrödinger equation under both the effective mass and envelope function approximation using typical values from Table 1. The quasi-Fermi level energies, EF_n and EF_p , were obtained by numerically solving the charge neutrality equation [Eq. (2)] applied to the QW.

Figure 6 shows the absorption spectra calculated using Eq. (3) for two different values of EF_n . The absorption edge starts increasing at 1.58 eV, which is the effective bandgap for the first sub-band. In addition, Fig. 6 shows the rigid blue-shift of the absorption edge as the Fermi level moves into the conduction band. In the calculations, $g(E)$ was considered with a constant

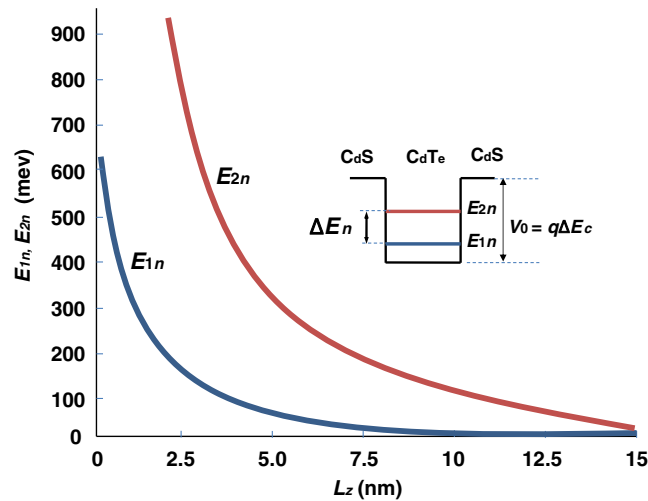


Fig. 4 Conduction-band energy levels E_{1n} and E_{2n} as a function of well width.

scattering time $\tau_{in} = 1 \times 10^{-12}$ s, and $E_T = ah\nu$, where $a = (m_n/m_p + 1)^{-1}$, and $h\nu = h\nu - E_g - E_{1n} - E_{1p}$. Figure 7 shows the absorption coefficient for the photons versus the number of QWs in the heterostructure. It was observed that for each additional active CdTe layer, a relative increase of $0.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ in photon absorption can be achieved. In addition, for all analyzed QW widths, a significant increase in absorption was predicted before the complete heterostructure reaches 25 QWs.

Figure 8 shows a plot of the effective absorption wavelength (λ_{eff}) and PL emission wavelength (λ_{pl}) versus the QW width. The effective absorption wavelength was calculated using the equation $\lambda_{eff} = 1.24/(E_g + E_{1n} + E_{1p})$. It was observed from Fig. 8 that λ_{eff} increases as the well width increases due to the decreases of the conduction and valence band energy levels E_{1n} and E_{1p} [Figs. 4 and 5]. Inversely, λ_{pl} decreases as the well width increases. This behavior allows a blue-shift of λ_{pl} with respect to λ_{eff} starting from the intersection point given at a QW width of 1.1 nm. Hence, the emitted photon will carry heat away from the material since the emitted energy will be higher than the absorbed energy. As a result, the material will cool down. Figure 9 shows the QW width versus emission wavelength versus PL spectral density of a CdS/CdTe QW. To obtain Fig. 9, the QW width was varied from 0.5 to 10.5 nm in calculation of $f_c(E)$ and Eq. (8). In Fig. 9, a PL density peak higher than $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ for a QW width of 9 nm can be observed. This peak is given at an emission wavelength of $0.4 \mu\text{m}$. The 9 nm QW width is an optimal width for luminescence emission in the shown QW width range.

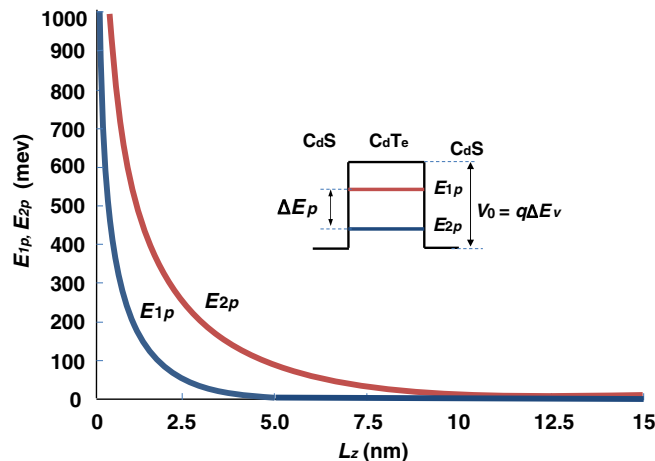


Fig. 5 Valence-band energy levels E_{1p} and E_{2p} as a function of well width.

Table 1 Typical values in calculations.

Parameter	Symbol	Value
Planck constant	h	$4.13566733 \times 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}$ $6.63 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \cdot \text{Kg} \cdot \text{s}^{-1}$
Dirac constant	\hbar	$6.582118 \times 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$
CdTe electron effective-mass	m_{nw}	$0.1m_0$
CdS electron effective-mass	m_{nb}	$0.2m_0$
CdTe hole effective-mass	m_{pw}	$0.4m_0$
CdS hole effective-mass	m_{pb}	$0.7m_0$
Free electron mass in vacuum	m_0	$9.1093 \times 10^{-31} \text{ Kg}$
CdTe group index	n_g	3.2
Loss time	τ_{loss}	$2.5 \times 10^{-11} \text{ s}$
Intra-band scattering time	τ_{in}	$1 \times 10^{-12} \text{ s}$
Speed of light	c	$299792458 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
Facet reflectivity	R	0.3
Einstein coefficient for the probability of spontaneous recombination	A_b	$2 \times 10^{-10} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$
Nonradiative recombination coefficient	B	$4 \times 10^{-16} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$
Auger coefficient	C	$4 \times 10^{-42} \text{ m}^6 \cdot \text{s}^{-1}$
Stefan-Boltzmann constant	σ_B	$5.67 \times 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$

Figure 10 shows a plot of the net power density versus the QW width. The net power density was calculated as the difference between the power absorbed from the incident light (P_{abs}) and that of the luminescence that escapes (P_{le}). It was observed from Fig. 10 that the net power density decreases as the QW width increases. This behavior confirms that optical cooling occurs when $P_{\text{net}} < 0$, satisfying a dominant contribution from the radiative recombination with

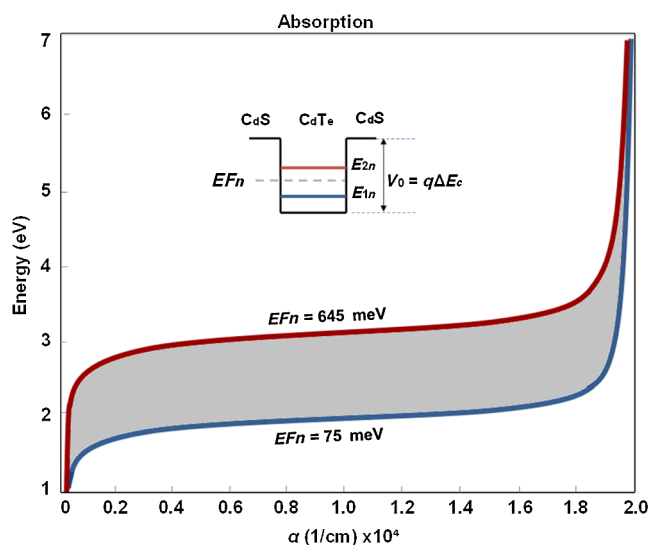


Fig. 6 Calculated absorption coefficient for a 5 nm CdS/CdTe QW as the Fermi level moves above the band edge.

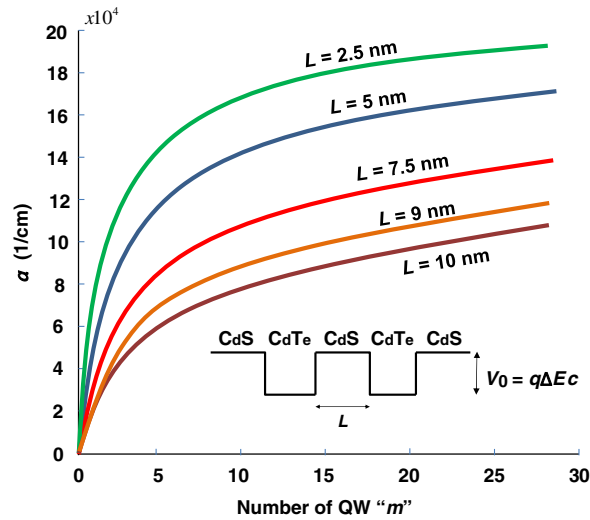


Fig. 7 Absorption coefficient (α) versus number of CdTe active layers for different active layer widths L_z .

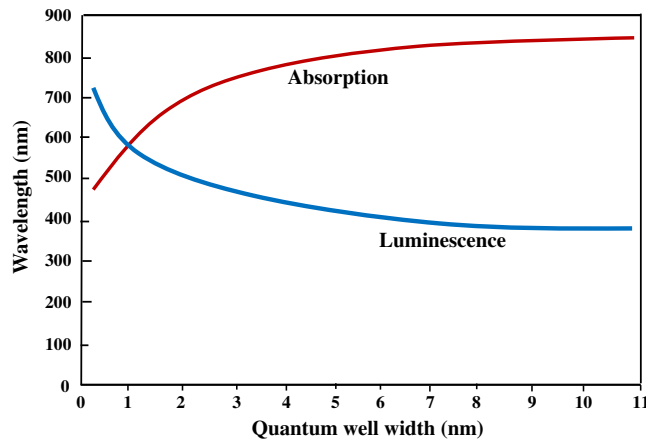


Fig. 8 Effective absorption wavelength (λ_{eff}) and photoluminescence (PL) emission wavelength (λ_{pl}) versus QW width.

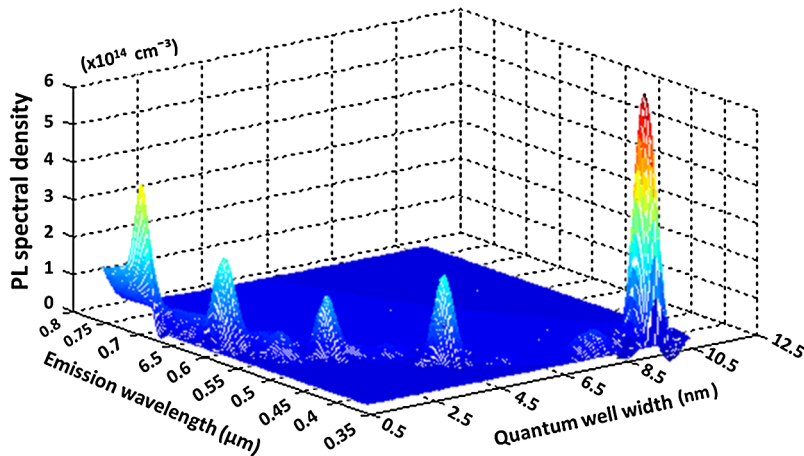


Fig. 9 Quantum well width versus emission wavelength versus photoluminescence spectral density of a CdS/CdTe QW.

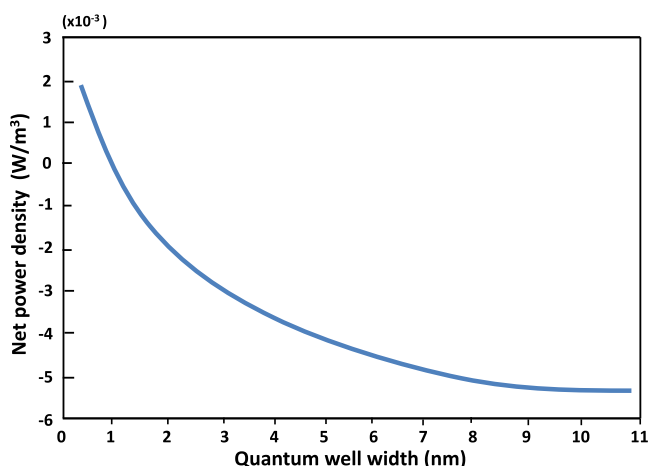


Fig. 10 Net power density versus quantum well width. The net power density was calculated as the difference between the power absorbed from the incident light (P_{abs}) and that of the luminescence that escapes (P_{le}).

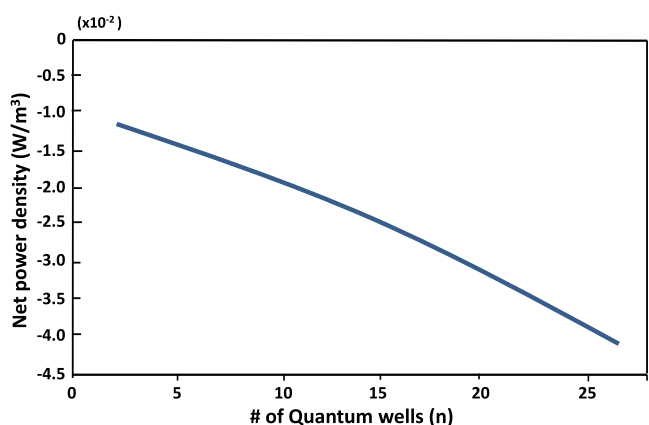


Fig. 11 Net power density versus the number of QW in the complete heterostructure. The considered QW width was 9 nm.

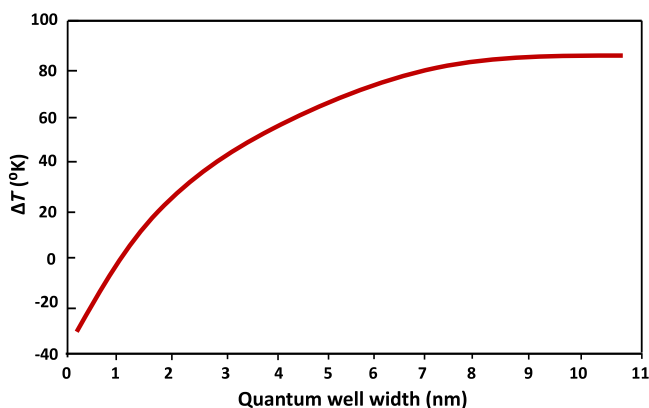


Fig. 12 Temperature gradient versus the QW width.

$h\nu < h\nu_f$. In addition, Fig. 10 shows a $P_{net} < -5 \text{ W/m}^2$ for a QW width of 9 nm. Figure 11 shows a plot of the net power density versus the number of QWs in the complete heterostructure. The QW width considered was 9 nm. It was observed from Fig. 11 that the net power density decreases as the number of QWs in the complete heterostructure increases. This behavior is as expected since the absorbance area increases as the number of QWs increases. Moreover, it was

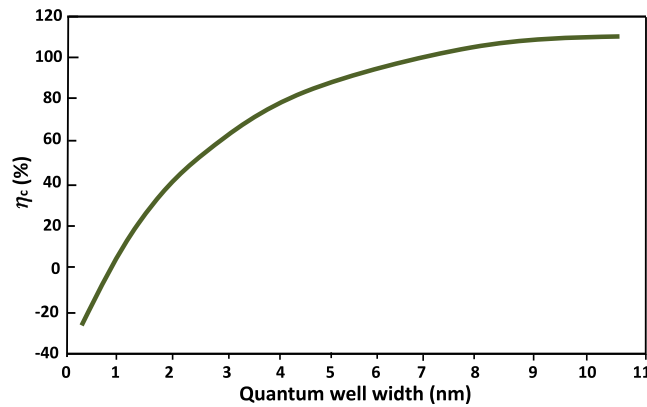


Fig. 13 Plot of the cooling efficiency (η_{cool}) versus the quantum well width.

also observed from Fig. 11 that for each five additional active CdTe layers, a relative decrease of $0.5 \times 10^{-2} \text{ W/m}^2$ in the net power density can be achieved.

The previously described behavior, where the net power density decreases as the QW width and the number of QWs in the complete heterostructure increases, suggests reduction in material temperature. To investigate this hypothesis further, we plotted the temperature change of the material and the cooling efficiency, as functions of the QW width. The QW width was varied from 0.1 to 11 nm. Figure 12 shows a plot of the temperature gradient versus the QW width for a complete heterostructure volume of 10 mm^3 assuming $\epsilon_{eff} = 1$. It was observed from Fig. 12 that as the QW width increased the temperature gradient also increased. Figure 13 shows a plot of the cooling efficiency (η_c) versus the QW width. It was observed that the cooling efficiency increased as the QW width increased. Moreover, we predicted cooling efficiency higher than 100% when the QW width approaches 9 nm. Cooling efficiency $>100\%$ near 9 nm is expected since λ_{eff} is twice λ_{pl} (Fig. 8), hence $h\nu_f > 2h\nu$.

5 Conclusions

In this paper, we reported a numerical investigation of optical cooling characteristics of a MQW CdS/CdTe heterostructure. The effects of the quantum mechanical confinement on photon absorption and luminescence under cooling conditions were also analyzed. The CdS/CdTe heterostructure absorption and luminescence spectra for cooling conditions were defined in terms of the active layer width and number of QWs in the complete heterostructure.

The analyzed multiple-coupled CdS/CdTe QW structures show a relative increase of $0.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ in photon absorption for each additional active CdTe layer in the complete heterostructure. Further, a rigid blue-shift of the absorption edge was observed as the Fermi level moved into the conduction band. Additionally, λ_{eff} increased as the well width increased due to the decrease in the conduction and valence band energy levels E_{1n} and E_{1p} (Figs. 4 and 5). Inversely, λ_{pl} decreased as the well width increased. This behavior results in the blue-shift of λ_{pl} with respect to λ_{eff} starting from the intersection point given at 1.1 nm of QW width (Fig. 8). Hence, the emitted photon will carry heat away from the material since the emitted energy will be higher than the absorbed energy. Therefore, the material will cool down.

For a QW width of 9 nm at an emission wavelength of $0.4 \mu\text{m}$, a PL density peak higher than $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ was predicted (Fig. 9). The 9 nm QW width can be considered optimal for luminescence emission and optical cooling due to the shown blue-shift $>400 \text{ nm}$ of λ_{pl} with respect to λ_{eff} . In addition, since net power density is dependent on photon absorption [Eq. (9)], and photon absorption is not significant beyond 25 QWs, a significant reduction in net power density will not be attained by increasing the number of QWs beyond 25. Also, as the QW width increases, the temperature gradient and the cooling efficiency also increase. Most importantly, cooling efficiency higher than 100% is predicted for QW width near 9 nm. Cooling efficiency $>100\%$ is the result of λ_{eff} being at least twice λ_{pl} , hence $h\nu_f > 2h\nu$.

References

1. P. Pringsheim, "Zwei Bemerkungen über den Unterschied von Lumineszenz und Temperaturstrahlung," *Zeitschrift Physik* **57**(11), 739–746 (1929).
2. R. I. Epstein et al., "Observation of laser-induced fluorescent cooling of a solid," *Nature* **377**, 500–503 (1995).
3. J. L. Clark and G. Rumbles, "Laser cooling in the condensed phase by frequency up-conversion," *Phys. Rev. Lett.* **76**(12), 2037–2040 (1996).
4. C. W. Hoyt et al., "Observation of anti-Stokes fluorescence cooling in thulium-doped glass," *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3600 (2000).
5. H. Gauck et al., "External radiative quantum efficiency of 96% from a GaAs/GaInP heterostructure," *Appl. Phys.* **64**, 143 (1997).
6. L. Landau, "On the thermodynamics of photoluminescence," *J. Phys.* **10**, 503–506 (1946).
7. L. V. Butov et al., "Towards Bose-Einstein condensation of excitons in potential traps," *Nature* **47**, 417 (2002).
8. M. Sheik-Baha and R. I. Epstein, "Can laser light cool semiconductors," *Phys. Rev. Lett.* **92**, 247403 (2004).
9. V. V. Mitin, D. I. Sementson, and N. Z. Vagidob, *Quantum Mechanics for Nanostructures*, Cambridge University, New York (2010).
10. J. Li, "Laser cooling of semiconductor quantum wells: theoretical framework and strategy for deep optical refrigeration by luminescence upconversion," *Phys. Rev. B* **75**, 155315 (2007).
11. J. Zhang et al., "Laser cooling of a semiconductor by 40 K," *Nature* **493**, 504–508 (2013).
12. J. R. Villa-Angulo, R. Villa-Angulo, and C. Villa-Angulo, "Photon absorption coefficient for a low-dimensional CdS/CdTe absorber by a partial K-selection approach," *J. Nanophotonics* **7**(1), 073099 (2013).
13. J. R. Villa-Angulo et al., "Effect of effective mass mismatch in CdS/CdTe heterojunctions on the fundamental design parameters of nanophotonic devices," *J. Nanophotonics* **8**(1), 083096 (2014).
14. L. Jian et al., "Optics of CdS/CdTe thin-film photovoltaic," *IEEE J. Photovol.* **1**(2), 187–193 (2011).
15. G. Rupper, N. H. Kwong, and R. Binder, "Large excitonic enhancement of optical refrigeration in semiconductors," *Phys. Rev. Lett.* **97**, 117401 (2006).
16. G. W. Taylor, "A new theoretical approach for the quantum well semiconductor laser," *Prog. Quantum Electron.* **16**(2), 73–133 (1992).
17. J. Yao et al., "Inter-sub-band absorption in modulation doped heterostructures," *J. Appl. Phys.* **108**(1), 013104 (2010).
18. G. W. Taylor, "Theory of operation of the quantum-well injection laser without k selection," *J. Appl. Phys.* **70**(5), 2508–2535 (1991).
19. P. Asbeck, "Self-absorption effects on radiative lifetime in GaAs-GaAlAs double heterostructures," *J. Appl. Phys.* **48**, 820–822 (1977).
20. P. K. Basu, *Theory of Optical Processes in Semiconductors: Bulk and Microstructures*, Oxford University Press, New York (1997).
21. W. van Roosbroeck and W. Shockley, "Photon-radiative recombination of electrons and holes in Germanium," *Phys. Rev. Lett.* **94**, 1558 (1954).
22. X. Luo, M. D. Eisaman, and T. R. Gosnell, "Laser cooling of a solid by 21 K starting from room temperature," *Opt. Lett.* **23**(8), 639–641 (1998).
23. R. I. Epstein and M. Sheik-Bahae, *Optical Refrigeration*, Wiley-Vch, Germany (2009).

Julio C. Tarín-Cordero received a BS degree in industrial electronic engineering from Hermosillo Institute of Technology, Mexico, in 1993. He is currently working toward the PhD degree in science in the Institute of Engineering of the University of Baja California. His research interests include thermal and optical properties of nanosemiconductor materials for photonics applications.

Rafael Villa-Angulo received a BS degree in electrical engineering from University of Baja California (UABC) in 1995, an MS degree in computer science from the Center for

Scientific Research and Higher Education at Ensenada, Mexico, in 2002, and a PhD degree in bioinformatics from George Mason University, Manassas, Virginia, in 2009. Since 1993, he has been a professor at the Engineering Institute of the UABC. His research interests include the design of instruments for biophotonic measurements.

José R. Villa-Angulo received a BS degree in electronic engineering from the Sonora Institute of Technology, Mexico, in 1993, and a PhD degree in science from the Institute of Engineering of the University of Baja California in 2014. He is with LG Electronics Inc. His research interests include low-dimensional and nanosemiconductor materials for photonics and biophotonics applications.

Carlos Villa-Angulo received a BS degree in electronic engineering from the Sonora Institute of Technology, Mexico, in 1994, an MS degree in electronic engineering from the University of Baja California, Mexico, in 2004, and a PhD degree in electrical engineering from the University of Connecticut, USA, in 2009. He is a professor at the Institute of Engineering at the University of Baja California. His research interests include low-dimensional and nanosemiconductor materials for photonics and biophotonics applications.

ANEXO 2

(Comparison of Bamboo and Cotton Performance in Warm Environment)

Comparison of Bamboo and Cotton Performance in Warm Environment

Karina Solorio-Ferrales, Rafael Villa-Angulo, José R. Villa-Angulo, Julio C. Tarín-Cordero
& Carlos Villa-Angulo

Engineering Institute, Autonomous University of Baja California, México. villac@uabc.edu.mx

Received: October XXX, 2015. Received in revised form: XXX, 2015. Accepted: XXX, 2015.

Abstract

Different materials have been used to fabricate summer (warm environment) clothing, i. e. cotton, nylon, neoprene, polyester and 100% synthetic fibers. However, due to mechanical and thermal properties, nylon and polyester cloth have a tendency to rot and chafe in damp conditions. In addition, close-fitting synthetic fiber and neoprene make some wearers feel uncomfortable due to the rapidly body skin sweat. Besides that, bamboo and cotton have demonstrated to have low thermal conductivity. Hence, they are excellent materials to fabricate summer clothing. In this study, thermal properties of three different rib knitted structures produced from a 30 tex yarn of three blends of fibers (100% bamboo, 100% cotton and 50:50 bamboo: cotton) were used to compare bamboo and cotton performance in warm environment. Theoretical results show that garment thickness and heat storage rate in the human body can significantly be reduced by using 100% bamboo, without compromising comfort.

Keywords: warm environment clothing; protective materials; Bamboo garment; modeling behavior.

Resumen

Diferentes materiales se han utilizado para fabricar ropa para ambiente cálido. Por ejemplo, algodón, nailon, neopreno, poliéster y 100% fibras sintéticas. De cualquier manera, debido a propiedades mecánicas y térmicas, la ropa de nailon y poliéster tiende a irritar la piel en condiciones de alta humedad. Igualmente, ropa de neopreno hacen a algunos usuarios sentirse incómodos debido a la alta sudoración alcanzada por el cuerpo. Por otro lado, bambú y algodón tienen baja conductividad térmica, por lo que son excelentes materiales para fabricar ropa de verano. En este estudio, las propiedades térmicas de tres estructuras producidas a partir de tres mezclas de fibras (100% bambú, 100% algodón y 50:50 bambú: algodón) son utilizadas para comparar el desempeño de bambú y algodón en ambiente cálido. Resultados teóricos muestran que el grosor de la ropa y la tasa de almacenamiento de calor en el cuerpo se reducen significativamente usando 100% bambú.

Palabras clave: ropa para clima cálido; materiales protectores; ropa de bambú; modelado.

1 Introduction

The human body to maintain its temperature between a safety interval needs to eliminate the excessive warm. To eliminate the excessive warm it changes the amount of blood circulating through the body as well as increases the amount of liquid transpiration on the body skin. These actions are commonly self-activated once its average internal temperature overpasses the 98.6 ° F (37 ° C) [1, 2]. Also, when the environmental temperature is close to the temperature of the body skin, the internal temperature regulation becomes more difficult. If the air temperature is equal or higher than the temperature of the body skin, the blood that circulates close to the body skin can't help to descend the human body temperature [3]. In addition, if the environmental humidity increases the evaporation of the

liquid transpiration on the body skin decreases. Hence the effort of the body to maintain a safety temperature is affected, excessive blood arrives to the body skin and less arrives to the active muscles, the brain and other internal organs [4]. As a consequence, the body capacity to work decreases and a premature exhaustion due to the heat stress arrives.

The previously described conditions are commonly found in seaside cities and also in many jobs in industrialized countries [5]. Different approaches have been used to prevent and minimize the effects of premature exhaustion due to heat stress in hot and warm environment. On one hand, supplements such as drinks specially designed to replace body fluids and electrolytes have been used. They may be of benefit for workers who have very physically active occupations but they may add unnecessary sugar or

salt to the diet [6]. On the other hand, protective clothing have been used to reduce the effects of environmental stress factors. The materials used in clothing which has been designed for warm and hot weather must be able to give comfort, durability, it must to allow air to circulate freely across the skin, which can help to keep the body cool. In addition, the material needs to resist the sun's rays in order to help delay the onset of sunburn.

Materials such as cotton, nylon 6, nylon 6.6, neoprene, polyester, and 100% synthetic fibers have been used for warm and hot environment clothing fabrication. However, pure nylon and polyester cloth have a tendency to rot and chafe in damp conditions. In addition, close-fitting lightweight of 100% synthetics fiber and neoprene make some wearer feels uncomfortable due to the rapidly body skin sweat. On the other hand, beside of cotton, bamboo that is a tribe of flowering perennial evergreen plants in the grass family Poaceae [7] is an excellent candidate for warm environment clothing fabrication due to its mechanical and thermal properties [8 - 10].

In this study, thermal properties of three different rib knitted structures produced from a 30 tex yarn of three blends of fibers (100% bamboo, 100% cotton and 50:50 bamboo: cotton) were used to compare bamboo and cotton performance in warm environment. Standardized values of metabolic rate, for different physical activities, were used in the calculations. The heat storage rate in the human body vs clothing insulation for the considered yarn blends was calculated. In addition, the relation of clothing thickness and clothing isolation was established. Theoretical results show that the garment thickness can significantly be reduced as well as heat storage rate in the human body can also be reduced by using 100% bamboo, without compromising comfort.

2 Heat Balance and Exchange Modeling of Human Body and Clothing

The interaction of heat with a dressed human body can be described from an arbitrary flux of heat impinging with the dressed body. Once the flux of heat is inside the front surface of the dressed body, the behavior of the flux of heat is determined by the rates of storage, production and losses. By conservation of energy, the net heat storage must balance the net production and losses within the unit volume of the dressed body. This can be written as: [11, 12]

$$S = (M - W) - (R + C + E + K) - (C_{res} + E_{res}) \quad (1)$$

where S is the heat storage rate, M is the metabolic energy production rate, W is the external mechanical work, R , C and E are the radiation, convective and evaporative heat loss from the skin respectively. K is the conduction to the surfaces by direct contact with skin or clothing, C_{res} and E_{res} are the convective and evaporative heat loss from respiration respectively. The units of the rate of storage, production and losses are energy per second, that is joules

per second ($J \cdot s^{-1}$) or watts (W). It is useful to standardize over persons of different sizes by using units of watts per squatter meter ($W \cdot m^{-2}$) of the body surface area.

The energy balance components, M and W describe heat production in the human body. The other components (R , C , E , K , C_{res} , E_{res}) describe heat consumption. Thermal energy balance is given when the heat storage rate is equal to zero ($S = 0$). In addition, when the heat storage rate is positive ($S > 0$) the body temperature increases and there exist a heat gain, hence the body needs to be cooled. On the other hand, when the heat storage rate is negative ($S < 0$) the body temperature decreases and there exist a heat loss, hence the body needs to be heated.

2.1 Heat production components.

In heat production components the metabolic rate M is defined as the rate at which the body utilizes food to produce energy. The units of metabolic rate is the Met, where $1\text{Met} = 58.15\text{Wm}^{-2}$. An accepted approximation for the calculation of this component is the equation of

Table 1. Nomenclature used in the theoretical modeling.

$\frac{A_r}{A_{Du}}$	Fraction of skin surface involved in heat exchange by radiation..... $\frac{A_r}{A_{Du}} \approx 0.77$ n.d.
C	Convective heat loss from skin..... Wm^{-2}
$CORR$	Correction factor to clothing insulation.....nd
C_{res}	Convective heat loss from respiration..... Wm^{-2}
E	Evaporative heat loss from skin..... Wm^{-2}
E_p	Emissivity of the human body..... $E_p \approx 0.97$ n.d.
E_{res}	Evaporative heat loss from respiration..... Wm^{-2}
F_{cl}	Reduction factor for sensible heat exchange due to the clothes warm..... n.d.
f_{cl}	Clothing are factor..... n.d.
h_c	Convective heat transfer coefficient..... $\text{Wm}^{-2}\text{C}^{-1}$
h_r	Radioactive heat transfer coefficient..... $\text{Wm}^{-2}\text{C}^{-1}$
I_{cl}	Intrinsic insulation of the clothing.....clo
i_{mdyn}	Dynamic permeability index for the clothing..... n.d.
i_{mst}	Static permeability index of the clothing..... $i_{mst} \approx 0.38$ n.d.
L_r	Lewis relation..... $L_r=1665$ °C kPa ⁻¹
M	Metabolic rate..... Wm^{-2}
P_a	Vapor pressure of the environment.....kPa
σ	Stefan-Boltzmann constant..... $\sigma=5.67 \times 10^{-8}$ $\text{Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$
P_{sat}	Saturation vapor pressure.....kPa
P_{sk}	Saturated vapor pressure at mean skin temperature.....kPa
R	Radiation heat loss from skin..... Wm^{-2}
R_a	Static insulation of boundary air layer... $R_a \approx 0.11$ m^2CW^{-1}
R_{edyn}	Dynamic total water vapor resistance of the clothing system..... $\text{m}^2\text{kPaW}^{-1}$
RH	Relative humidity.....(%)
R_{tdyn}	Dynamic thermal resistance of the clothing system..... m^2CW^{-1}
R_{st}	Static insulation of the clothing..... m^2CW^{-1}
S	Rate of body heat storage..... Wm^{-2}
T_a	Air temperature.....°C
T_G	Globe temperature.....°C
T_{mrt}	Mean radiant temperature.....°C
T_S	Dry temperature.....°C
T_{sk}	Skin temperature.....°C
V_a	Air velocity..... ms^{-1}
W	Mechanical power..... Wm^{-2}
WS	Walking speed..... ms^{-1}

Source: Adapted from [X]

Harris–Benedict [13] given by eq. (2) for males and eq. (3) for females.

$$M = 66 + 13.7 \cdot w + 5 \cdot h - 6.8 \cdot a \quad (2)$$

$$M = 655 + 9.6 \cdot w + 1.7 \cdot h - 4.7 \cdot a \quad (3)$$

here w is the human weight given in kg, h is the human height given in meters, and a is the human age given in years. In addition, standardized values of metabolic rates for different physical activities are given by the norm ISO8996 [14]. The other heat production component, the external mechanical work W is defined as the realized body mechanical work that does not add internal heat. For most activities it can be made equal to zero.

2.2 Heat consumption components.

The difference in temperature between the environment and the surface of the body with the cloth isolation participate in the heat interchange. The radiation heat loss from the skin R is given by eq. (4)

$$R = h_r \cdot F_{cl} \cdot (T_{sk} - T_{mrt}) \quad (4)$$

where the mean radiant temperature T_{mrt} is given in °C and its value can be calculated using eq. (5). The skin temperature T_{sk} is also given in °C and can be calculated using eq. (6).

$$T_{mrt} = T_G + 1.9 \cdot \sqrt{V_a} \cdot [T_G - T_s] \quad (5)$$

$$T_{sk} = 35.7 - 0.0285 \cdot M \quad (6)$$

The radioactive heat transfer coefficient h_r and the reduction factor for sensible heat exchange due to the clothes F_{cl} are given by eq. (7) and (8) respectively.

$$h_r = \sigma \cdot E_p \cdot \frac{A_r}{A_{DU}} \cdot \frac{[(T_{sk} + 273)^4 - (T_{mrt} + 273)^4]}{(T_{sk} - T_{mrt})} \quad (7)$$

$$F_{cl} = \frac{1}{(h_c + h_r) \cdot I_{cl} \cdot 0.155 + 1/f_{cl}} \quad (8)$$

Standardized values for the intrinsic insulation of clothing I_{cl} are given by the norm ISO7730 [15]. The clothing area factor f_{cl} which is dependent on I_{cl} , and the convective heat transfer coefficient which depends on air velocity v_a are given by eq. (9) and eq. (10) respectively.

$$f_{cl} = 1 + 0.31 \cdot I_{cl} \quad (9)$$

$$h_c = 8.7 \cdot (v_a)^{0.6} \quad (10)$$

The convective heat loss from the skin can be found using eq. (11) and it is the heat loss due to air flowing by the skin and carrying away body heat.

$$C = \frac{(T_{sk} - T_a)}{R_{tdyn}} \quad (11)$$

here the ambient temperature T_a comes from real measurements and is given in °C. The dynamic thermal resistance of the clothing system R_{tdyn} that has units $m^2 \cdot ^\circ C/W$ is depends on the characteristics of wearing clothes and in environmental parameters. R_{tdyn} is obtained using eq. (12).

$$R_{tdyn} = R_{tst} \cdot CORR \quad (12)$$

In eq. (12) the static isolation of clothing is given by $R_{tst} = I_{cl} \cdot 0.155 + R_a/f_{cl}$. The correction factor to clothing insulation $CORR$ can be calculated using eq. (13) where the walking speed can be found using $WS = 0.0052 \cdot (M - 58)$.

$$CORR = e^{(0.043 - 0.398 \cdot V + 0.066 \cdot V^2 - 0.378 \cdot WS + 0.094 \cdot WS^2)} \quad (13)$$

Evaporative heat loss from the skin to the environment is proportional to the difference between the saturated vapor pressure at mean skin temperature P_{sk} and the vapor pressure of the environment air P_a . This evaporative heat loss can be found using the next equation

$$E = \frac{w \cdot (P_{sk} - P_a)}{R_{etdyn}} \quad (14)$$

In eq. (14) the skin wittedness is found using $w = 0.001 \cdot M$ and the vapor pressure of the environment using $P_a = P_{sat} \cdot T_a \cdot RH$ where the saturation vapor pressure at a given temperature P_{sat} is calculated using equation (15) that is known as Antoine's formula. The saturated vapor pressure at mean skin temperature P_{sk} and the dynamic total water vapor resistance of the clothing system R_{etdyn} are culaculated using eq. (16) and eq. (17) respectively.

$$p_{sat} = 0.1333 \cdot e^{(18.6686 - \frac{4030.183}{T_a + 235})} \quad (15)$$

$$P_{sk} = 0.1333 \cdot e^{(18.6686 - \frac{4030.183}{T_{sk} + 235})} \quad (16)$$

$$R_{etdyn} = \frac{R_{tdyn}}{L_r \cdot i_{mdyn}} \quad (17)$$

In eq. (17) the dynamic permeability index for the clothing is given by $i_{mdyn} = i_{mst} - 6.5 \cdot CORR + 2.6 \cdot CORR^2$. The conduction K is usually very small relative to other terms and can safety be neglected.

Heat loss from respiration combines the processes of evaporation of moisture from the lungs as well as convection due to displacement of warm air in the lungs by cold air from the outside environment. Both effects from respiration, convective heat loss C_{res} and evaporative heat loss E_{res} , can be quantified using eq. (18) and eq. (19) respectively.

$$C_{res} = 0.0014 \cdot M(34 - T_a) \quad (18)$$

$$E_{res} = 0.0173 \cdot M(5.87 - P_a) \quad (19)$$

3 Modeling results

To compare bamboo and cotton capacity for warm environment clothing, we used the warm environment characteristics shown in Table 2. These characteristics are found in seaside cities and in many jobs of industrialized countries. Three different rib knitted structures, as shown in Fig. 1, were produced from a 30 tex yarn of three blends of fibers (100% bamboo, 100% cotton and 50:50% bamboo: cotton). The three fabric samples were prepared in a 1x1 rib machine. The parameters of the knitted machine are: number of feeders 24, diameter 30 inch and machine gauge 18. The thermal conductivities, $\lambda(Wm^{-1}K^{-1})$, defined as the property of a material to conduct heat flow, were measured using an Alambeta instrument. Five reading were taken for each of the knitted fabric and then averages were calculated. Table 3 shows the calculated averages values for the three fabric samples. The thermal resistance, $R(m^2KW^{-1})$, defined as the property of a material to resist a heat flow, was calculated using eq. 20 [16, 17].

$$R(m^2KW^{-1}) = \frac{h(m)}{\lambda(Wm^{-1}K^{-1})} \quad (20)$$

where $h(m)$ is the garment thickness given in meters. In addition, from the norm ISO8996 [14], we used four standardized values of metabolic rate. The four considered values of metabolic rate and their associated physical activities are: $M = 9.2$ met for heavy construction, $M = 9$ met for gardening, $M = 6.61$ met for medium weight construction and $M = 4.46$ met for light weight construction.



Figure 1. Rib knitted structure. Source: [1]. The authors.

Fig. 2, for different ambient temperatures, shows the heat storage rate that needs to be eliminated from the human body to reach thermal energy balance. Thermal energy balance that is given when the heat storage rate in the human body is equal to zero, ($S = 0$), will be referred as thermal comfort in this study. The curves of Fig. 2 were obtained by using eq. (1) and the parameter given in Table 1, Table 2 and Table 3. As expected, from Fig. 2 it is

observed that as the temperature increase the heat storage rate in the human body increases and more heat need to be eliminated from the body to reach thermal comfort. In addition, as the metabolic rate increases more heat is storage in the body.

Table 2 Environmental characteristics used in calculations.

Air temperature	$T_a = 41^\circ\text{C}$
Vapor pressure of the environment	$P_a = 143.5 \text{ kPa}$
Relative Humidity	$RH = 45\%$
Air velocity	$V_a = 3.63\text{m/s}$
Mean radiant temperature	$T_{mrt} = 33.47^\circ\text{C}$
Stefan-Boltzmann constant	$\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{w/m}^2\text{K}^2$
Emissivity of the human body	$E_p = 0.97$
Fraction of skin surface involved in heat exchange by radiation	$A_r/A_{DU} = 0.77$
Static insulation of boundary air layer	$R_a = 0.11$
Static permeability index of the clothing	$I_{mst} = 0.38$
Lewis relation	$L_r = 16.65^\circ\text{C/kPa}$

Table 3 Thermal conductivities used in calculations.

Material	Thermal conductivity ($Wm^{-1} \cdot K^{-1}$) $\times 10^{-3}$
100% cotton	55.27
100% bamboo	45.04
50: 50% bamboo-cotton	49.66

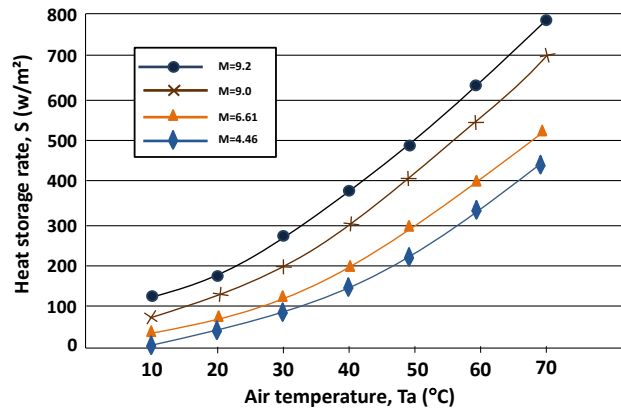


Figure 2. Heat storage rates in the human body vs air temperature for four metabolic rates. Source: The authors.

In order to compare the effect in heat storage rate by clothing isolation, the thermal properties of the three fabricated samples were evaluated in the heat balance and exchange models described in section 2. Fig. 3, for four different metabolic rates, shows the heat storage rate in the human body vs clothing insulation for the rib knitted structure fabricated using 100% Bamboo. The curves of Fig. 3 were obtained using eq. (1) and parameters shown in Table 2 and Table 3. From Fig. 3 it is observed that for clothing isolation from 0.05 to 1.4 Clo , which is given by clothing thickness from 0.1 to 1.18 mm , as the insulation increases less heat is stored in the human body. On the other

hand, for clothing isolation greater than 1.4 *Clo*, which is given by clothing thickness greater than 1.18 mm as the insulation increases the heat stored in the human body increases. This behavior is understandable because for clothing thickness less than 1.18 mm the mechanical and thermal properties of 100% bamboo allows air to circulate freely across the skin, which help to keep the body cool. On the other hand, increases in clothing thickness until reach 3 *Clo* of isolation represents a thick and heavy garment such as winter wear, hence for characteristics shown in Table 2 the heat storage rate should be high. In addition, it is observed that as the metabolic rate decreases less heat is stored in the body. Hence, less heat need to be eliminated from body to reach thermal comfort.

Fig. 4 shows the heat storage rate in the human body vs clothing insulation for the rib knitted structure fabricated using 100% cotton and the considered metabolic rates. In addition, Fig. 4 shows the relation of clothing thickness and clothing isolation. From Fig. 4 it is observed that as the clothing insulation increases from 0.05 to 2.75 *clo*, no significant change on the amount of stored heat in the human body is obtained. Whiles for clothing isolation greater than 2.75 *clo* the heat storage rate in the human body start drastically increasing. Similar than 100% bamboo, cotton clothing thickness with isolation close to 3 *Clo* represents a thick and heavy garment such as winter wear. In addition, it is also observed that as the metabolic rate decreases, due to decrease in physical activity, less stored heat need to be eliminated from the body.

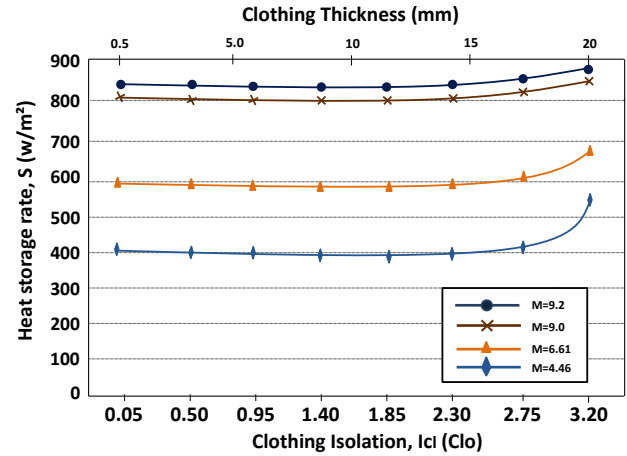


Figure 4. Heat storage rate in the human body vs clothing insulation for the rib knitted structure fabricated using 100% cotton and four different metabolic rates. Source: The authors.

Fig. 5 shows the heat storage rate in the human body vs clothing insulation for the rib knitted structure fabricated using 50:50% bamboo-cotton. Fig. 5 also shows the relation of clothing thickness and clothing isolation. Similar than 100% cotton (Fig. 4), in Fig. 5 it is observed that as the clothing insulation increases from 0.05 to 2.75 *clo*, no significant change on the amount of stored heat in the human body is obtained. Whiles for clothing isolation greater than 2.75 *clo* the heat storage rate in the human body start drastically increasing. The observed difference between 100% cotton (Fig. 4) and 50:50% bamboo-cotton (Fig. 5) is that 50:50% bamboo-cotton can reach the same clothing isolation than 100% cotton with a half of clothing thickness. In addition, it is also observed that as the metabolic rate decreases less stored heat need to be eliminated from the body.

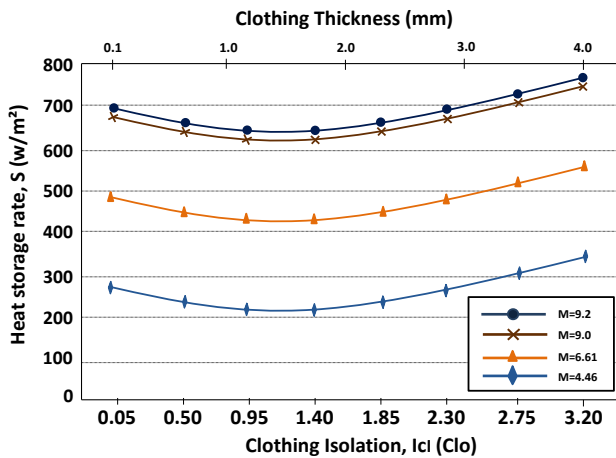


Figure 3. Heat storage rates in the human body vs clothing insulation for the rib knitted structure fabricated using 100% bamboo and four different metabolic rates. Source: The authors.

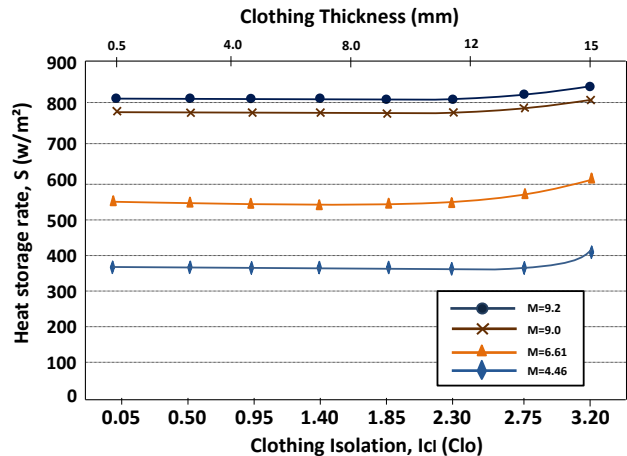


Figure 5. Heat storage rate in the human body vs clothing insulation for for the rib knitted structure fabricated using 50:50% bamboo-cotton and four different metabolic rates. Source: The authors.

Fig. 6 shows clothing thickness vs clothing isolation for 100% bamboo, 100% cotton and 50:50% bamboo-cotton yarn blends. As expected, from Fig. 6 it is observed that clothing isolation increases when clothing thickness increase. 100% bamboo can reach isolation values using smaller clothing thickness than 100% cotton and 50:50% bamboo: cotton. I. e. as shown in Fig. 7, 3 clo of isolation can be given by a 100% bamboo garment with thickness of 3.16 mm, while a garment of 100% cotton and 50:50% bamboo cotton need 18.61 mm and 14.13 mm of thickness respectively. Hence, to reach clothing isolation of 3 clo, the garment thickness needed by using 100% bamboo is more than five times smaller compared with 100% Cotton and more than four times smaller compared with 50:50% bamboo: cotton.

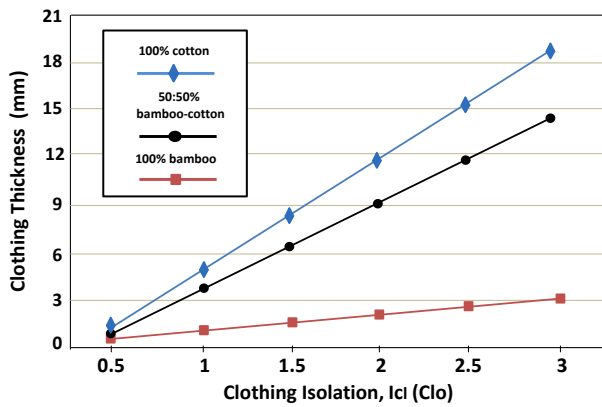


Figure 6. Clothing thickness vs clothing isolation for 100% bamboo, 100% cotton and 50:50% bamboo-cotton yarn blends. Source: The authors.

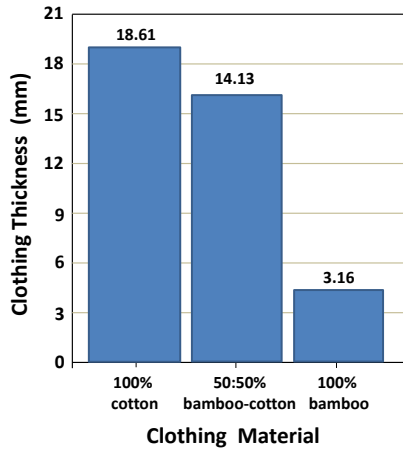


Figure 7. Clothing thickness vs clothing material, for a 3 clo of isolation. Source: The authors.

4 Conclusions

In this study, thermal properties of a 30 tex yarn from a blends of 100% fibre of bamboo, 100% fibre of cotton and 50:50% fibre of bamboo: cotton were used to compare

bamboo and cotton performance in warm environment. Four physical activities, characterized by their metabolic rate, were used in the calculations. Theoretical results show that 100% bamboo has the better isolation performance in hot environment. The heat storage rate in the human body can significantly be reduced by using 100% Bamboo. In addition, the garment thickness can be also significantly be reduced by using 100% bamboo. I.e, 3 clo of thermal isolation can be given by a garment with thickness of 3.16 mm, while 18.61 mm and 14.13 mm of thickness is needed by 100% cotton and 50:50% bamboo: cotton respectively. In summary, theoretical results show that 100% bamboo can be used to reduce garment thickness and heat storage in warm environment clothing, without compromising comfort.

References

- [1] Claus J., Temperature Regulation in Humans and Other Mammals, Berlin Heidelberg New York, Springer-Berlag, 2001.
- [2] Hockey S. M. and Rew P. J., Human response to thermal radiation, UK. HSE Books, 1996.
- [3] Eric W. Hershel R. and Kevin S., Vander's Human Physiology: The Mechanisms of Body Function, Kindle Edition, 2013.
- [4] Elaine N. M. and Katja H., Human Anatomy & Physiology Plus a Brief Atlas of the Human Body Plus Mastering A&P with Person eText, 2012.
- [5] A. Auliciems and S. V. Szokola, Thermal Comfort, 2nd Ed., Passive and Low Architecture International and Department of Architecture, University of Queensland Brisbane, 2007.
- [6] E. F. Jones, Evaporation of Water-With Emphasis on Application and Measurements, Lewis Publishers, Michigan, pp. 25-43, 1992.
- [7] M. Das and D. Chakrabarty, Thermogravimetric Analysis and Weathering Study by Water Immersion of Alkali-Treated Bamboo Strips, BioResources, **3**, 1051-1062, 2008.
- [8] C. Prakash, G. Ramakrishnan and C. V. Koushik, A study of the thermal properties of Bamboo knitted fabrics, J. Therm. Anal. Calorim., **111**, 101-105, 2013.
- [9] M. Mounika, et. al., Thermal Conductivity Characterization of Bamboo Fiber Reinforced Polyester Composite, J. Mater. Environ. Sci., **3**, 1109-1116, 2012.
- [10] A. M. Raimundo, A. R. Figueiredo, Personal protective Clothing and Safety of Firefighters Near a High Intensity Fire Front, Fire Safety Journal, **44**, 514-521, 2009.
- [11] S. Bartkevicius, R. Rackiene and J. A. Virbalis, Analysis of the Energy Balance in the System Human-Clothing-Environment, Electronics and Electrical Engineering, 1392-1215, 2008.
- [12] I. Holmer, Protective Clothing in Hot Environments, Ind Health **44**, 404-413, 2006.
- [13] A. R. Horrocks and S. C. Anand, Handbook of Technical Textiles, CRC Press LLC, NW Boca Raton Florida USA, 2000.
- [14] ISO-8996, Ergonomics-Determination of metabolic heat productions, ISO, Geneva, 2004.
- [15] ISO-7730, Ergonomics of the thermal environment, ISO, Geneva, 2005.
- [16] A. Majumdar, S. Mukhopadhyay and R. Yadav, Thermal Properties of Knitted Fabrics Made from Cotton and Regenerated Bamboo Cellulosic Fibres, International Journal of Thermal Science **49**, 2042-2048, 2010.
- [17] Prakash Chidambaram et al, Study of Thermal Comfort Properties of Cotton/Regenerated Bamboo Knitted Fabrics, African Journal of Basic & Applied Sciences 4 (2): 60-66, 2012.

K. Solorio-Ferrales received the B.S. degree in Industrial Engineering from the Mexicali Institute of Technology, Mexico, in 1999, She is currently working toward the P.h.D. degree in science in the Institute of

Engineering of the University of Baja California. Her research interests include thermal properties of biomaterials.

ORCID: xxx

R. Villa-Angulo received the B.S. degree in Electrical Engineering from the University of Baja California, México, in 1995, and the M.S. degree in Computer Science from the Center for Scientific Research and Higher Education at Ensenada (CICESE), México, 2002, and the Ph.D. degree in Bioinformatics from the George Mason University, Manassas, VA, in 2009. Since 1993 he is a professor at the Engineering Institute of the University of Baja California. His research interests include the development of algorithms for bioinformatics and the design and implementation of biomaterials.

ORCID: xxx

J. R. Villa-Angulo received the B.S. degree in electronic engineering from the Sonora Institute of Technology, Mexico, in 1993, and the P.h.D. degree in science from the Institute of Engineering of the University of Baja California, in 2014. He is with the company LG Electronics Inc. His research interests include thermal and optical properties of biomaterials.

ORCID: xxx

Julio C. Tarin-Cordero received the B.S. degree in industrial electronic engineering from the Hermosillo Institute of Technology, Mexico, in 1993, He is currently working toward the P.h.D. degree in science in the Institute of Engineering of the University of Baja California. His research interests include thermal and optical properties of biomaterials.

ORCID: xxx

Carlos Villa-Angulo received the B.S. degree in electronic engineering from the Sonora Institute of Technology, Mexico, in 1994, the M.S. degree in electronic engineering from the University of Baja California, Mexico, in 2004, and the Ph.D. in electrical engineering from the University of Connecticut, USA, in 2009. He is professor at the Institute of Engineering at the University of Baja California. His research interests include thermal and optical properties of biomaterials.

ORCID: xxx