

Caracterización de interfases en pozos cuánticos de GaAlAs-GaAs usando la transición excitónica*

A. Juárez

*Escuela de Ciencias Físico Matemáticas
Universidad Autónoma de Puebla, 72000 Puebla, Pue., México*

T. Tello

*Departamento de Física, Instituto de Ciencias
Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Pue., México*

G. Röpke

W.P. Universität, Sektion Physik, 2500 Rostock, Alemania

A. Zehe

T.U. Dresden, Sektion Physik, 8027 Dresden, Alemania
(Recibido el 14 de mayo de 1990; aceptado el 14 de noviembre de 1990)

Resumen. Fluctuaciones en interfases de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ ($x = 0.37$), respecto a la interfase ideal, son consideradas e investigadas usando el espectro de fotoluminiscencia de la transición excitónica. Usamos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo y la teoría de perturbaciones para calcular las variaciones en los niveles de energía de los electrones y de los hoyos, originadas por las fluctuaciones en las interfases. Los resultados teóricos obtenidos aquí, son aplicados para considerar difusión excitónica y son comparados con resultados experimentales recientes.

PACS: 68.35.-p

1. Introducción

El desarrollo alcanzado en técnicas de crecimiento de películas delgadas, tales como MBE [1] y MOCVD [2], permite el crecimiento de estructuras cuyas variaciones en composición química y en estructura son del orden de capas monoatómicas [3].

El control de la estructura geométrica de las interfases y la dependencia de esta estructura respecto a las condiciones de crecimiento, tiene importancia para el desarrollo de dispositivos microelectrónicos.

Las características de las interfases entre dos materiales determinan las propiedades y la eficiencia de los nuevos dispositivos cuánticos (electrónicos y optoelectrónicos) los cuales han dado lugar a numerosas aplicaciones dentro de la

*Trabajo apoyado por CONACYT y SEP.

microelectrónica [4]. De esta forma, es de gran importancia contar con un método sensible y eficaz para conocer la estructura de las interfaces.

La espectroscopia óptica es una herramienta para el análisis de propiedades de los semiconductores, que ha probado su eficiencia tanto en el volumen [5], como en sistemas de baja dimensionalidad [6].

De las diferentes transiciones presentes en las nuevas estructuras de baja dimensionalidad, la transición excitónica, además de ser altamente eficiente, depende sensiblemente de la posición y de la anchura de los niveles energéticos del electrón y del hueco que forma el excitón, siendo estos niveles, a su vez, sensiblemente dependientes de la anchura del pozo cuántico en el cual se encuentra el excitón.

En este trabajo, con base en un modelo interfacial propuesto recientemente [7], se estudian las características estructurales de las interfaces de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ usando como sonda la transición excitónica. Las fluctuaciones estructurales en las interfaces, tienen un correlato en el espectro de fotoluminiscencia de dicha transición. Comparamos los resultados aquí obtenidos con resultados experimentales recientes, que toman en cuenta la difusión de excitones a través de diferentes regiones de las interfaces.

2. Formulación del problema y del modelo estructural para la interfase

Los resultados experimentales dan cuenta de dos hechos:

- 1) La transición excitónica, por lo general, está presente en los espectros de fotoluminiscencia en sistemas semiconductores de baja dimensionalidad [8].
- 2) Interrumpiendo el proceso de crecimiento por MBE, durante intervalos de tiempo del orden de decenas de segundos, la calidad de la interfase se mejora considerablemente [4].

La interfase estudiada, en su estructura, tiene fluctuaciones a lo largo de la dirección de crecimiento. Estas fluctuaciones originan "valles" e "islas" [dependiendo si la fluctuación es hacia adentro (*valle*) o hacia afuera (*isla*) del GaAs]. En la dirección perpendicular a la de crecimiento definimos las longitudes de los valles e islas (Fig. 1).

Consideramos que la interfase de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ está formada por capas de GaAs de anchura L_z ($L_z = 127.2 \text{ \AA}$) [9] y que las fluctuaciones estructurales en la interfase a lo largo de la dirección de crecimiento son del orden de una capa monoatómica, pudiendo presentarse los siguientes casos para el pozo cuántico:

- a) El pozo cuántico ideal de anchura L_z ;
- b) Fluctuaciones del pozo cuántico con anchuras $L_z \pm a/2$ ($a/2$ representa la anchura de una capa monoatómica. En nuestro caso $a/2 = 2.83 \text{ \AA}$) [10].

La longitud de las islas y valles originados por las fluctuaciones a lo largo de la dirección de crecimiento, se considera que tienen una magnitud del orden del radio de Bohr excitónico a_B (en nuestro caso $a_B = 170 \text{ \AA}$) [4].

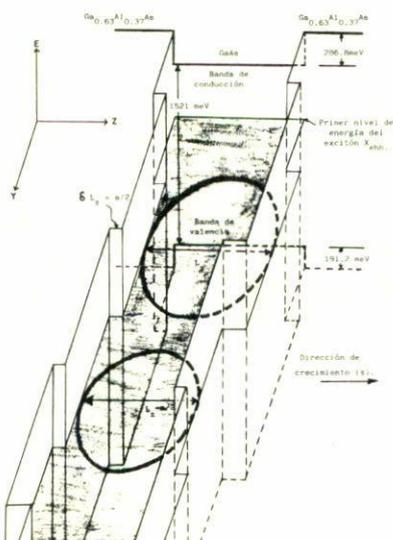


FIGURA 1. Diagrama esquemático que muestra la posición energética del excitón en el pozo cuántico, así como su posición en el plano $Y-Z$. El excitón con radio $L_x - \frac{a}{2}$, tiene mayor energía que el de radio L_x , lo que se indica con una mayor densidad de líneas horizontales. También se muestra la geometría del modelo empleado en este trabajo.

La Fig. 1 es un esquema de la geometría del modelo y la posición del excitón en las coordenadas Y, Z, E . Los parámetros usados en los cálculos se dan a continuación (véase Ref. [9]).

Ancho de energía prohibida del GaAs (E_g)	1521 meV
ΔE_g	478 meV
ΔE_c ($0.6\Delta E_g$)	286.8 meV
ΔE_v ($0.1\Delta E_g$)	191.2 meV
Longitud del pozo ideal (L_z)	127.3 Å
Concentración de aluminio (x)	0.37

3. Cálculo y resultados

El excitón “sentirá” la presencia de las fluctuaciones de la interfase (valles e islas) y éstas se reflejarán en el espectro de luminiscencia, ya que la energía del excitón está dada por [11]

$$E_{\text{excitón}}(L_z) = E_e(L_z) + E_h(L_z) - E_b + E_g, \quad (1)$$

siendo E_e y E_h las energías del electrón y del hueco, respectivamente, E_b la energía de enlace del excitón y E_g la anchura de la banda prohibida de energía del GaAs.

Los valores E_e y E_h son sensibles a las fluctuaciones de L_z , mientras que E_b no lo es [11].

Hemos calculado los valores $E_e(L_z)$, $E_e(L_z + a/2)$, $E_e(L_z - a/2)$ y $E_h(L_z)$, $E_h(L_z + a/2)$, $E_h(L_z - a/2)$ usando la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo ($V_0 = 286.8$ meV)

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k^2\psi = 0, \quad (\text{en las regiones donde } V_0 = 0) \quad (2)$$

siendo

$$k = \sqrt{\frac{-2m^*E}{\hbar^2}}$$

y

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + k_0^2\psi = 0 \quad (\text{dentro del pozo}) \quad (3)$$

con

$$k_0 = \sqrt{\frac{-2m^*(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

Las soluciones a estas ecuaciones están dadas por [12]

$$\epsilon \tan \epsilon = \sqrt{\frac{m^*V_0L_z^2}{2\hbar^2 - E^2}}, \quad (4)$$

con

$$\epsilon \equiv \sqrt{\frac{m^*EL_z^2}{2\hbar^2}}. \quad (5)$$

Por otra parte, empleando la teoría de perturbaciones para calcular los mismos niveles de energía, se usaron los siguientes potenciales perturbativos (las cifras entre paréntesis son las energías para los huecos):

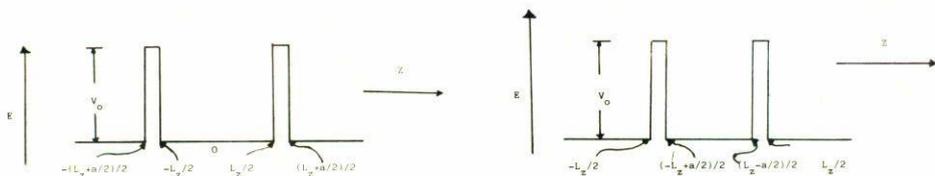


FIGURA 2. a) Potencial perturbativo para el caso en que el pozo cuántico se ensancha. b) Potencial perturbativo para la reducción del pozo cuántico. $V_0 = 286.8$ meV y $a/2$ representa el valor de una capa monoatómica (2.83 Å).

1. Ensanchamiento del pozo ($V_{per 1}$)

$$V_{per 1} = \begin{cases} 286.8 \text{ meV} & -(L_z + a/2)/2 < Z < -L_z/2 \\ (191.2 \text{ meV}) & L_z/2 < Z < (L_z + a/2)/2 \\ & Z < -(L_z + a/2)/2 \\ 0 & |Z| \leq L_z/2 \\ & Z > (L_z + a/2)/2 \end{cases} \quad (1)$$

2. Reducción del pozo ($V_{per 2}$)

$$V_{per 2} = \begin{cases} 286.8 \text{ meV} & -L_z/2 < Z < (-L_z + a/2)/2 \\ (191.2 \text{ meV}) & (L_z - a/2)/2 < Z < L_z/2 \\ & Z < -L_z/2 \\ 0 & (-L_z + a/2)/2 < Z \leq (L_z - a/2)/2 \\ & Z > L_z/2 \end{cases} \quad (2)$$

Hemos usado la expresión $\Delta E = \int \psi_{e,h}^* \Delta V_{per 1,2} \psi_{e,h} dV$ para calcular las variaciones de la energía del electrón (e) y del hueco (h) durante la ampliación (1) o reducción del pozo cuántico (2).

Ecuación de Schrödinger	Teoría de perturbaciones
$\Delta E_{01e} = 1 \text{ meV}$	$\Delta E_{01e} = 0.72 \text{ meV}$
$\Delta E_{01h} = 0.24 \text{ meV}$	$\Delta E_{01h} = 0.16 \text{ meV}$
$\Delta E_{02e} = 1.12 \text{ meV}$	$\Delta E_{02e} = 0.9 \text{ meV}$
$\Delta E_{02h} = 0.26 \text{ meV}$	$\Delta E_{02h} = 0.24 \text{ meV}$

Resultados experimentales según la Referencia [9] para los cambios de energía electrónicos:

$$\Delta E_{01e} = |1539.4 \text{ meV} - 1540.3 \text{ meV}| = 0.9 \text{ meV}$$

$$\Delta E_{02e} = |1541.4 \text{ meV} - 1540.3 \text{ meV}| = 1.1 \text{ meV}$$

TABLA I. Cambios de energías (ΔE_{0i}) para el electrón (e) y para el hueco (h), debido a las fluctuaciones en la anchura del pozo ideal ($L_z = 127.2 \text{ \AA}$). $i = 1 (= 2)$ indica la diferencia energética entre el pozo ideal y $L_z = 130 \text{ \AA}$ ($L_z = 124.3 \text{ \AA}$).

Anchuras del pozo [9]	$L_z - a/2 = 124.3 \text{ \AA}$	$L_z = 127.2 \text{ \AA}$	$L_z + a/2 = 130 \text{ \AA}$
Energía del electrón (meV)	$E_{2e} = 24.71$	$E_{0e} = 23.59$	$E_{1e} = 22.59$
Energía del hueco (meV)	$E_{2h} = 5.77$	$E_{0h} = 5.51$	$E_{1h} = 5.27$

TABLA II. Parámetros usados en el cálculo de la ecuación (6). Las energías del electrón y del hueco han sido calculadas en este trabajo para los tres casos mostrados. $T = 4.2 \text{ K}$, $E_g(\text{GaAs}) = 1521 \text{ meV}$ [9], $E_b = 24 \text{ meV}$ [8].

En la Fig. 2 se esquematizan los potenciales perturbativos. En la Tabla I se resumen los valores obtenidos por ambos métodos y su comparación con resultados experimentales recientes.

El espectro de fotoluminiscencia se calcula utilizando la ecuación [13]

$$I(E) = (E - E_{\text{excitón}})^{1/2} \exp - \left[\frac{(E - E_{\text{excitón}})}{KT} \right]. \quad (6)$$

Los parámetros usados para este fin se dan en la Tabla II. La Fig. 3 muestra el espectro de recombinación obtenido usando estos parámetros.

4. Discusión y conclusiones generales

Según el modelo usado en este trabajo, las fluctuaciones espaciales en las interfaces se manifiestan como picos adicionales en los espectros de fotoluminiscencia excitónica, cuyas posiciones indican la posición energética de los niveles de energía interactuantes. En nuestro caso, hemos considerado el modelo estructural interfacial específico, que consiste en fluctuaciones a lo largo de la dirección de crecimiento del orden de una capa monoatómica y extensión del orden del radio de Bohr excitónico. El modelo tiene bases físicas en el avance de las técnicas de crecimiento, con lo cual este modelo deja de ser ideal.

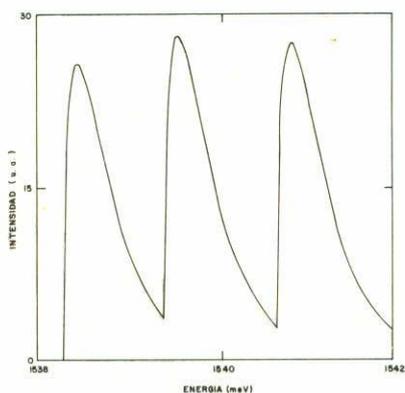


FIGURA 3. Espectro de recombinación excitónica en el pozo cuántico de $\text{Ga}_{0.67}\text{Al}_{0.37}\text{As-GaAs}$. La separación entre picos es de 1 meV y refleja las fluctuaciones en la anchura del pozo cuántico.

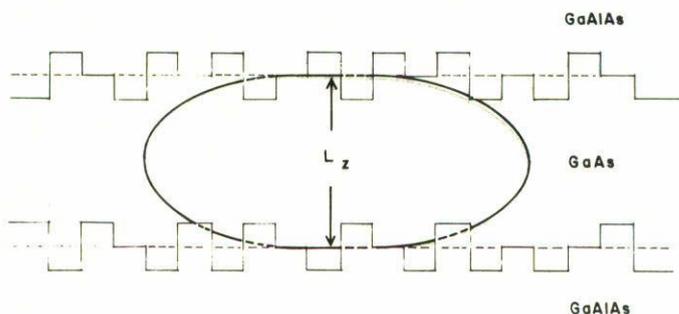


FIGURA 4. Interfase de GaAlAs-GaAs producida sin interrupción en crecimiento. En este caso las longitudes de los valles e islas son pequeñas comparadas con la longitud del excitón.

Pueden ser establecidos modelos más complejos (como el mostrado en la Fig. 4). En este caso tendríamos que considerar una función de distribución para los valles e islas, la cual se reflejaría nuevamente en el espectro de recombinación. En un trabajo posterior trataremos este problema.

Los niveles energéticos del electrón y del hueco pueden ser calculados usando la ecuación de Schrödinger o la teoría de perturbaciones. Si bien existe una ligera diferencia en los resultados obtenidos, esta proviene de considerar diferentes regiones de integración para las funciones de onda. En el caso de reducción del pozo, la función es cosenoidal y la aportación a la primera perturbación del cambio de nivel es considerable. Cuando el pozo se ensancha, la función decae exponencialmente, por lo que la variación no aporta mucho al valor de la primera perturbación.

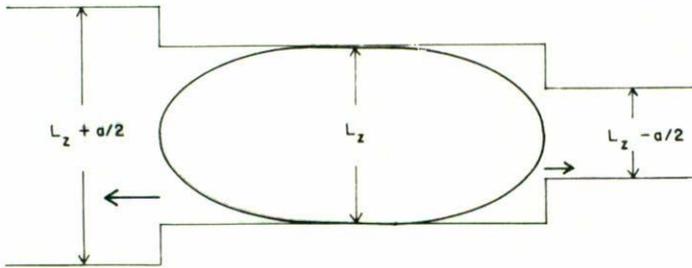


FIGURA 5. El excitón en el pozo cuántico ideal tenderá a difundirse hacia otras regiones. Las probabilidades de que tal difusión se lleve a cabo se dan en el texto.

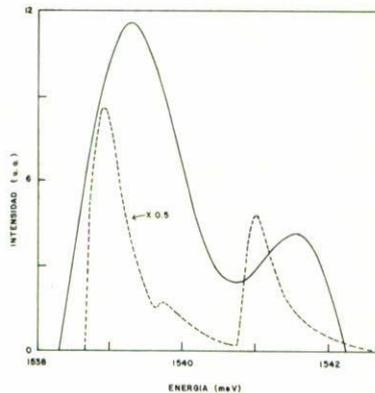


FIGURA 6. Comparación entre resultados teóricos (curva discontinua) y resultados experimentales [9] (curva continua) del espectro de recombinación excitónica en el pozo cuántico de GaAlAs-GaAs, considerando difusión excitónica en la dirección Y . Existe acuerdo cualitativo entre ambas curvas.

Recientemente han sido reportados procesos de difusión de excitones a través de las interfaces de GaAlAs-GaAs [9]. Estos resultados revelan difusión preferencial del excitón localizado en el pozo ideal hacia regiones donde el pozo es mayor (consistente con la tendencia a la minimización de energía de cualquier sistema). La Fig. 5 muestra estos procesos.

Consideramos en nuestro tratamiento tales procesos de difusión, obteniendo el resultado mostrado en la Fig. 6 para el espectro de recombinación excitónica. En el trabajo de Kohl *et al.* [9] se consideraron pozos cuánticos de anchuras 44, 45 y 46 capas monoatómicas y se propuso un modelo para evaluar el tamaño de las islas usando ecuaciones de razón que tomaban en cuenta el proceso de difusión excitónica. Ellos encontraron los siguientes valores para las áreas normalizadas de las islas E_c :

$F_1 = 0.6$, $F_2 = 0.02$, $F_3 = 0.38$. Con base en estos resultados hemos graficado en la Figura 6, con fines comparativos, nuestros resultados teóricos y los resultados experimentales de la Ref. [11]. Encontramos acuerdo cualitativo entre ambas curvas. La parte de la curva experimental en la región de bajas energías corresponde al área normalizada $F_1 = 0.6$, mientras que la de altas energías corresponde a $F_3 = 0.38$. Puesto que el área bajo la curva es proporcional a la radiación emitida, existe una difusión preferencial hacia la región F_1 .

Como conclusión general podemos decir que el espectro de recombinación excitónica proporciona información sobre la composición estructural de las interfases entre dos semiconductores (como por ejemplo una superred) y además proporciona información sobre procesos de difusión excitónica a lo largo de esa interfase.

Referencias

1. E.H.C. Parker (ed), *Technology and Physics of Molecular Beam Epitaxy*, Plenum Press, (1985).
2. R.D. Dupuis, *Journal of Crystal Growth* **55** (1981) 213.
3. K. Ploog, *Journal of Crystal Growth* **79** (1986) 887.
4. D. Bimberg, D. Mars, J.N. Miller, R. Bauer, D. Oertel, J. Christen, *Superlattices and Microstructures* **3** (1987) 79.
5. J.I. Pankove, *Optical Processes in Semiconductors*; Dover (1975).
6. M.A. Herman, *Semiconductor Superlattices*, Akademie Verlag, Berlin (1986).
7. B. Deveaud, J.Y. Emery, A. Chomette, B. Lambert, M. Baudet, *Superlattices and Microstructures* **1** (1985) 205.
8. B.A. Vojak, N. Holanyak, W.D. Laidig, K. Hess, J.J. Coleman and P.D. Dapkus, *Solid State Communications* **35** (1980) 477.
9. M. Kohl, D. Heitmann, S. Tarucha, K. Leo y K. Ploog, *Phys. Rev. B* **39** (1989) 7736.
10. D. Bimberg, D. Mars, J.N. Miller, R. Bauer and D. Oertel, *J. Vac. Sci. Technol. B* **4** (1986) 1014.
11. J. Singh, K.K. Bajaj, S. Chaudhuri, *Appl. Phys. Lett.* **44** (1984) 805.
12. R. Eisberg, R. Resnick, *Física Cuántica*, Limusa, (1978).
13. R.W. Martin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **66** (1974) 627.

Abstract. Fluctuations in interfaces of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$ ($x = 0.37$), respect to the ideal interface, are considered and investigated using the photoluminescence spectrum of the excitonic transition. We use the time independent Schrödinger equation and perturbation theory to calculate variations in the electron (hole) energy levels originated by the fluctuations in the interfaces. Theoretical results obtained herein are applied to consider exciton diffusion and are compared with recent experimental results.