

UNIVERSIDAD DE SONORA

División de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física



9 FVDCIMS
151 43

EL SABER DE MIS HIJOS
HARA MI GRANDEZA

Caracterización óptica de Pozos Cuánticos de AlGaAs/GaAs crecidos por MBE con interrupciones de crecimiento.

Tesis que para obtener el grado de

Licenciado en Física

Presenta:

Paola Alejandra Acosta Díaz.

Hermosillo, Sonora

Septiembre del 2001

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



**"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"**



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

A quienes debo todo lo que soy:

A mis padres



AGRADECIMIENTOS

Al G.:A.: d.: U.:, por permitirme estar aquí y tener tanto que agradecer.

Quiero agradecer a mis padres todo su amor, su paciencia y su confianza. A mi papá, por su apoyo, por haberme enseñado que siempre se pueden superar los obstáculos y además que siempre hay una forma correcta de hacerlo. A mi gran amazona: mi madre, por su empuje, su valentía y por enseñarme que no hay límite para los sueños.

A mis hermanos: Nelly , Inés y Gil, por su amor incondicional.

A Gerardo, por compartir conmigo penas y alegrías, por ser mi fiel compañero de andanzas.

A todo el Departamento de Física de la UNISON, por haberme cobijado. A mis maestros por ser tan generosos con su conocimiento. A mis compañeros, en especial a los 93-2, por una infinidad de gratos recuerdo y amenas desveladas.

Al Dr. Máximo López López, por su gran apoyo y la paciente dirección de este trabajo.

A los Dres. : Arturo Rosas, Adalberto Corella, Francisco Castro y Humberto Arizpe, por sus observaciones y atinados consejos durante la revisión de esta tesis.

A mis tíos y primos, especialmente Jorge y Blanca, por preocuparse por mí, a Sonia, al Teto y a Alma Angelina por todos los buenos momentos.

¡A todos, G R A C I A S!

*El diamante no se pule sin fricciones
ni el hombre se perfecciona sin pruebas*



ÍNDICE

Agradecimientos	iv
Índice de figuras	vi
Índice de tablas	viii
<u>1.- Introducción.</u>	1
<u>2.-Conceptos Básicos.</u>	
2.1 Estructura de Bandas	6
2.2 Semiconductores	8
2.2.1 GaAs y AlGaAs	9
2.3 MBE	14
2.3.1 Reconstrucciones superficiales	20
2.4 Fotoluminiscencia	22
<u>3.-Desarrollo teórico.</u>	
3.1 Pozos cuánticos	26
3.1.1 Teoría	28
3.1.2 Pozos cuánticos de AlGaAs/GaAs/AlGaAs	32
3.2 Rugosidad en las interfaces	33
<u>4.-Detalles experimentales.</u>	
4.1 Fabricación de muestras	37
4.2 Espectroscopía de FL	39
<u>5.- Resultados y discusión.</u>	
5.1 Espectro de FL muestra de referencia	41
5.2 Espectros de FL de muestras ex-situ	45
5.3 Espectros de FL de muestras in-situ	49
5.4 Comparación de resultados	52
<u>6.- Conclusiones y trabajos a futuro</u>	80
<u>Apéndices.</u>	
A.1 Aproximaciones	81
A.1.1 Aproximación de la masa efectiva	82
A.1.2 Aproximación de la función envolvente	83
A.2 Excitones	86
<u>Referencias</u>	88

Índice de Figuras

Capítulo 2

- 2.1 Representación esquemática de la formación de bandas de energía.
- 2.2 Diagrama de bandas de energía de un metal, un aislante y un semiconductor.
- 2.3 Estructura cristalina del GaAs (AlGaAs).
- 2.4 Primera zona de Brillouin de la red recíproca de la zinc-blenda.
- 2.5 Estructura de bandas del GaAs y del AlAs.
- 2.6 Esquema de las cámaras de un sistema MBE.
- 2.7 Cámara de crecimiento típica de MBE.
- 2.8 Diagrama del análisis de superficie mediante RHEED.
- 2.9 Imagen RHEED de la reconstrucción $c(2 \times 4)$ del GaAs.
- 2.10 Imagen RHEED de la reconstrucción $c(4 \times 4)$ del GaAs.
- 2.11 Diversos procesos de fotoluminiscencia.

Capítulo 3

- 3.1 Representación uni-dimensional de una heterounión formada entre dos semiconductores A y B, con constantes de red idealmente acopladas.
- 3.2 Representación de la alineación de bandas en la formación de un pozo cuántico
- 3.3 Potencial de pozo cuadrado.
- 3.4 Modelos utilizados para estudiar la rugosidad en las interfaces

Capítulo 4

- 4.1 Representación esquemática de las heteroestructuras estudiadas
- 4.2 Montaje experimental del arreglo de fotoluminiscencia

Capítulo 5

- 5.1 Energía de recombinación en función del ancho del pozo. Se muestran los anchos reales de los pozos de las diferentes muestras.
- 5.2 Espectro de FL a 77K de la muestra de referencia.
- 5.3 Ajustes del espectro de la muestra 0.
- 5.4 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 0.
- 5.5 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 0.
- 5.6 Espectro de FL a 77K de la muestra 1
- 5.7 Ajustes del espectro de la muestra 1.
- 5.8 Gráficas de las intensidades de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 1.

- 5.9 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 1.
- 5.10 Espectro de FL a 77K de la muestra 2.
- 5.11 Ajustes del espectro de la muestra 2.
- 5.12 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 2.
- 5.13 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 2.
- 5.14 Espectro de FL a 77K de la muestra de 5
- 5.15 Ajustes del espectro de la muestra 5.
- 5.16 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 5.
- 5.17 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 5.
- 5.18 Espectro de FL a 77K de la muestra 7
- 5.19 Ajustes del espectro de la muestra 7.
- 5.20 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 7.
- 5.21 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 7.
- 5.22 Espectro de FL a 77K de la muestras de referencia y las muestras procesadas ex-situ.
- 5.23 Espectro de FL a 77K de la muestras de referencia y las muestras procesadas in-situ.
- 5.24 Posición de la energía de cada una de las emisiones para las distintas muestras.
- 5.25 Rugosidad de cada pozo de las muestras estudiadas.
- 5.26 Intensidad integrada de cada uno de los picos de emisión de las muestras estudiadas.

Índice de Tablas

Capítulo 1

Tabla I Valores de los parámetros definidos para las ecuaciones 2.2 y 2.3 tomados de Lautenshlager.

Capítulo 4

Tabla II Características de las muestras estudiadas.

Capítulo 5

Tabla III Características del espectro de FL de la muestra 0.

Tabla IV Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra de referencia.

Tabla V Características del espectro de FL de la muestra 1.

Tabla VI Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 1.

Tabla VII Características del espectro de FL de la muestra 2.

Tabla VIII Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 2.

Tabla IX Características del espectro de FL de la muestra 5.

Tabla X Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 5.

Tabla XI Características del espectro de FL de la muestra 7.

Tabla XII Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 7.

1**Introducción**

Trascendentales inventos, como el transistor en 1947, el circuito integrado en 1959 (Premio Nóbel 2000) y el diodo láser semiconductor encabezaron la era de la información y la tecnología microelectrónica y la optoelectrónica. Actualmente dependemos cada vez más de dispositivos electrónicos y ópticos para realizar labores cotidianas.

Tal es el caso de teléfonos celulares, agendas electrónicas, sistemas de entretenimiento digitales (CD's, DVD's, etc.), lectores ópticos en los supermercados y qué decir de las computadoras o el Internet.

La urgencia de dispositivos electrónicos cada vez más pequeños, más rápidos y de menor costo ha creado un nuevo campo: la nanotecnología, en donde la microelectrónica empieza a ser opacada por los prometedores dispositivos de efectos cuánticos, cuya propiedad característica es que al ser tan pequeños, son estos efectos los que rigen su comportamiento.

Los avances tecnológicos han impactado también el campo de la investigación, permitiendo grandes progresos en la síntesis y el procesamiento de nuevos materiales y estructuras, logrando con ello materiales con características insospechadas y un dramático mejoramiento en las propiedades de los materiales ya existentes.

Con estos nuevos materiales es posible crear dispositivos innovadores o lograr una significativa reducción en su tamaño; ejemplo de esto son las heteroestructuras semiconductoras (estructuras periódicas formadas por capas alternadas de distintos semiconductores, con grosor del orden de nanómetros) utilizadas entre otras cosas, para la fabricación de láseres y microprocesadores. Hoy en día en un microprocesador, sus componentes más pequeños llegan a ser de 200 nm aproximadamente --tamaño equivalente

a una milésima parte de un cabello humano-- y ya se cuenta con chips elaborados a base de estructuras semiconductoras del orden de 10 nm..

La necesidad de crear o mejorar materiales ha hecho que técnicas ampliamente conocidas, como las utilizadas en el crecimiento cristalino, requieran mejoras continuas en cuanto al control de los procesos de depósito. Nuevas formas de fabricación han surgido, de entre las cuales sobresale el crecimiento por Epitaxia de Haces Moleculares (MBE acrónimo del inglés Molecular Beam Epitaxy), que permite la elaboración de películas delgadas en la escala atómica. Por medio de un haz de átomos incidiendo hacia una superficie en ultra-alto vacío, capas del grosor de un átomo pueden colocarse una sobre otra, usando la técnica de MBE

Este método, desarrollado hace unas cuantas décadas, ha revelado nuevas áreas en la física básica. En la parte tecnológica, actualmente se fabrican dispositivos con esta técnica de forma masiva, ejemplo de esto son los transistores de alta velocidad utilizados en la transmisión por teléfonos celulares o los modernos procesadores de computadoras.

Existe una gran variedad de nanoestructuras semiconductoras, usándose diversas técnicas para su elaboración, las más ampliamente usadas son la de MBE y MOCVD (del inglés Metal Organic Chemical Vapor Deposition). Como prototipos de nanoestructuras, podemos mencionar a los pozos cuánticos, que son estructuras bidimensionales, a los hilos cuánticos, estructuras de una dimensión, y a los cristalitos nanométricos, considerados como puntos cuánticos, siendo los pozos cuánticos los fabricados con mayor precisión y perfección.

El reto de la nanofabricación es alcanzar el control de crecimiento en las tres dimensiones, esto implica controlar no solo el grosor de las capas, sino la calidad de todo el proceso en general.

En este trabajo de tesis nos limitaremos al estudio de pozos cuánticos. Estos se forman al crecer una delgada capa de un material semiconductor (A) entre dos capas de otro material semiconductor (B).

Debido a la diferencia de energía de la brecha prohibida de los materiales, las bandas de conducción y las bandas de valencia de A y B no se alinean, produciendo en la interfaz un salto en la banda de valencia y otro en la banda de conducción. Si consideramos

las tres capas (B/A/B) que forman un pozo, entonces se crean dos discontinuidades en ambas bandas.

Si la capa de A es lo suficientemente delgada ($\sim 100 \text{ \AA}$) los electrones serán confinados en el pozo de la banda de conducción en niveles de energía determinados por las características propias del pozo. De modo análogo los huecos sentirán efectos de confinamiento entre las discontinuidades de la banda de valencia.

Comparaciones de los resultados experimentales y los cálculos teóricos han demostrado que las discontinuidades suelen ser muy abruptas, aproximándose bastante bien el potencial de pozo cuadrado al potencial de confinamiento presente en estas estructuras (de ahí el nombre asignado a estas nanoestructuras).

En este trabajo estudiaremos heteroestructuras formadas con materiales $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ crecidos por MBE. El proceso de crecimiento de las heteroestructuras, se divide en múltiples etapas de procesamiento, las cuales, en definitiva, afectarán las cualidades del dispositivo. Algunas de las características importantes durante la fabricación de las heteroestructuras son: la temperatura de crecimiento, el proceso de limpieza del sustrato donde se crecerán los pozos, etc. Entre las propiedades más importantes destaca la calidad de las interfaces de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, que pueden verse afectadas por la presencia de impurezas, campos eléctricos, desacople de red, entre otros factores. Interfaces de muy alta calidad son requeridas en los dispositivos optoelectrónicos basados en pozos cuánticos. Que se tengan interfaces lisas implica que se obtiene más movilidad de electrones y transiciones ópticas excitónicas definidas, las cuales optimizan la operación de ciertos dispositivos.

Cuando los átomos son depositados por MBE sobre alguna superficie, éstos no se acomodan en una película uniforme, por el contrario, forman islas cuyo tamaño y distribución dependen de los parámetros termodinámicos del crecimiento. La formación y evolución de estas islas durante el crecimiento se ha comenzado a estudiar y comprender recientemente.

El efecto de estas islas en las propiedades de los pozos cuánticos es de gran magnitud, pues a mayor rugosidad son mayores los efectos de dispersión en las interfaces, degradando la calidad de la muestra.

Un descubrimiento importante hecho últimamente es que al realizar interrupciones en el crecimiento, las interfaces se aplanan. Las islas toman la forma de terrazas extensas mayores al radio de Bohr (100 \AA) y es justamente este tipo de interfaces, las que mejoran las características eléctricas y ópticas de los dispositivos.

Así pues, el objetivo principal de este trabajo es estudiar los cambios en las propiedades de pozos cuánticos de $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ debidos a diferentes procesos de interrupción del crecimiento en la interfaz de la capa colchón de GaAs.

Otra de las principales motivaciones para el estudio de interrupciones en pozos cuánticos, es debido a que el proceso de fabricación de dispositivos se lleva a cabo en diferentes etapas, entre estas se presentan interrupciones necesarias en el crecimiento. En algunos procesos, incluso es necesario exponer la muestra al aire, como ocurre cuando se realiza un litografiado.

Por esta razón, en esta tesis estudiamos muestras con interrupciones de crecimiento realizadas in-situ (en ultra-alto vacío) y muestras con interrupciones ex-situ (con exposición al aire), con la intención de determinar la magnitud de los posibles daños en las propiedades de las muestras y correlacionarlos con los procesos realizados a la interfaz.

La caracterización de los pozos cuánticos se realizó mediante la técnica de espectroscopía de fotoluminiscencia a bajas temperaturas. La espectroscopía de fotoluminiscencia es una técnica no destructiva, proporciona información sobre los parámetros de crecimiento, dando indicaciones de defectos producidos en el procesamiento y en los tratamientos posteriores. Con esta técnica es posible obtener la rugosidad de las interfaces, ya que proporciona información sobre las transiciones radiativas del dispositivo.

La razón para realizar la caracterización a bajas temperaturas, es esencialmente para obtener mejor definición en los espectros por la disminución de estados excitados térmicamente.

Los conceptos preliminares necesarios para la comprensión del desarrollo de este trabajo se han incluido en el Capítulo II. Los temas no son tratados extensamente, sino solo con la finalidad de servir de guía. En caso de haber mayor interés sobre algún punto en especial se dan las referencias adecuadas. En el Capítulo III se exponen los cálculos teóricos y las aproximaciones utilizadas en la obtención de las propiedades de las estructuras estudiadas. Se presenta el desarrollo del estudio de los pozos cuánticos y se

de conducción, por lo tanto el número de electrones y el número de huecos es el mismo. A estos semiconductores se les conoce como Semiconductores Intrínsecos.

Una de las formas de incrementar la corriente en un semiconductor es introduciendo impurezas o vacancias, es decir dopando un material. Supongamos que reemplazamos un átomo de la red cristalina de un material por un átomo distinto que posee más electrones que el átomo original. Estos electrones sobrantes, no serán utilizados para crear enlaces, por lo que podrán con facilidad ser excitados hacia la banda de conducción, mediante vibraciones térmicas del cristal. Si la temperatura es muy baja, solo unos cuantos electrones de la banda de valencia logran brincar la brecha prohibida, los electrones proporcionados por las impurezas serán entonces una fuente de electrones para la conducción eléctrica. Cuando al semiconductor se le dopa con una impureza donadora, se le conoce como semiconductor tipo n.

Ahora bien, si se dopa al material con un átomo que contenga un menor número de electrones que el átomo existente, se producirá una vacancia. Esto puede considerarse como un electrón de menos, pero al ser aplicada una diferencia de potencial a la muestra, un electrón de un átomo vecino emigrará para llenar este hueco, dejando por la vacancia, dejando a su vez, un hueco en el átomo del cual proviene. Este hueco será llenado, por otro electrón de un átomo vecino y así sucesivamente. El movimiento de cargas, en este caso se le adjudica a los huecos. A estos materiales se les denomina semiconductores de tipo p, por ser la carga positiva, la responsable de la corriente. Ambos tipos de semiconductores son considerados Semiconductores Extrínsecos.

Existe otra clasificación que depende de la forma de la estructura de bandas. Se dice que un semiconductor es de banda directa cuando el máximo de la banda de valencia se localiza en el mismo punto del espacio k , que el mínimo de la banda de conducción. El semiconductor es de banda indirecta cuando esto no se cumple.

2.2.1 GaAs y AlGaAs

Los compuestos semiconductores III-V surgieron a finales de los 60's, como una nueva clase de materiales para dispositivos ópticos y de alta-velocidad. Los portadores

de estos materiales, poseen una masa efectiva más pequeña que en los semiconductores puros, como el Si o el Ge, consecuentemente poseen una mayor movilidad.

Otra de sus características más relevantes, es la posibilidad de variar su brecha prohibida dejando prácticamente intacta la constante de red. Diversas estructuras empleadas para la fabricación de novedosos dispositivos se han visto altamente favorecidas al hacer un uso eficiente de estas características. De entre los materiales del grupo III-V, el que más se utiliza es el GaAs y el sistema $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ es de gran importancia debido a que la diferencia en el parámetro de red entre el GaAs y el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($0 \leq x \leq 1.0$) es muy pequeña (menor que 0.15% a 300K), lo que garantiza la poca concentración de estados de interface no deseados.

Algunos de los compuestos III-V, en particular el GaAs y el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ cristalizan en la estructura de zinc-blenda. Su red espacial es una fcc (del inglés face center cubic), con 4 átomos por celda unitaria y alrededor de cada átomo existen 4 átomos igualmente distantes del tipo opuesto (Fig. 2.3). La distancia de separación entre un átomo de GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ es de 2.45 Å aproximadamente. Esta estructura no posee simetría de inversión y su base está compuesta por dos átomos distintos, uno localizado en el origen y otro en $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$

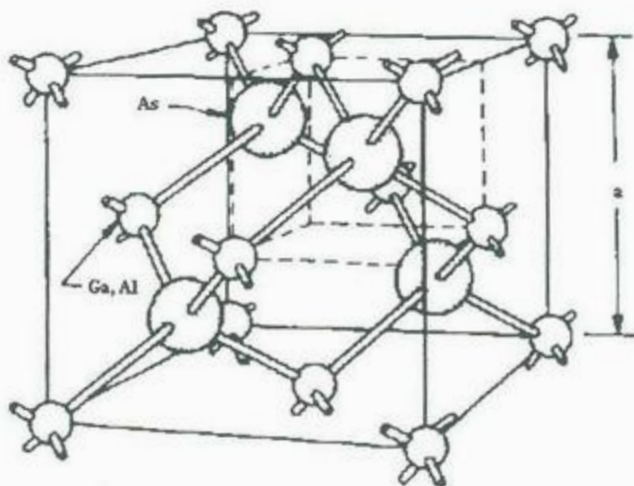


Fig 2.3 Estructura cristalina del GaAs (AlGaAs)

La constante de red de GaAs altamente puro y estequiométrico a temperatura ambiente es de 5.653 Å a temperatura ambiente^[2], con una incertidumbre de 1×10^{-6} Å.

La constante de red del $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, varía en función de la concentración de acuerdo a la ley de Vegard, la que supone una dependencia lineal de la constante de red con la composición dada como:

$$a_{\text{AlGaAs}}(x) = 5.633 + 0.0078x^{[2]} \quad (2.1)$$

La primera zona de Brillouin de la red recíproca de la zinc-blenda es un octaedro truncado (Fig. 2.4). Los puntos de alta simetría se denominan como (Γ , X, L). El punto Γ se encuentra justo en el centro de la zona de Brillouin, en $k = (0,0,0)$. El punto X corresponde a la intersección del eje con la dirección $k = (1,0,0)$ denotada por Δ . La dirección a lo largo de $k = (1,1,1)$ se denota por Λ y su intersección con el borde por L.

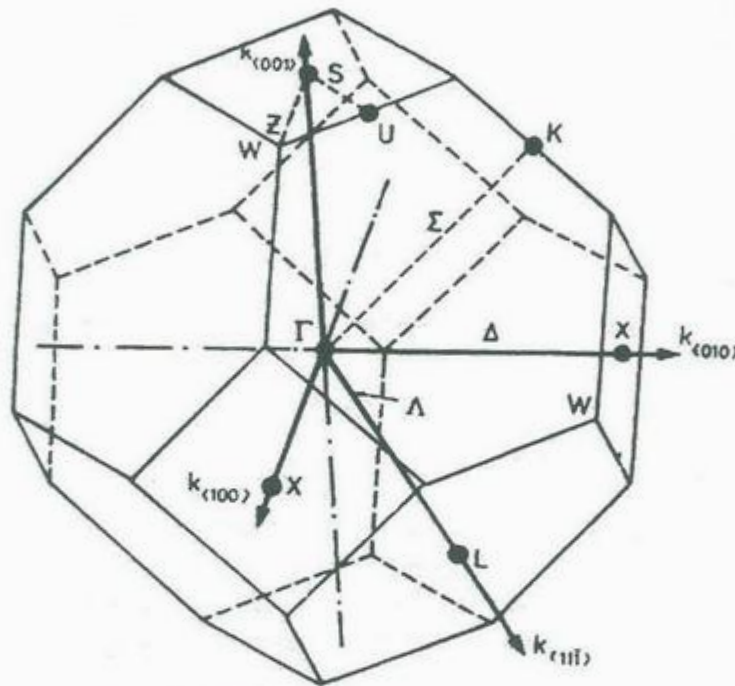


Fig. 2.4 Primera zona de Brillouin de la red recíproca de la zinc-blenda.

Tanto el GaAs como el $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ son semiconductores de banda directa, pues tanto el máximo de la banda de valencia como el mínimo de la banda de conducción se localizan en el centro de la banda de Brillouin (punto Γ)^[3]. En ambos el mínimo de la banda de conducción es doblemente degenerado (de simetría Γ_6) y está separado una energía E_0 de la banda de valencia, que posee una degeneración cuádruple (simetría Γ_8).

Lejos de la zona central, para el GaAs, las bandas de valencia más altas se separan en dos bandas, llamadas la banda de los huecos pesados y la banda de los huecos ligeros, debido a su masa efectiva grande y pequeña, respectivamente. El otro conjunto de bandas es conocido como las bandas de desdoblamiento de espín, las cuales también poseen su máximo en el punto Γ , punto donde son doblemente degeneradas (simetría Γ_7) y están separadas una energía Δ_0 de los estados Γ_8 (Fig. 2.5).

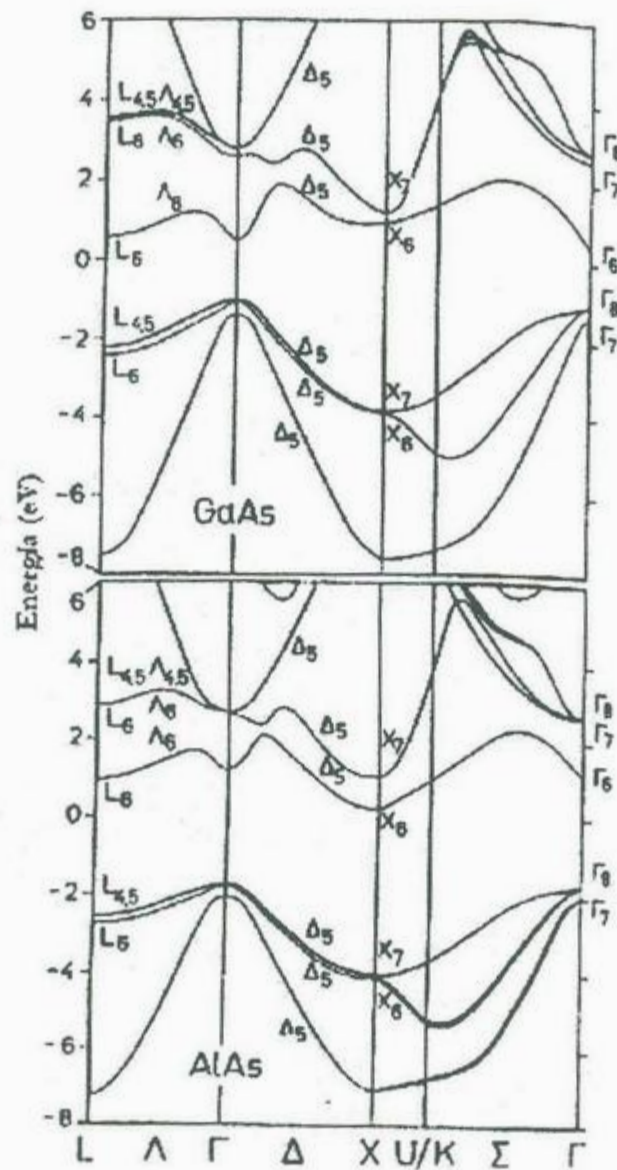


Fig 2.5 Estructura de banda del GaAs y del AlAs.

La energía de transición entre la banda de valencia y la de conducción en el GaAs y su dependencia con la temperatura ha sido cuantificada mediante una gran variedad de técnicas ópticas, las que incluyen fotoluminiscencia, absorción, reflectancia, y diversas

técnicas de modulación de reflectancia, incluyendo pizorreflectancia, reflectancia, electrorreflectancia y reflectancia de onda modulada^[4].

La dependencia con la temperatura de la brecha prohibida está asociada teóricamente con la dilatación de la red y con las interacciones electrón-fonón. Se ha postulado que la banda de valencia no varía con la temperatura^[5]. La brecha prohibida entre el máximo de la banda de valencia y los estados más bajos de conducción en Γ , X y L, decrece con la temperatura y esta variación comúnmente se describe con la relación empírica propuesta por Varshni^[6]:

$$E(T) = E(0) - \alpha T^2 / (T + \beta) \quad (2.2)$$

donde α y β son constantes que dependen del material. Para el GaAs véase la tabla I.

Recientemente se propuso también la ecuación semi-empírica de Bose-Einstein^[7-8]:

$$E(T) = E_B - a_B (1 + 2 / \{ \exp(\Theta/T) - 1 \}) \quad (2.3)$$

donde a_B representa la fuerza de la interacción electrón-fonón y Θ corresponde a la frecuencia media del fonón.

	E(0) (eV)	α 10^{-4} (eV/K)	β (K)	E_B (eV)	a_B (meV)	Θ (K)
E_0	1.517	5.5	225	1.571	57	240
$E_0 + \Delta_0$	1.851	3.5	225	1.907	58	240
E_1	3.041	7.2	205	3.125	91	274
E_0'	4.509	4.0	241	4.563	59	323
E_2	5.133	6.6	43	5.161	38	114

TABLA I. Valores de los parámetros definidos para las ecuaciones anteriores, tomados de Lautenschlager et al^[9], para los distintos puntos de simetría.

Para el $Al_xGa_{1-x}As$, la energía de la brecha prohibida no sólo varía con la temperatura, sino que también lo hace con la concentración, esta energía se obtiene

mediante una aproximación para temperaturas dentro del rango $0 < T < 300$ K y concentraciones menores de 0.7, a partir de la relación siguiente^[10]:

$$E_g(T, x) = \frac{A(T) + B(T)x + C(T)x^2}{D(T) + Ex} \quad (2.4)$$

donde:

$$A(T) = 341.87 + 1.519 T - 5.5 \times 10^{-4} T^2 \text{ (eV K)}$$

$$B(T) = 466.71 + 1.48 T - 3.3 \times 10^{-4} T^2 \text{ (eV T)}$$

$$C = 130.24 \text{ (eV T)}, D(T) = 225 + T \text{ (K)}, E = 88 \text{ (K)}$$

2.3 MBE

El método de crecimiento por medio de epitaxia de haces moleculares fue desarrollado a principios de los 70's^[11-13], con la finalidad de crecer capas epitaxiales de semiconductores con muy alta calidad. Con el tiempo ha logrado convertirse en una de las técnicas más comunes para crecer compuestos de semiconductores III-V, así como de otros materiales. Por MBE (del anacronismo del inglés Molecular Beam Epitaxy), se consiguen producir capas de muy alta calidad con interfaces muy abruptas y un excelente control del grosor, dopaje y composición de las mismas. Es este alto grado de control alcanzado por MBE, lo que lo hace una invaluable herramienta en el desarrollo de sofisticados dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.

En el MBE, los elementos constitutivos de un semiconductor son depositados en forma de haces moleculares sobre sustratos cristalinos calentados previamente a altas temperaturas para formar delgadas capas epitaxiales. Los haces moleculares provienen de la evaporación térmica de las fuentes elementales. Para obtener capas de alta calidad, es crucial que las fuentes de los materiales sean extremadamente puras y que todo el proceso se lleve a cabo a ultra alto vacío. Otro aspecto importante es que la velocidad de crecimiento es generalmente del orden de unos cuantos anstrongs por segundo (para el GaAs suele ser de $1 \mu\text{mh}^{-1}$) y los haces pueden ser obstruidos en fracción de segundos, permitiendo unas transiciones atómicamente abruptas de un material a otro.

Un esquema funcional del sistema de MBE se muestra en la Fig. 2.6. Un sistema de MBE típico consiste en tres cámaras principales de vacío: una cámara de crecimiento, una cámara auxiliar y una cámara de entrada y salida de las muestras (load lock). Todas las cámaras poseen un sistema de bombeo independiente.

La cámara de entrada/salida es el compartimento de transición entre el ambiente de ultra alto vacío y el medio ambiente externo, lo que permite mantener íntegro el vacío de las cámaras restantes.

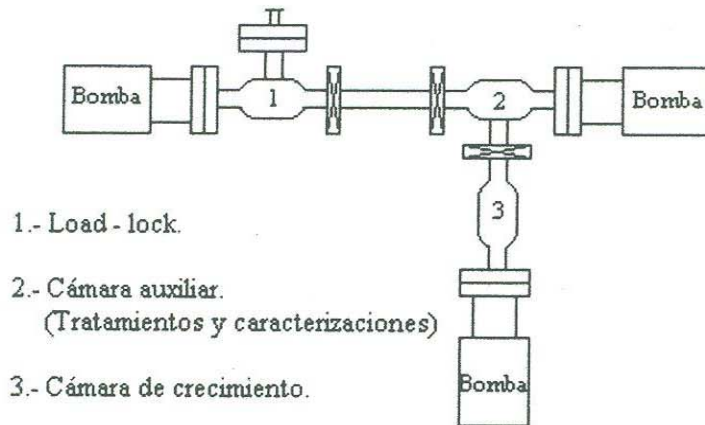


Fig 2.6 Esquema de las cámaras de un sistema de MBE.

La cámara auxiliar se utiliza para la preparación y almacenamiento de las muestras, en algunas ocasiones estas cámaras cuentan con equipo para realizar ciertas caracterizaciones en las muestras. Estas cámaras también funcionan como compartimentos de transición entre dos cámaras de crecimiento, cuando estas corresponden a distintos grupos de elementos. Una cámara de crecimiento y varios de sus componentes son mostrados en la Fig. 2.7. Sus principales componentes son: fuentes de haces moleculares, control de calentamiento, obturadores para controlar los haces, un medidor tipo Bayard-Alpert para calibrar la presión base de la cámara y los flujos moleculares, un cañón RHEED (del inglés: Reflection High Energy Electron Diffraction), una pantalla para observar el patrón de difracción de electrones así como monitorear la estructura superficial de la muestra y un espectrómetro cuadrupolar de masas, para monitorear las especies gaseosas residuales o las composiciones de los flujos de los haces moleculares.

Las muestras son montadas en el portamuestras de la cámara de crecimiento vía una barra magnéticamente acoplada. El portamuestras gira alrededor de dos ejes (ver Fig. 2.7). Antes del crecimiento, el portamuestras es acomodado de tal forma que la muestra quede justo enfrente de las fuentes del material. Para mejorar la uniformidad de las capas, el portamuestras está diseñado para una rotación azimutal continua de la muestra, mecanismo conocido como CAR (del inglés Continual Azimuthal Rotation). El CAR también cuenta con un contador de iones, colocado en el lado opuesto a la muestra, el cual puede leer la presión de la cámara o puede ser colocado de frente a las fuentes, para medir la presión de los haces de las fuentes del material.

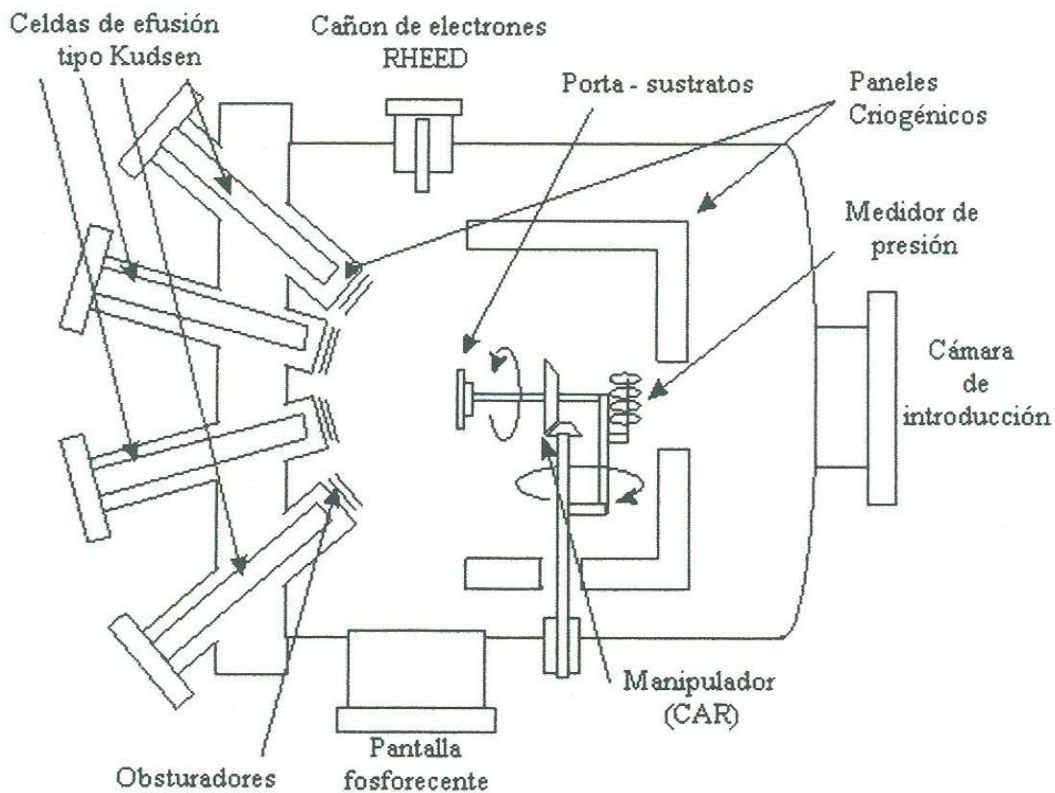


Fig. 2.7 Cámara de crecimiento típica de MBE.

Entre las paredes de la cámara y el CAR se localiza un crióstato de nitrógeno líquido y funciona como una excelente bomba de gases residuales en la cámara.

A través del portamuestras la muestra es calentada, las partes del portamuestras y algunas otras partes que son sometidas a calor, están hechas a base de Ta, Mo, y Nitrato de Boro Pirolítico (Pyrolytic Boron Nitride), que pueden ser calentados, sin despedir ninguna clase de impurezas gaseosas, hasta los 1400 °C.

Con el fin de monitorear gases residuales, analizar los haces y verificar las fugas, un espectrómetro cuadrupolar de masas es montado en las cercanías del CAR.

Las fuentes de material, llamadas celdas de efusión (o celdas tipo Knudsen), son calentadas independientemente hasta lograr un flujo del material deseado. Cambios en la temperatura, tan pequeños como 0.5°C pueden significar cambios en el flujo del orden del 1%. Para lograr un control del grosor de alrededor del 1%, se utilizan termopares de Tungsteno-Renium junto con paneles enfriados, que separan las celdas para evitar intercambios de calor. Las celdas son colocadas alrededor del sustrato cristalino calentado de tal manera que la uniformidad de la película en cuanto a grosor y composición quede garantizada. La rotación del sustrato favorece también el crecimiento de películas más uniformes.

Un control adicional en el proceso de crecimiento se ha logrado al poner obturadores mecánicos entre cada fuente y el sustrato. Tal como el nombre lo indica, el flujo de los componentes, desde la fuente hasta el sustrato, se da en la región de flujo molecular y no de flujo hidrodinámico, por lo tanto los haces pueden considerarse prácticamente como unidireccionales y sin interacción entre ellos.

Frente a las celdas de efusión se encuentran los obturadores controlados por computadora, facilitando que el flujo llegue a la muestra en cuestión de segundos. Dado que al abrir los obturadores, se presenta cierta presión en la celda, el flujo que se genera al abrirlos no es un flujo constante, causando trascierres de flujo de varios porcientos y con un tiempo constante de algunos minutos. Estos trascierres son difíciles de medir y dependen tanto de la celda como de factores específicos del sistema tales como el tipo de obturadores, su ubicación, el diseño del calentador, el lugar de los termopares, etc..

Todo el arreglo debe estar rodeado por criopaneles enfriados por nitrógeno líquido para minimizar la incorporación no intencional de impurezas de los gases residuales, tales como H_2O , CO , CO_2 , etc.

En síntesis las ventajas más generales del MBE pueden enumerarse como sigue:

- i) La velocidad de crecimiento en promedio es baja - aproximadamente $1\mu\text{m h}^{-1}$ (equivalente a una monocapa por segundo), esto permite cambios en la composición y el dopado del orden de dimensiones

- atómicas, determinadas por el tiempo de operación de la secuencia del obturador.
- ii) En comparación con las técnicas de crecimiento convencionales la temperatura de crecimiento es baja (para el GaAs = 550-650°C) por tanto el fenómeno de la interdifusión es mínimo.
 - iii) El ambiente de ultra-alto vacío permite una gran variedad de formas de análisis de superficie por lo que las propiedades químicas y estructurales de las capas epitaxiales pueden ser monitoreadas antes, durante y después del crecimiento.
 - iv) Es posible hacer depósitos secuenciales de diferentes materiales, por ejemplo pueden realizarse in-situ películas con metales y dieléctricos preservando la calidad química de las interfaces.
 - v) La automatización de todos los procesos ha permitido la utilización de este sistema en procesos de producción comercial de dispositivos.

De entre todos los detalles experimentales presentes en el crecimiento por MBE, dos se destacan por su importancia: la preparación del sustrato donde se crecerá la muestra y la estructura superficial de dicho sustrato.

Los procesos utilizados para la limpieza del sustrato son muy variados y van desde tratamientos químicos, sputtering de iones o desolvación de impurezas a altas temperaturas, entre otros; estos tratamientos se hacen tanto fuera (ex-situ) como dentro del sistema (in-situ).

Para los materiales III-V, el uso de obleas de GaAs prefabricadas como sustrato es lo más usual. Estas obleas son limpiadas y oxidadas en un ambiente controlado. La capa de óxido sirve como un recubrimiento protector que debe ser removido dentro de la cámara de crecimiento. El uso de estas obleas prefabricadas reduce el uso de procesos de limpieza del sustrato.

Para fabricar muestras de diferentes tamaños, las obleas son cortadas y adheridas con Indio, altamente puro, a bloques de Molibdeno.

En el caso de no utilizar estas obleas prefabricadas, los sustratos de GaAs, son generalmente pulidos mediante ataques químicos para posteriormente ser adheridos a bloques de Molibdeno, antes de ser introducidos a la cámara de crecimiento^[14]

Posteriormente a que el sustrato ya ha sido montado en el portamuestras, es introducido a la primera cámara, es calentado por varias horas para eliminar algunos contaminantes volátiles y/o residuos de agua, de ahí es trasladado a la cámara auxiliar, donde de nueva cuenta es sometido a temperaturas de 400°C aproximadamente para desasolvarlo. Por último es llevado a la cámara de crecimiento.

Una vez ahí, el sustrato es calentado a temperaturas alrededor de 600-650°C mientras que se le hace incidir un flujo de As, hasta que un patrón de difracción comienza a ser percibido, mostrando que no hay rastro de óxido sobre la superficie.

Previo al proceso de crecimiento, deben prepararse las fuentes y tratar de reducir la presencia de gases residuales en la cámara. Análogamente a la preparación del sustrato, elevaciones de temperatura son utilizadas para este fin, y toda vez que los materiales primarios han sido colocados en las celdas, se procede a la calibración de la velocidad de crecimiento.

No existe una forma precisa de realizar esta medida, por lo que se combinan técnicas in-situ y ex-situ, como la técnica de BEP (del inglés Beam Equivalent Pressure) y la espectroscopía de masas de iones secundarios.

Ya realizados todos estos procedimientos, se da inicio al crecimiento de las muestras.

Es de primordial importancia, saber la calidad que se está alcanzando en las muestras durante el crecimiento y es mediante la técnica de monitoreo in-situ de reflexión de electrones altamente energéticos que es posible llevar un control durante todo el proceso.

Con RHEED se puede calibrar la velocidad de crecimiento, observar óxidos en la superficie, calibrar la temperatura del sustrato, monitorear el acomodo de los átomos, determinar el flujo de As apropiado, conocer la morfología de la superficie, además de proporcionar información acerca de la cinética de crecimiento.

En la Fig. 2.7 se ha incluido el arreglo experimental de RHEED. Esta técnica consta de un cañón que emite electrones de $\sim 10\text{eV}$, los cuales inciden sobre la superficie



Fig. 2.9 Imagen RHEED de la reconstrucción $c(2 \times 4)$ del GaAs

En el caso de no utilizar estas obleas prefabricadas, los sustratos de GaAs, son generalmente pulidos mediante ataques químicos para posteriormente ser adheridos a bloques de Molibdeno, antes de ser introducidos a la cámara de crecimiento^[14]

Posteriormente a que el sustrato ya ha sido montado en el portamuestras, es introducido a la primera cámara, es calentado por varias horas para eliminar algunos contaminantes volátiles y/o residuos de agua, de ahí es trasladado a la cámara auxiliar, donde de nueva cuenta es sometido a temperaturas de 400°C aproximadamente para desasolvarlo. Por último es llevado a la cámara de crecimiento.

Una vez ahí, el sustrato es calentado a temperaturas alrededor de 600-650°C mientras que se le hace incidir un flujo de As, hasta que un patrón de difracción comienza a ser percibido, mostrando que no hay rastro de óxido sobre la superficie.

Previo al proceso de crecimiento, deben prepararse las fuentes y tratar de reducir la presencia de gases residuales en la cámara. Análogamente a la preparación del sustrato, elevaciones de temperatura son utilizadas para este fin, y toda vez que los materiales primarios han sido colocados en las celdas, se procede a la calibración de la velocidad de crecimiento.

No existe una forma precisa de realizar esta medida, por lo que se combinan técnicas in-situ y ex- situ, como la técnica de BEP (del inglés Beam Equivalent Pressure) y la espectroscopía de masas de iones secundarios.

Ya realizados todos estos procedimientos, se da inicio al crecimiento de las muestras.

Es de primordial importancia, saber la calidad que se está alcanzando en las muestras durante el crecimiento y es mediante la técnica de monitoreo in-situ de reflexión de electrones altamente energéticos que es posible llevar un control durante todo el proceso.

Con RHEED se puede calibrar la velocidad de crecimiento, observar óxidos en la superficie, calibrar la temperatura del sustrato, monitorear el acomodo de los átomos, determinar el flujo de As apropiado, conocer la morfología de la superficie, además de proporcionar información acerca de la cinética de crecimiento.

En la Fig. 2.7 se ha incluido el arreglo experimental de RHEED. Esta técnica consta de un cañón que emite electrones de ~10eV, los cuales inciden sobre la superficie

La estructura cristalina del material sustrato, cambia el crecimiento de manera que la periodicidad normal a la superficie y es justo en esta donde dicha periodicidad se rompe debido a los efectos de superficie, produciéndose pequeños desplazamientos o desplazamientos "reconstructivos".

de la muestra a ángulos rasantes ($\sim 0.5-2$ grados). Los electrones son reflejados por la superficie y golpean una pantalla de fósforo formando un patrón compuesto por la reflexión especular y el patrón de difracción, permitiendo tener conocimiento de la estructura cristalográfica de la superficie. Una cámara monitorea la pantalla constantemente y es posible obtener imágenes instantáneas o mediciones de intensidad como función del tiempo (Fig. 2.8). Esto permite que con RHEED se lleve un mejor control en el crecimiento por MBE.

Las superficies más estudiadas del GaAs son las (001) y la (111). Estas superficies pueden terminar con un exceso de átomos de As o de Ga, dependiendo de las condiciones de crecimiento y de los tratamientos posteriores.

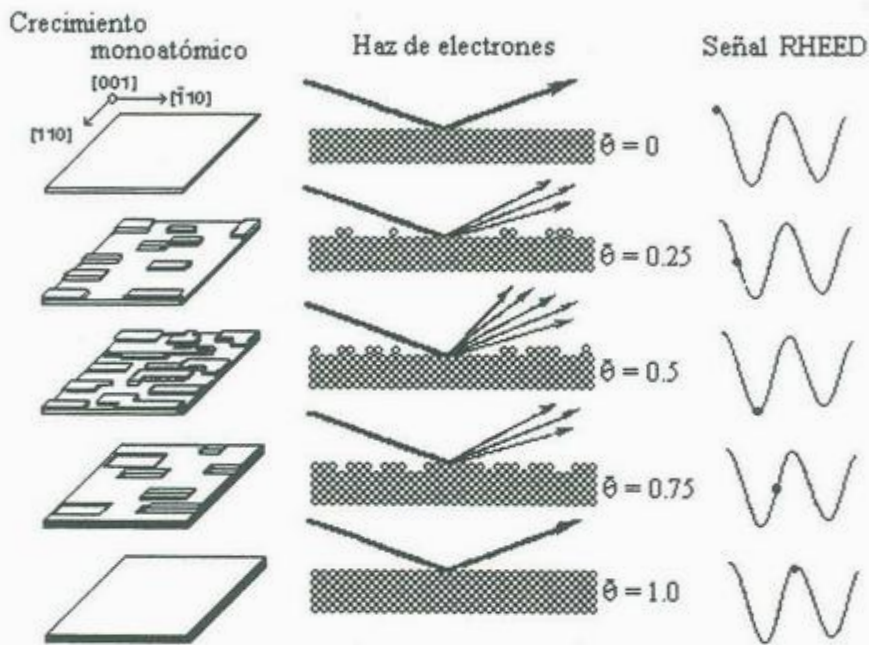


Fig. 2.8 Diagrama del análisis de superficie mediante RHEED.

2.3.1 Reconstrucciones superficiales

La estructura de la superficie presenta un reacomodo de los átomos con respecto a la estructura cristalina del material restante; durante el crecimiento se mantiene una periodicidad normal a la superficie y es justo en esta donde dicha periodicidad se rompe debido a los efectos de superficie, produciéndose pequeños desplazamientos o desplazamientos "reconstructivos".

Existen muchas posibles reconstrucciones para la superficie y se denotan mediante la convención establecida por E. Wood^[15]. Cuando a una superficie se le denota como GaAs(klm)-(MxN), implica que el cristal de GaAs esta orientado en la dirección [klm] normal a la superficie y tiene una estructura superficial debido a su reconstrucción, con una periodicidad en su malla unitaria M x N veces más grande que la del material debajo de ella.

A temperaturas típicas de crecimiento, la capa (100) de GaAs con un exceso de átomos de As se reacomoda en las llamadas reconstrucciones (2x4) o c(4x4). En las Figs 2.9 y 2.10 se muestran imágenes RHEED de estas reconstrucciones.

Las imágenes de RHEED corresponden a la dirección [011] y a la $[01\bar{1}]$. Además de las líneas primarias correspondientes al espaciamiento de los átomos en el bulto, en la reconstrucción (2x4), es posible ver, una línea adicional colocada a $\frac{1}{2}$ de las líneas primarias en la dirección [011] y otras espaciadas a $\frac{1}{4}$ de las líneas primarias en la dirección $[01\bar{1}]$; análogamente para la reconstrucción c(4x4), aparecen líneas adicionales colocadas a $\frac{1}{4}$ del espaciamiento de las líneas primarias en ambas direcciones.

Del aspecto de los patrones de difracción RHEED se pueden inferir cualidades de la morfología cristalina. Si la superficie es suave, entonces se observará un patrón rayado. Si la superficie es rugosa, entonces las franjas horizontales se verán punteadas y el patrón no será muy claro

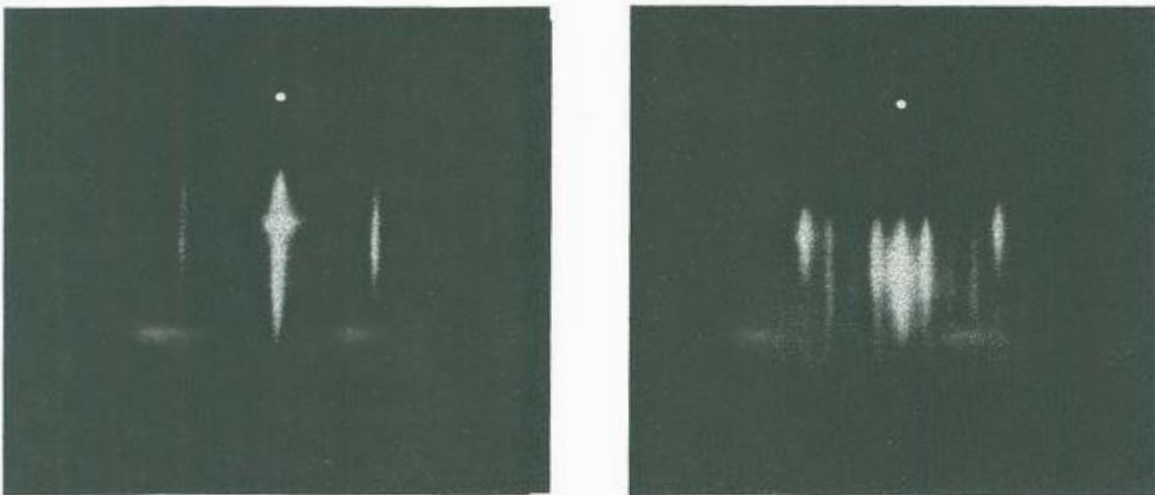


Fig. 2.9 Imagen RHEED de la reconstrucción c(2x4) del GaAs

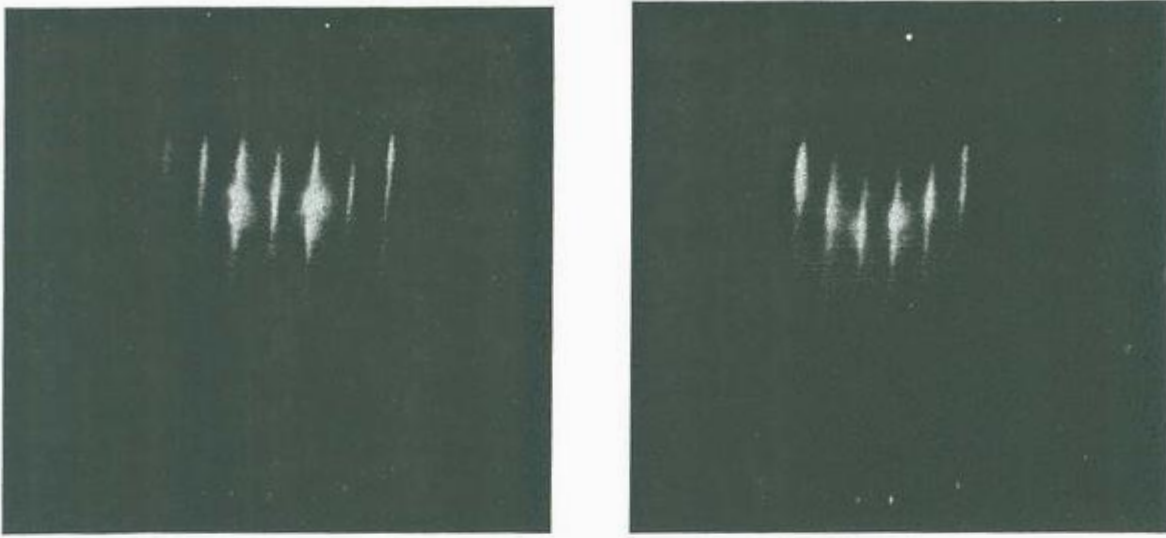


Fig. 2.10 Imagen RHEED de la reconstrucción $c(4 \times 4)$ del GaAs

En el caso de superficies amorfas, como la de una capa de óxido, se observa un patrón nublado y si fuese una superficie policristalina, se observarían anillos rodeando el haz. Esta información, aunque cualitativa, es una poderosa herramienta para verificar la condición de la superficie.

2.4 Fotoluminiscencia

Las energías de la brecha prohibida en mayoría de los semiconductores varían en un rango de 0 a 3 eV. Fotones con la suficiente energía pueden excitar electrones desde bandas de valencia llenas hasta vacías bandas de conducción. En muchos semiconductores los fotones pueden interactuar con las vibraciones de la red o con electrones localizados en defectos, como resultado se tiene que el espectro óptico de los semiconductores es una fuente de información de sus propiedades eléctricas y puede también estudiarse ciertas excitaciones. Las propiedades ópticas son la base de las más importantes aplicaciones de los semiconductores, tal es el caso del láser, los diodos emisores de luz, los fotodetectores, etc.

En la superficie de un material, una fracción de la luz incidente es reflejada y el resto es transmitida. Dentro del material algo de radiación puede ser absorbida o dispersada mientras que el resto pasa a través de la muestra. Algunas de las ondas

electromagnéticas absorbidas se disipan mediante calor o son reemitidas con una frecuencia distinta. A este último proceso se le conoce como Fotoluminiscencia^[16].

Podemos decir que la fotoluminiscencia es la radiación óptica emitida por un sistema físico, como resultado de una excitación mediante radiación de luz, en particular estudia las diversas vías de recombinación de los pares electrón-hueco fotoexcitados.

La fotoluminiscencia es una técnica de caracterización no destructiva utilizada para estudiar propiedades intrínsecas y extrínsecas de los semiconductores; mediante el análisis del espectro de fotoluminiscencia en función de diversos parámetros (temperatura, energía de excitación, campos externos, etc) puede obtenerse información general sobre la calidad del material. Por ejemplo, se puede obtener información en función de los parámetros de crecimiento, o bien, provee indicadores de defectos producidos con los procesamientos típicos o tratamientos post-crecimiento de un material.

Entre las ventajas de esta técnica podemos mencionar:

- i) Es una técnica no destructiva y requiere solo pequeñas cantidades del material a estudiar
- ii) Provee información sobre los portadores, principalmente de los portadores minoritarios, por lo que es un complemento de técnicas de caracterizaciones eléctricas.
- iii) Es una técnica sencilla que no necesita de preparaciones o manipulaciones especiales a las muestras, además de que el arreglo experimental puede ser tan complicado como se requiera y suele ser de bajo costo.
- iv) Es sensible a la presencia de impurezas, las cuales pueden ser detectadas aún a bajas concentraciones.
- v) Da información con resolución energética.

Algunas de sus desventajas son:

- i) No proporciona información sobre procesos no radiativos de manera directa.
- ii) Es muy complicado obtener información cuantitativa sobre la densidad de dopaje o de la concentración de centros de recombinación.

En un experimento de fotoluminiscencia, los pares electrón-hueco (e-h) son excitados mediante la absorción de luz. Los pares e-h se relajan y difunden a una distribución de equilibrio mientras que se disocian a través de recombinaciones radiativas y no radiativas. El estudio de la dependencia de la energía con el número de fotones emitidos a través de transiciones radiativas es la esencia de la fotoluminiscencia.

Tres procesos distintos pueden distinguirse en fotoluminiscencia:

- i) La excitación del par e-h: la absorción del fotón se debe a la excitación de un electrón de la banda de valencia a la banda de conducción. Los estados iniciales y finales dependen de la energía de excitación. Estas transiciones se pueden dar para diferentes bandas de valencia y conducción. En este trabajo centraremos nuestra atención en las bandas Γ_6 (banda de conducción principal) y Γ_8 (banda de valencia principal), se tiene que la banda de valencia presenta un desdoblamiento, en la banda de los huecos pesados y la banda de los huecos ligeros (catalogadas así por la masa efectiva que presentan los huecos), por lo que los electrones pueden ser excitados desde cualquiera de ambas bandas (Fig. 2.5)
- ii) Termalización y difusión de los pares e-h: usualmente la energía de excitación es mayor que la energía de la brecha prohibida por lo que los pares e-h presentan un exceso de energía cinética por arriba de la energía térmica de la red. Los portadores fotoexcitados tienden a alcanzar un equilibrio térmico con la red (termalización) y consecuentemente se relajan a los límites de las bandas. Durante la termalización los portadores se mueven dentro de la muestra (difusión) y su exceso de energía lo pierden por etapas. Los mecanismos para alcanzar un equilibrio térmico, compiten con los procesos radiativos de la recombinación de pares e-h.
- iii) Recombinación de pares e-h: una vez que se ha logrado promover un electrón a la banda de conducción, el electrón tiende a alcanzar nuevamente su posición de equilibrio, regresando a la banda de valencia y recombinándose así con un hueco. Para ello, es necesario que libere la cantidad de energía, que le permita el brinco de banda a banda. Existen diversas formas para liberar

esta energía, una de ellas es mediante un fotón, proceso conocido como recombinación radiativa. Conjuntamente con la recombinación radiativa, otros procesos permiten el decaimiento de los portadores.

En la Fig 2.11 se muestran esquemáticamente, los procesos que pueden presentarse.

La emisión dominante es debida a la excitación entre bandas (Fig 2.11a) y existen emisiones excitónicas que pueden ser por excitones libres^[A2] o por excitones ligados (Fig 2.11b). Para semiconductores de banda indirecta todas los procesos de interacción interbanda van acompañadas de la emisión de fonones (Fig. 2.11c), en general estas transiciones indirectas son mucho más débiles que las transiciones directas.

Otras transiciones posibles son en las que interfieren las impurezas, la figura d representa una transición de una impureza donadora a la banda de valencia ($D \rightarrow BV$), el proceso e corresponde a una transición de la banda de conducción a una impureza aceptora ($BC \rightarrow A$) y por último una transición donador-aceptor ($D \rightarrow A$)

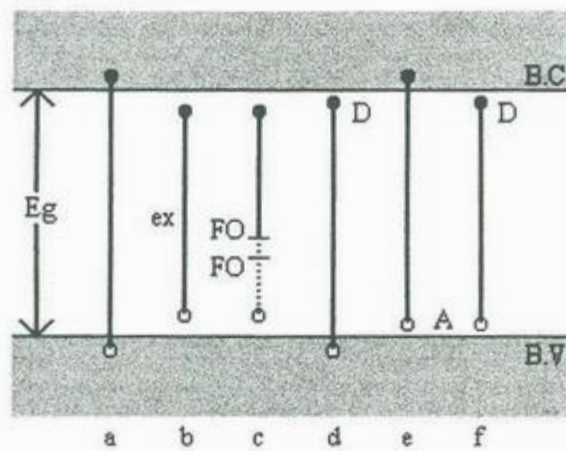


Fig. 2.11 Diversos procesos de fotoluminiscencia.

3

Desarrollo Teórico

3.1 Pozos cuánticos

Avances en las técnicas de crecimiento y procesamiento de semiconductores han brindado la posibilidad de fabricar estructuras con dimensiones en la dirección de crecimiento (dirección vertical) comparables con el parámetro de la constante de red y en la dirección lateral de hasta 10 nm. Estructuras semiconductoras de multicapas pueden ser creadas rutinariamente con dimensiones de 1 nm y con interfaces planas del orden de una monocapa; en la dirección lateral, técnicas de ataque químico y litografiado permiten definir estructuras menores a los 100 nm, y modernas formas de crecimiento logran la fabricación de estructuras con un décimo de este tamaño.

Estas estructuras confinan el movimiento de los portadores en una o más dimensiones, logrando comportamientos bidimensionales, unidimensionales y adimensionales.

De entre las estructuras más sofisticadas, podemos mencionar al sistema compuesto por GaAs y AlGaAs, cuyo estudio –tanto en formas de crecimiento y procesamiento– es uno de los más completos actualmente.

Las técnicas de caracterización óptica han probado ser un método eficaz en el estudio de las propiedades básicas de estas estructuras y han motivado estudios encaminados al desarrollo de dispositivos ópticos de varios tipos.

Cuando la escala característica de confinamiento es comparable con la longitud de onda de de Broglie de los portadores, los efectos cuánticos se vuelven importantes, los estados electrónicos se ven severamente modificados y ciertos fenómenos interesantes empiezan a manifestarse.

Muchas de las propiedades y de los fenómenos básicos de estos sistemas puede deducirse de modelos teóricos relativamente sencillos, en particular mediante la aproximación de la masa efectiva y la aproximación la función envolvente^[A1].

Es muy usual la representación de una interfaz ideal en términos de bandas que dependen continuamente de la posición (Fig. 3.1). Básicamente lo que se asume es que para $z > 0$ (ver Fig.3.1), el electrón experimenta un potencial de electrón independiente idéntico al potencial de bulto del material A, mientras que para $z < 0$, experimentará un potencial de electrón independiente igual al del bulto del material B. Esta idealización es muy aproximada, siempre que se tenga en cuenta que esta descripción no considera los estados electrónicos originados por los efectos de superficie entre los materiales, es decir no considera la mezcla de enlaces que se produce al pasar de un material a otro. Por otro lado, considera también un crecimiento bi-dimensional perfecto, como si el crecimiento se diera monocapa tras monocapa. Este crecimiento bi-dimensional ideal, en la práctica es inalcanzable por lo que la ubicación de la interfaz a lo largo de z varía en el plano ortogonal al crecimiento, se considera entonces que la interfaz posee un grosor finito, para poder tomar en cuenta estos efectos. Afortunadamente, la mayoría de los estados electrónicos interfaciales presentan una amplitud de probabilidad muy pequeña y por lo tanto es posible hacer las consideraciones anteriores, sin mayor problema.

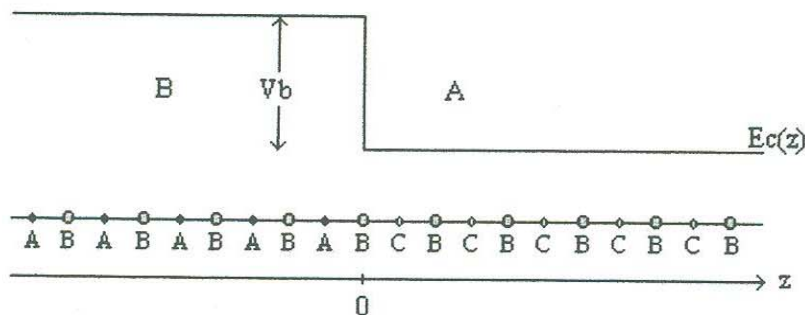


Fig. 3.1 Representación uni-dimensional de una heterounión formada entre dos semiconductores A y B, con constantes de red idealmente acopladas. En la parte de arriba se muestra la dependencia con la posición de la banda de conducción. En la parte de abajo los enlaces. Nótese la formación del enlace híbrido A-B-C en la interfaz.

Teniendo lo anterior en cuenta, al momento de crecer una capa de un material A sobre una capa de otro material semiconductor B, la estructura de bandas de los materiales no se ve modificada significativamente, por lo tanto es posible pensar que si el material B posee una brecha prohibida mayor que el material A, se producirá un salto en la brecha

prohibida al pasar de un material a otro (Fig. 3.2b). Las estructuras de pozos cuánticos se forman al crecer un “sándwich” de materiales semiconductores con interfaces muy abruptas y brechas prohibidas de diferente magnitud. Al crecer esta estructura de tres capas (B/A/B), los perfiles de las bandas se alinean de tal manera que tanto para la banda de conducción, como para la banda de valencia se presentan dos saltos, si el espesor del material A es lo suficientemente pequeño, los portadores de carga comienzan a sentir efectos de confinamiento (Fig. 3.2c).

El modelo teórico utilizado para describir estos potenciales a primera aproximación es mediante el potencial de pozo cuadrado finito, por lo tanto se considera que se forma un pozo para los electrones en la banda de conducción y otro para los huecos en la banda de valencia.

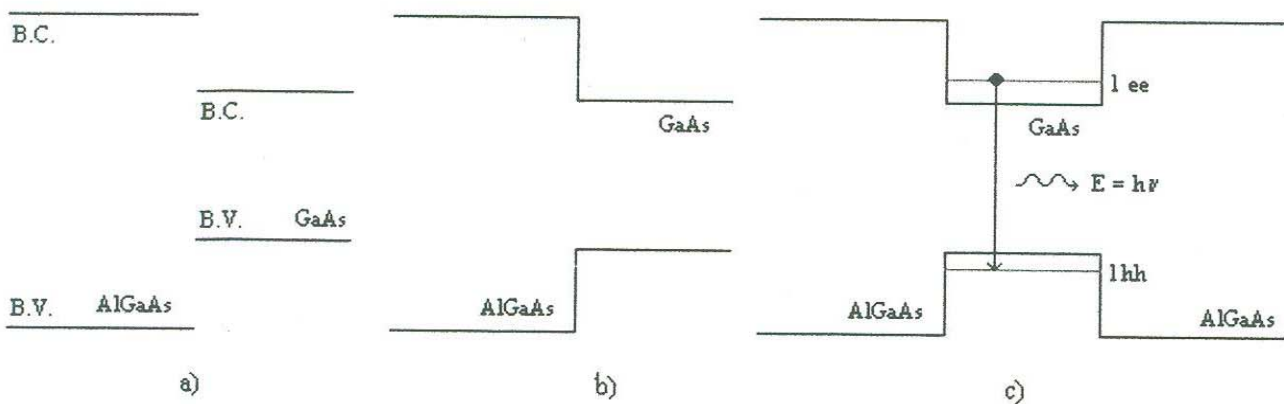


Fig. 3.2 Representación de la alineación de bandas en la formación de un pozo cuántico.

Existen dos perfiles posibles de alineación de las bandas. Se le llama alineación del tipo I para la que tanto en la banda de conducción, como en la banda de valencia, el salto de banda produce un pozo. Se considera alineación del tipo II, cuando para los electrones se tiene un potencial de pozo cuadrado y para los huecos el potencial es de barrera.

3.1.1 Teoría.

La característica más importante de un potencial del tipo de pozo cuadrado es su capacidad para ligar una partícula a una región limitada del espacio, es decir de confinar su movimiento.

El potencial está dado en la ecuación 3.1 y se muestra en la Fig. 3.3:

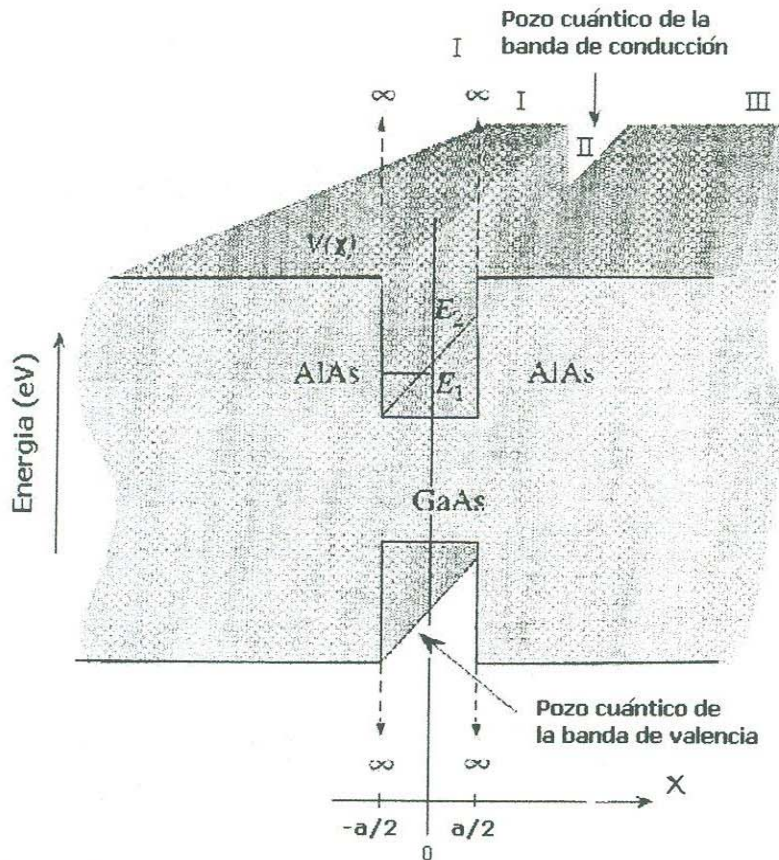


Fig. 3.3 Potencial de pozo cuántico.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & x < -a/2 \text{ ó } x > a/2 \\ 0 & -a/2 < x < a/2 \end{cases} \quad (3.1)$$

Para realizar un estudio del problema del pozo cuadrado perfecto, consideremos las diferentes regiones del potencial por separado.

En el caso de un pozo formado por dos materiales se tiene que para cada material el portador posee una masa efectiva diferente; para el AlGaAs denotaremos la masa efectiva como m_I , para el GaAs la masa efectiva se denota por m_{II} . Considerando este cambio en la masa de los portadores, la ecuación de Schrödinger correspondiente resulta ser:

a) Para la región I, ($x < -a/2$):

$$-\frac{\hbar}{2m_I} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \quad (3.2)$$

cuya solución general para $E < V_0$ es:

$$\psi = Ae^{-\beta x} + Be^{\beta x}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2m_I(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (3.3)$$

Para que la función de onda cumpla con el requisito de ser finita en $x = -\infty$, se tiene que $A = 0$.

b) Para la región II ($-a/2 < x < a/2$):

$$-\frac{\hbar}{2m_{II}} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad (3.4)$$

en este caso se tiene que la solución general viene dada por:

$$\psi = C \cos(\alpha x) + D \sin(\alpha x), \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \quad (3.5)$$

c) Por último para la región III, (donde $m_I = m_{III}$):

$$-\frac{\hbar}{2m_I} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi \quad (3.8)$$

y análogamente a la región I la solución viene dada por:

$$\psi = Ee^{-\beta x} + Fe^{\beta x}, \quad \beta = \sqrt{\frac{2m_I(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (3.9)$$

aplicando la condición de frontera para $x = \infty$, se tiene que F debe ser cero.

De aquí que la solución general para el estado ligado $E < V_0$, es de la forma:

$$\psi = \begin{cases} Be^{\beta x} & x < -a/2 \\ C \cos(\alpha x) + D \sin(\alpha x) & -a/2 < x < a/2 \\ Ee^{-\beta x} & x > a/2 \end{cases} \quad (3.10a)$$

con:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \quad \beta = \sqrt{\frac{2m_I(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (3.10b)$$

Si aplicamos ahora la condición de continuidad para ψ y $\frac{1}{m_{I,II}} \frac{d\psi}{dx}$ en $x = \pm a/2$, tenemos que:

$$C \cos \alpha a/2 - D \sin \alpha a/2 = B e^{-\beta a/2} \quad (3.11a)$$

$$\alpha C \sin \alpha a/2 + \alpha D \cos \alpha a/2 = Q \beta B e^{-\beta a/2} \quad (3.11b)$$

donde $Q = m_{II}/m_I$

$$C \cos \alpha a/2 + D \sin \alpha a/2 = E e^{-\beta a/2} \quad (3.12a)$$

$$-\alpha B \sin \alpha a/2 + \alpha D \cos \alpha a/2 = -Q \beta E e^{-\beta a/2} \quad (3.12b)$$

De estas ecuaciones obtenemos que:

$$2C \cos \alpha a/2 = (B + E) e^{-\beta a/2} \quad (3.13a)$$

$$2\alpha C \sin \alpha a/2 = Q\beta(B + E) e^{-\beta a/2} \quad (3.13b)$$

y
$$2D \sin \alpha a/2 = (E - B) e^{-\beta a/2} \quad (3.14a)$$

$$2\alpha D \cos \alpha a/2 = -Q\beta(E - B) e^{-\beta a/2} \quad (3.14b)$$

El primer par de ecuaciones corresponden a los estados con paridad par, ie, $B=E$, mientras que el segundo corresponde a estados con paridad impar, $E=-B$. Estos pares de ecuaciones nos dan separadas condiciones para las soluciones, y se encuentran al dividir una ecuación en la otra, por lo que las ecuaciones trascendentales para las condiciones de los valores permitidos de energía son:

$$\tan \alpha a/2 = Q\beta \quad (3.15)$$

$$\alpha \cot \alpha \frac{a}{2} = -Q\beta \quad (3.16)$$

3.1.2 Pozos de AlGaAs/GaAs/AlGaAs.

Una de las principales razones para considerar la formación de pozos cuánticos de GaAs/ Al_xGa_{1-x}As es la similitud de constante de red que presentan dichos materiales. Esta similitud hace posible que se pueda considerar el modelo de interfaces abruptas mostrado en la fig. 3.1. La heteroestructura formada por Al_xGa_{1-x}As /GaAs/ Al_xGa_{1-x}As tiene una alineación de bandas tipo I..

Las discontinuidades de la energía para la BC y la BV están dadas como:

$$\Delta E_c = 0.65 \Delta E_g = 0.65 (E_g^{AlGaAs} - E_g^{GaAs}) \quad (3.17)$$

$$\Delta E_v = 0.35 \Delta E_g = 0.35 (E_g^{AlGaAs} - E_g^{GaAs}) \quad (3.18)$$

Para poder interpretar los espectros de fotoluminiscencia es necesario resolver la ecuación de Schödinger, tanto para los electrones como para los huecos pues la energía de emisión de un pozo viene dada como:

$$E_{Fl} = E_g + E_{1e} + E_{1hh} - E_x \quad (3.19)$$

donde:

E_g = Valor de la brecha prohibida.

E_{1e} = Valor del primer nivel del pozo de la banda de conducción.

E_{1hh} = Valor del primer nivel del pozo de la banda de valencia.

E_x = Energía del excitón ^[A2]

A primera aproximación, la energía de enlace del excitón no se toma en cuenta por ser del orden del 1% de E_g .

Hay que considerar que en cada material la masa efectiva de los portadores (huecos o electrones) depende de la estructura de bandas y por lo tanto es distinta para cada uno. En este caso como se trata de dos materiales de banda prohibida directa, se toma el valor de la masa efectiva en el mínimo absoluto localizado en Γ , además en este punto la banda

presenta un desdoblamiento, por esta razón se diferencia según su masa a los huecos en huecos pesado (hh) y huecos ligeros (lh), de modo que:

Para el GaAs (m_{II})^[17]:

$$m_e = (0.06650 \pm 0.00005) m_0 \quad m_{hh} = (0.51 \pm 0.02) m_0 \quad m_{lh} = (0.082 \pm 0.004) m_0$$

Para el $Al_xGa_{1-x}As$ (m_I)^[17]:

$$m_e = (0.06650 + 0.0835x) m_0 \quad m_{hh} = (0.51 \pm 0.20x) m_0 \quad m_{lh} = (0.082 \pm 0.078x) m_0$$

donde m_0 corresponde a la masa del electrón en reposo.

3.2 Rugosidad en las interfaces.

MBE es comúnmente utilizado para la fabricación de estructuras electrónicas y ópticas de GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ de alta calidad, pues ofrece un control muy preciso de el grosor, dopado y composición en un rango de distancias macroscópicas. Sin embargo la estructura microscópica de las interfaces de GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ continúa estando bajo un intenso estudio.

Interrupciones de crecimiento en estas interfaces cambian considerablemente las características estructurales^[18] Estos cambios pueden ser inferidos a partir de los espectros de fotoluminiscencia.

Se ha reportado en múltiples ocasiones que el desorden topológico de las interfaces produce efectos ópticos considerables y que los métodos ópticos constituyen una herramienta para caracterizar este desorden. La influencia de la configuración interfacial en los espectros ópticos se explica a partir de 4 modelos sencillos de estas interfaces.

Un pozo cuántico perfecto es aquel con interfaces atómicamente abruptas y lisas formadas por regiones cuyo grosor es de un número exacto de monocapas. Se define como una interfaz abrupta entre dos materiales A y B, si después de terminado el crecimiento epitaxial de A, el nuevo material depositado B no perturba la configuración atómica superficial anterior (i.e. no se mezclan). Se tiene entonces que la superficie de A y la interfaz son idénticas y la transición entre A y B ocurre en una capa atómica sobre columnas atómicas normales a la interfaz. Ahora bien, se dice que la interfaz entre A y B es atómicamente lisa en una escala X si la interfaz es abrupta y la superficie de A presenta islas sin escalones de extensión mayor a una distancia X.

Antes de discutir las configuraciones interfaciales, hay que tomar en cuenta el tamaño de la “sonda óptica” de las medidas de Fotoluminiscencia (FL). Dado que en un pozo cuántico semiconductor la naturaleza radiativa de la recombinación es de naturaleza excitónica, se utiliza el modelo hidrogenoide de Bohr para calcular el radio de los excitones^[A2] en los pozos, lo que se considera como la resolución lateral de la sonda óptica.

El radio de Bohr para el excitón tridimensional está dado como:

$$r_{exciton}^{3D} = \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_0} \frac{m_0}{m_r^*} \right) 0.53 \text{ \AA} \quad (3.20)$$

donde:

ϵ es la permitividad del GaAs

m_r^* es la masa reducida del par electrón – hueco pesado

Considerando $\epsilon/\epsilon_0 = 11.5$ (altas frecuencias) y $m_r^* = 0.051 m_0$, se tiene que $r_{exc}^{3D} \approx 120 \text{ \AA}$. Dado que el grosor de los pozos cuánticos se encuentran dentro del rango de 50 – 100 Å las medidas de fotoluminiscencia serán muy sensibles a la rugosidad en esta escala.

Teniendo esto en cuenta, podemos definir como una interfaz completamente lisa a aquella cuyas islas tengan una extensión lateral mucho mayor que el diámetro excitónico.

En este caso el espectro de FL presentará líneas de luminiscencia separadas con energías correspondientes a la emisión de los pozos cuánticos con grosores de un número entero de monocapas de GaAs. (Fig. 3.4 a). Se espera que en un espectro típico de FL se presenten líneas de emisión con cierta estructura, y dado que a la distribución estadística de las variaciones de los pozos se le ha relacionado la distribución gaussiana^[18], la estructura que se presenta deberá semejar funciones gaussianas.

Cuando la extensión lateral de las islas es del orden del diámetro excitónico sólo se tendrá una línea gruesa, inhomogénea; la anchura de esta línea está relacionada con la variación del grosor presente en los pozos. (Fig. 3.4 b)

Otra configuración posible es donde una de las interfaces puede considerarse lisa y la otra posee una microrugosidad, es decir, la extensión lateral de las islas es mucho más pequeña que el radio del excitón, de modo que esta microrugosidad será detectada como si la superficie fuera relativamente lisa, por lo tanto el espectro de FL muestra líneas de

luminiscencia definida, sólo que en este caso no corresponderán a pozos con grosores de múltiplos de monocapa, aunque en el espectro la separación entre estos sí sea de un número definido de monocapas.

Por último se tiene el caso en el que ambas interfaces presentan microrugosidad, de nueva cuenta se obtendrán picos definidos, pero en este caso no presentarán una separación definida, ni podrán correlacionarse a pozos cuánticos.

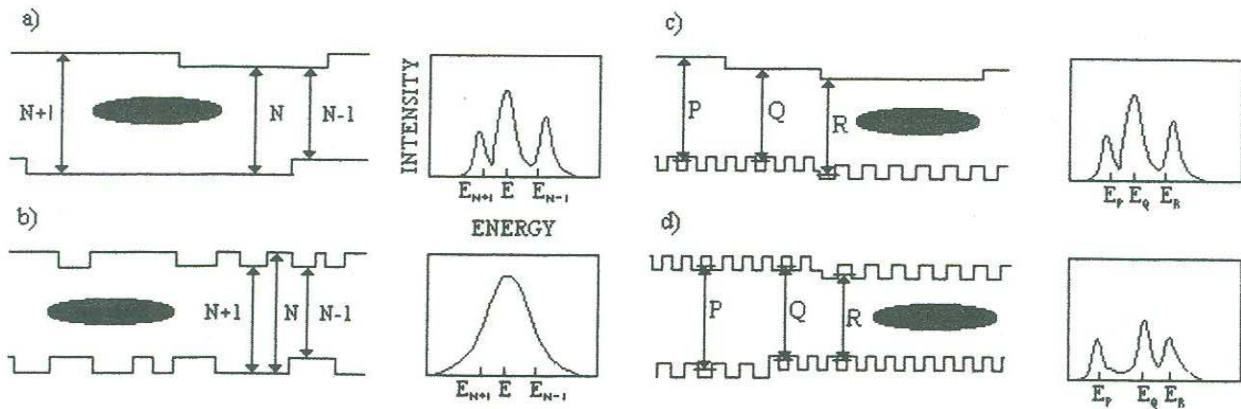


Fig. 3.4 Modelos utilizados para estudiar la rugosidad en las interfaces.

Entendiendo a la rugosidad, como la variación del grosor del pozo debido a interfaces no homogéneas, podemos estimarla en función de su relación con la energía de Fotoluminiscencia (ecuación 3.19) como:

$$\Delta E = \left[\left(\frac{dE_{1e}}{dL} \right) + \left(\frac{dE_{1hh}}{dL} \right) \right] \Delta L \quad (3.21)$$

donde E_{1e} es el primer nivel del pozo de la banda de conducción y E_{1hh} corresponde al primer nivel del pozo de la banda de valencia.

A partir de la ecuación de la energía obtenida para un pozo cuadrado finito con un ancho de L

$$\alpha \tan \alpha \frac{L}{2} = Q\beta \quad (3.15)$$

con:

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \quad \beta = \sqrt{\frac{2m_I(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

o bien:

$$\sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \tan \sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \frac{L}{2} = \sqrt{\frac{2m_I^2(V_0 - E)}{m_I \hbar^2}} \quad (3.15a)$$

derivando con respecto a L y dado que $E = E(L)$, resulta que:

$$\frac{d}{dE} \left(\sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \tan \sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \frac{L}{2} \right) \frac{dE}{dL} + \frac{d}{dL} \left(\sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \tan \sqrt{\frac{2m_{II}E}{\hbar^2}} \frac{L}{2} \right) =$$

$$\frac{d}{dE} \left(\sqrt{\frac{2m_{II}^2(V_0 - E)}{m_I \hbar^2}} \right) \frac{dE}{dL} + \frac{d}{dL} \left(\sqrt{\frac{2m_{II}^2(V_0 - E)}{m_I \hbar^2}} \right) \quad (3.22)$$

haciendo el desarrollo correspondiente se tiene:

$$\Delta E = \left[\left(\frac{dE_{1e}}{dL} \right) + \left(\frac{dE_{1hh}}{dL} \right) \right] \Delta L \quad (3.21)$$

donde:

$$\left(\frac{dE_{1e}}{dL} \right) = \frac{E_{1e}}{\frac{L}{2} + \text{Cos}^2 \left(\sqrt{\frac{2m_e^{II}}{\hbar^2}} E_{1e} \frac{L}{2} \right) \frac{\hbar \Delta E_c}{E_{1e} \sqrt{2m_e^I (\Delta E_c - E_{1e})}}} \quad (3.23)$$

$$\left(\frac{dE_{1hh}}{dL} \right) = \frac{E_{1hh}}{\frac{L}{2} + \text{Cos}^2 \left(\sqrt{\frac{2m_{hh}^{II}}{\hbar^2}} E_{1hh} \frac{L}{2} \right) \frac{\hbar \Delta E_c}{E_{1hh} \sqrt{2m_{hh}^I (\Delta E_c - E_{1hh})}}} \quad (3.24)$$

4

Detalles experimentales

4.1 Fabricación de muestras

Se estudiaron 5 muestras crecidas por MBE, las cuales consisten en tres pozos cuánticos (PC) de GaAs/AlGaAs con anchos nominales de 25, 45 y 60 Å. Una representación esquemática de las muestras se presenta en la Fig. 4.1. Los PC fueron crecidos sobre sustratos de GaAs con la orientación (100), con el sustrato precalentado a una temperatura de 600°C.

La secuencia de crecimiento fue la siguiente:

1. Se creció una capa de 5000Å para suavizar los defectos del sustrato de GaAs.
2. Se continuó con el crecimiento de la capa colchón de GaAs con diferentes espesores d para las distintas muestras.
3. Se realizó un receso en el crecimiento. Las interrupciones se realizaron a ultra-alto vacío (UAV) para dos de las muestras y otras fueron expuestas al aire durante esta interrupción del crecimiento.
4. Se prosiguió con el crecimiento de los pozos cuánticos 1, 2, 3 con anchos de 60, 45 y 25 Å, separados con barreras de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ con 400Å de espesor, respectivamente.
5. Para finalizar se creció una última barrera de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, con un espesor de 1000Å. Ninguna de las capas fue intencionalmente dopada.

Con el fin de facilitar el estudio de las muestras, se han considerado dos grupos, uno con aquellas que fueron expuestas al aire y el segundo con las muestras que se mantuvieron a UAV durante todo el proceso de crecimiento (Ver tabla II).

37

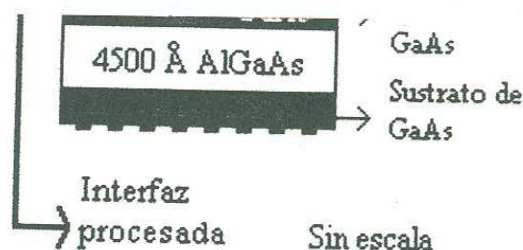


Fig 4.1 Representación esquemática de las heteroestructuras estudiadas

Se creció también una muestra de referencia, con la cual se compararán los espectros de fotoluminiscencia, para así evidenciar los efectos de las interrupciones del crecimiento.

La muestra de referencia –denotada como muestra 0- se creció de manera continua con un espesor de la capa colchón de GaAs $d = 5000\text{Å}$.

Las muestras 1 y 2, durante el paso 3 fueron sacadas del sistema de MBE y expuestas al aire. La capa colchón de GaAs en ambas muestras presenta una reconstrucción (2x4), con un espesor de 5000 y 500 Å respectivamente, la exposición al aire se realizó por un período de 30 minutos. Posteriormente, fueron introducidas nuevamente al sistema de MBE para continuar con el crecimiento de los pozos cuánticos.

Para las muestras 3 y 4, la interrupción en el crecimiento se realizó después de crecer la capa colchón de GaAs con $d = 130\text{Å}$. Las muestras fueron sacadas de la cámara de crecimiento y depositadas por tres horas en otra cámara dentro del sistema de MBE con una presión de 10^{-9} torr.. Pasado este tiempo, fueron trasladadas de nuevo a la cámara de crecimiento para proseguir con el crecimiento de los PC. En este caso la reconstrucción de la capa colchón de la muestra 3 es (2x4), mientras que para la muestra 4 se tiene una reconstrucción (4x4) para esta capa.



Fig 4.1 Representación esquemática de las heteroestructuras estudiadas

Muestra	Características	Grosor de la capa buffer (Å)	Reconstrucción superficial	Proceso de interrupción
0	Referencia	5000		Ninguna
1	Procesamiento ex-situ	5000	2x4	Exposición al aire (30 min.)
2	Procesamiento ex-situ	500	2x4	Exposición al aire (30 min.)
5	Procesamiento in-situ	130	2x4	Interrupción del crecimiento in-situ por 3hrs.
7	Procesamiento in-situ	130	4x4	Interrupción del crecimiento in-situ por 3hrs.

TABLA II Características de las muestras estudiadas

4.2 Arreglo de Fotoluminiscencia

La caracterización por fotoluminiscencia se realizó a bajas temperaturas. El montaje experimental se muestra en la Fig.4.2.

La temperatura utilizada es la del nitrógeno líquido (77 K), para esto las muestras fueron colocadas en un dedo de flujo abierto. Como fuente de excitación se utilizó un láser de Ar ($\lambda = 6320 \text{ \AA}$), la luz del láser se pulsa mediante un pulsador mecánico, la frecuencia de este pulsador es registrada en un amplificador lock-in. La luz del láser se hace incidir sobre las muestras mediante un arreglo de lentes; de manera análoga, la radiación emitida por la muestra se focaliza mediante lentes a la entrada de un monocromador. Acoplado al monocromador se tiene un microprocesador que permite controlar el intervalo de longitud de onda en el cual se desea hacer el barrido. A la salida del monocromador se encuentra un fotomultiplicador que convierte los pulsos luminosos detectados en pulsos eléctricos. Estos pulsos son enviados al lock-in que junto con la señal de referencia de la luz entrante, proporcionan la medición asociada a la longitud de onda en la que se encuentra el monocromador. Haciendo un barrido de la longitud de onda en el monocromador por medio de la computadora se obtiene el espectro de fotoluminiscencia de la muestra.



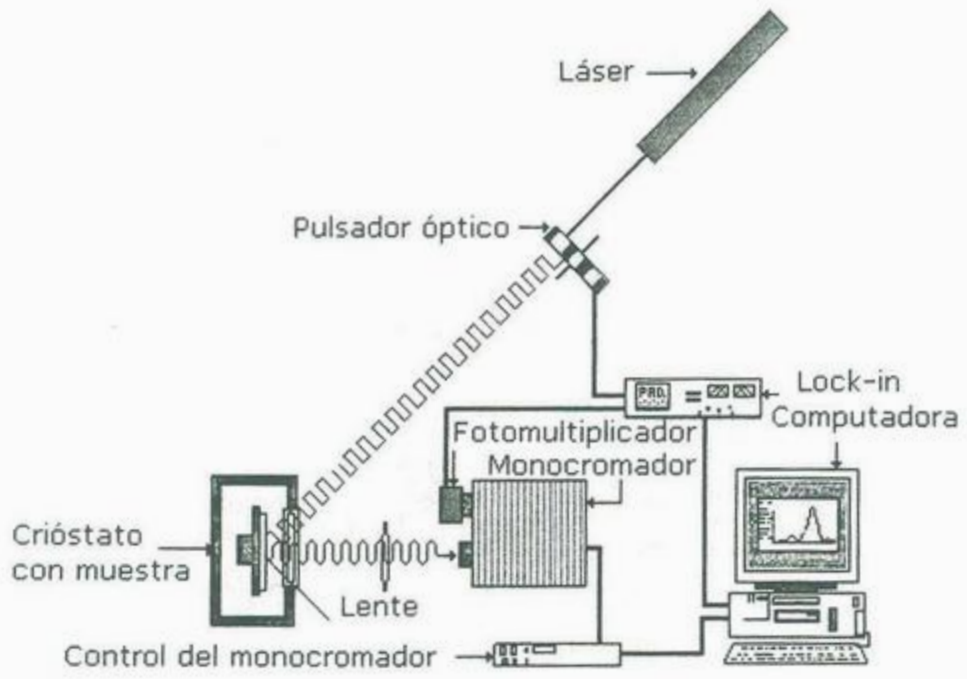


Fig. 4.2 Diagrama del montaje experimental de la técnica de Fotoluminiscencia.

5

Resultados y discusión

5.1 Muestra de referencia.

Presentaremos el análisis de los espectros de fotoluminiscencia (FL) de cada una de las muestras, para poder determinar los efectos de los diferentes tipos de interrupción en el crecimiento realizados en las diferentes muestras.

Iniciaremos la discusión analizando la posición de los picos de emisión observados en los espectros. La energía de recombinación (E_{hv}) de la primera transición electrón-hueco pesado (1e-1hh) en cada pozo, la encontramos resolviendo la ecuación de Schrödinger correspondiente a un pozo cuadrado finito (ec. 3.2 y 3.4) representado esquemáticamente en el recuadro de la Fig. 5.1; de esta manera tenemos que:

$$E_{hv} = E_g + E_{1e} + E_{1hh} \quad (5.1)$$

De este modelo se obtiene la posición de la energía de recombinación como función del ancho del pozo; el resultado teórico obtenido en este trabajo, para una temperatura de 77K está representado por la línea continua de la Fig. 5.1. Podemos observar que conforme disminuimos el ancho del pozo la energía de emisión aumenta, resultado que es consecuencia del mayor confinamiento cuántico. En esta misma figura presentamos con símbolos las energías de emisión de cada uno de los pozos cuánticos (PC) en las diferentes muestras, que discutiremos más adelante.

Primeramente se analizará el espectro de FL de la muestra de referencia, para posteriormente comparar los resultados obtenidos de las muestras procesadas con este crecimiento sin interrupción alguna.

En la Fig 5.2 se presenta el espectro de FL para la muestra de referencia. Se observan cuatro picos con energías de 1.508, 1.59, 1.634 y 1.721 eV, respectivamente.

Atribuimos la primera emisión a 1.508 eV a la capa colchón de GaAs. Teóricamente el valor de la brecha prohibida del GaAs en bulto la podemos obtener mediante la relación de Varshni (ec. 2.2):

$$E(T) = E(0) - \alpha T^2 / (T + \beta) \quad (5.2)$$

con $\alpha = 5.5 \times 10^{-4}$ eV/K y $\beta = 225$ K. Para una temperatura de 77K, esta relación nos da un valor de 1.508 eV, lo cuál coincide perfectamente con el valor obtenido.

Para determinar el origen de los tres picos restantes utilizamos el modelo teórico de la ecuación 5.1, para pozos con un ancho nominal de 25, 45 y 60 Å. Las energías que obtuvimos para la primera transición en estos pozos son: 1.71, 1.618, 1.584 eV, respectivamente. Estas energías, correspondientes a los pozos con ancho nominal, están representados en la Fig. 5.1 como cuadrados. Estos valores son muy cercanos a los picos de FL observados experimentalmente para la muestra de referencia, que se representan con rombos en la Fig. 5.1.

Para realizar un análisis cuantitativo del pico de emisión de cada pozo realizamos el ajuste de los picos del espectro mediante funciones gaussianas.

Los resultados de estos ajustes para la muestra 0 se presentan en la Fig. 5.3. Las Figs. 5.3a)-c) muestran los resultados obtenidos para los pozos 1, 2 y 3 respectivamente. En estas figuras las líneas discontinuas corresponden a los espectros obtenidos experimentalmente, mientras que las líneas continuas corresponden al ajuste.

De los máximos de las gaussianas obtuvimos un valor más preciso para las energías (E_{pc}) asociadas a la primera transición en cada PC. Por otro lado, la altura (I) de las gaussianas nos cuantifica la intensidad de la transición respectiva y la intensidad de FL integrada (I_A) la obtuvimos del área de las gaussianas. Consideramos el ancho medio del pico de FL (ΔE_{pc}) como la anchura de la función gaussiana medida justo a la mitad de su altura. Los valores que obtuvimos para cada una de estas características se han resumido en la tabla III.

Pozo (ancho nominal Å)	Energía (E_{pc}) (eV)	Intensidad (I) (u. arb.)	Intensidad Integrada (I_A) (u.arb.)	Ancho medio (ΔE_{pc}) (eV)
60	1.59	.0051675	3.22E-05	0.00498
40	1.6345	.0095635	1.01E-04	0.00919
25	1.7216	.0038288	7.62E-05	0.015879

Tabla III Características del espectro de FL de la muestra 0.

Una medida de la calidad de las muestras es su intensidad (I) y su intensidad integrada (IA) de FL. En las Figs. 5.4 a) y b) presentamos los resultados obtenidos para estas intensidades y para facilitar su comparación, se graficaron para cada pozo de la muestra de referencia.

Como se observa en la Fig 5.4a), el pico más alto corresponde a la transición en el bulto del GaAs seguida por la emisión del pozo 2, cuya intensidad es muy cercana a la del GaAs, después observamos con un valor intermedio la intensidad de emisión del pozo 1 y por último el pozo 3, que emite aproximadamente la mitad en comparación con el GaAs. En cuanto a la intensidad integrada, observamos que el pozo 1 tiene una intensidad integrada muy baja, el pozo 2 presenta el valor más grande y después la intensidad integrada disminuye para el pozo 3.

La distribución de intensidades de FL en estructuras con diferentes PC depende de varios factores, tales como: sección eficaz de atrapamiento de los pozos, potencia y energía de excitación, difusión de portadores, etc. Todos estos factores determinarán cual de los pozos emitirá más eficientemente. Está fuera de los objetivos de este trabajo realizar un análisis del por que el pozo 2 presenta la mayor emisión. Aquí solamente tomaremos esta distribución de intensidades en la muestra de referencia como patrón para posteriores comparaciones.

Otra medida importante de la calidad de las muestras es el ancho medio (ΔE_{pc}) de los picos de FL, que está fuertemente relacionado con la rugosidad de las interfaces (ΔL) en los PC, como se explicó en la sección 3.2.

La rugosidad de las interfaces la podemos cuantificar mediante la expresión (3.21):

$$\Delta E = \left[\left(\frac{dE_{1e}}{dL} \right) + \left(\frac{dE_{1hh}}{dL} \right) \right] \Delta L \quad (5.3)$$

donde:

$$\left(\frac{dE_{1e}}{dL}\right) = \frac{E_{1e}}{\frac{L}{2} + \text{Cos}^2\left(\sqrt{\frac{2m_e^{II}}{\hbar^2}} E_{1e} \frac{L}{2}\right) \frac{\hbar\Delta E_c}{E_{1e}\sqrt{2m_e^I(\Delta E_c - E_{1e})}}}$$

$$\left(\frac{dE_{1hh}}{dL}\right) = \frac{E_{1hh}}{\frac{L}{2} + \text{Cos}^2\left(\sqrt{\frac{2m_{hh}^{II}}{\hbar^2}} E_{1hh} \frac{L}{2}\right) \frac{\hbar\Delta E_c}{E_{1hh}\sqrt{2m_{hh}^I(\Delta E_c - E_{1hh})}}}$$

Usando la expresión (5.3) con los valores de ΔE_{pc} dados en la tabla III se obtuvieron los resultados para la rugosidad en cada pozo de la muestra de referencia resumidos en la tabla IV. La rugosidad se presenta medida en monocapas (ml).

Pozos	Pozo (ancho real Å)	Incertidumbre ΔL (ml)
1	57	1.2221
2	41	0.8873
3	24	0.9212

Tabla IV Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra de referencia

En la fig5.5a) y 5.5b) se presentan los resultados del ancho medio y de la rugosidad (ΔL) obtenidos para la muestra de referencia.

Vemos que el pozo 1 es el que presenta la rugosidad mayor, esto se debe a que es el pozo más cercano a la capa colchón, por lo que los defectos o rugosidades contenidas hasta esta capa del crecimiento lo sentirá directamente el primer pozo. Es conocido que las interfaces AlGaAs/GaAs ayudan a suavizar el frente de crecimiento, así pues para los pozos 2 y 3 se obtuvo una rugosidad menor, de aproximadamente 0.09 eV.

El ancho medio de los pozos 2 y 3 tiene valores cercanos a 0.01 eV, mientras que el pozo 1, presenta un ancho medio de 0.004eV, valor considerablemente bajo.

De lo anterior, podemos decir que el pozo 2 es el que presenta las mejores características, pues no sólo posee una rugosidad menor, si no también la mayor intensidad de FL.

Podemos esperar que con una técnica de crecimiento como MBE, con la que se alcanza un muy alto control en los espesores de las películas, al mantener las condiciones de crecimiento las características de FL de los pozos no variarán de forma significativa al crecer diferentes muestras. De esta manera, dado que todas las muestras se crecieron con

todos los parámetros iguales, los cambios en las características de FL de las diferentes muestras con relación a las características encontradas para la muestra de referencia nos permitirán evaluar los efectos de los diferentes tipos de procesamientos realizados.

5.2 Muestras procesadas ex-situ.

5.21 Muestra 1

Es de esperarse que los tratamientos hechos a la capa colchón afecten directamente las características de toda la heteroestructura, es por ello que entre mejor calidad presente la capa colchón, mejores características generales presentará la muestra. En el caso de la muestra 1, el crecimiento fue interrumpido para exponer al aire la capa colchón de GaAs.

La interrupción se realizó durante 30 min. Para esta muestra, la capa colchón tiene un espesor de 5000 Å. El espectro de FL se muestra en la Fig. 5.6.

En este espectro sobresalen las emisiones correspondientes a los PC pues la emisión del bulto de GaAs es prácticamente nula.

Al pico de emisión para el GaAs, en este caso le corresponde una energía de 1.5103 aproximadamente, para los pozos 1, 2 y 3 se observa una energía de 1.579, 1.624, 1.6973 respectivamente. El ancho real asociado a estas energías está dado en la tabla VI. Estos valores están representados mediante triángulos en la Fig. 5.1.

Para conocer las características de cada uno de los tres pozos, se realizó un ajuste de los picos de emisión utilizando funciones gaussianas. Los ajustes mostrados en las Figs.5.7a)-c), pertenecen a los pozos 1,2 y 3, respectivamente. Las líneas continuas representan el ajuste realizado, mientras que las líneas discontinuas los espectros experimentales.

Los resultados obtenidos se presentan a continuación:

Pozo (ancho nominal Å)	Energía (E_{pc}) (eV)	Intensidad (I) (u. arb.)	Intensidad Integrada (I_A) (u. arb.)	Ancho medio (ΔE_{pc}) (eV)
60	1.5791	9.05E-4	1.37E-05	0.00512
45	1.6246	.0025	1.40E-04	0.00694
25	1.6973	.0668	1.17E-04	0.0136

Tabla V Características del espectro de FL de la muestra 1.

Como se puede observar en la Fig. 5.6 la exposición al aire afectó de manera considerable a la emisión del GaAs; pensamos que esto se debe a las recombinaciones no-radiativas asociadas a impurezas incorporadas a la interfaz. Estas impurezas se pueden difundir y afectar la emisión del primer pozo. De la Fig. 5.6 podemos observar que a pesar del daño generado tanto en la emisión del GaAs como en la del primer pozo, al proseguir con el crecimiento, los efectos se ven disminuidos, permitiendo una recuperación en las características de los últimos dos pozos. Esto se puede observar a partir de la intensidad (I) de las emisiones mostradas en la Fig. 5.8 a), la emisión del pozo 2 es aproximadamente 6.5 veces más intensa que la del pozo 1, mientras que el pozo 3 presenta una emisión aproximadamente 3 veces mayor.

Este comportamiento se repite para la intensidad integrada (I_A) como se muestra en la Fig. 5.8b). En esta Fig. observamos que los pozos 2 y 3 poseen una intensidad integrada superior a la del pozo 1, evidenciando el inminente daño provocado por la exposición al aire.

A partir de la ecuación (5.3), es posible calcular la rugosidad de cada pozo; haciendo uso del valor del ancho medio mostrado en la Tabla V, obtuvimos los resultados que se presentan en la tabla VI.

Pozos	Pozo (ancho real Å)	Incertidumbre ΔL (ml)
1	63.37	1.3279
2	43.5	0.6907
3	27.5	0.8346

Tabla VI Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 1

En la fig5.9a) y 5.9b) se presentan los resultados del ancho medio y de la rugosidad (ΔL) obtenidos para la muestra 1.

Vemos que el ancho medio tiene un incremento en su valor, conforme se aleja de la capa colchón, el pozo 1 y el pozo 2, presentan un ancho medio de aproximadamente 0.005 y 0.006 eV respectivamente, para el pozo 3 se tiene un ancho medio de aproximadamente 0.013.

Por otra parte, la rugosidad presente en el pozo 1 corrobora que la exposición al aire afecta notablemente la calidad de la heteroestructura, pues su valor es mucho mayor comparado con la rugosidad asociada a los pozos 2 y 3.

No es posible encontrar ninguna emisión que pudiera ser atribuida al pozo 1, por lo que concluimos que el daño generado por la exposición es mayor que en el caso anterior.

En este caso se realizaron los ajustes pertinentes para los pozos 2 y 3 y se realizó también un ajuste al pico de emisión del GaAs para determinar su energía. En la Fig. 5.11 se muestra cada uno de los ajustes. Es posible observar en la Fig. 5.11a) que la forma del primer pico no es uniforme, como se tiene para los otros dos picos de emisión mostrados en las Figs. 5.11b) y 5.11c), esto se debe a que la incorporación de impurezas y defectos modifica ligeramente la estructura de bandas, creando estados dentro de la brecha prohibida, causando que se tengan emisiones ligeramente corridas de este valor. Es posible también que la emisión del pozo 1 se haya traslapado con esta emisión.

En la tabla VII se presentan los resultados de los ajustes para los pozos.

Pozo (ancho nominal Å)	Energía (E_{pc}) (eV)	Intensidad (I) (u. arb.)	Intensidad Integrada (I_A) (u. arb.)	Ancho medio (ΔE_{pc}) (eV)
60	--	--	--	--
45	1.6252	0.01605	1.53E-4	0.00760
25	1.7173	.000710	1.34E-4	0.0151

Tabla VII Características del espectro de FL de la muestra 2.

Contrariamente al pozo 1, el pozo 2 y 3 presentan emisiones muy cercanas a pozos con el ancho nominal establecido y con intensidades comparables en magnitud a las intensidades obtenidas para la muestra 0 y 1.

En la Fig. 5.11a) se muestra la intensidad (I) de los picos de emisión y en la Fig. 5.11b) se muestra la intensidad integrada (I_A).

Los picos de emisión para los pozos 2 y 3 están perfectamente bien definidos y presentan una intensidad integrada alta.

En las Figs. 5.12 a) y b) se muestran los valores de los anchos medios y de las rugosidades obtenidas para la muestra 2. Los resultados del cálculo de la rugosidad según la ecuación (5.3) se presentan en la tabla VIII

Pozos	Pozo (ancho real Å)	Incertidumbre ΔL (ml)
1	--	--
2	43.6	0.7576
3	25	0.8905

Tabla VIII Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 2

Para el pozo 3, el ancho medio es dos veces mayor que el ancho medio del pico correspondiente a la emisión del pozo 2.

La rugosidad es también mayor para el pozo 3 que para el pozo 2, como se observa en la Fig. 5.12b).

Es claro que el daño causado por la interrupción ex-situ, provoca la degradación de la emisión del pozo 1, y la pobre emisión del bulto de GaAs; esto nos permite pensar que a menor grosor de la capa colchón el daño es aún mayor. Pero indiscutiblemente en ambos casos, la calidad de la muestra es muy baja puesto que se pierde la emisión del primer pozo.

5.3 Muestras procesadas in-situ.

5.3.1 Muestra 5

Diversos estudios han demostrado que los procesos in-situ preservan la alta calidad de las muestras. En este trabajo se presentan dos muestras cuya interrupción de crecimiento se realizó durante 3 hrs. en ultra-alto vacío. La forma de reaccionar de la capa colchón de GaAs ante estos tratamientos puede verse afectada por sus características superficiales. Una de las características principales es la reconstrucción de la superficie.

Para la muestra 5, la reconstrucción de la interfaz de la capa colchón es conocida como reconstrucción $c(2 \times 4)$. La Fig. 5.14 corresponde al espectro de FL de la muestra 5.

Los picos de emisión se encuentran con energías de 1.5306, 1.5676, 1.611 y 1.6862 eV. Como se ha mencionado anteriormente, se espera que el bulto de GaAs emita alrededor de 1.508 eV, por lo que podemos observar un corrimiento a una energía mayor del pico de emisión del GaAs. En este caso en particular se creció una capa colchón de 130Å de espesor y debido a la delgadez de esta capa, está actuando como un pozo con ancho nominal de 130Å al que le corresponde una energía de recombinación cercana a 1.53, de acuerdo a la Fig. 5.1

A pesar de esto, no se le consideró como pozo para los análisis posteriores. El ancho real correspondiente para los pozos 1, 2 y 3 de la muestra 5, están representados mediante rombos en la Fig. 5.1. y se presentan en la tabla X. El ajuste realizado para cada pozo se muestra en las Figs. 5.15a)-c). Las líneas continuas corresponden a los ajustes, los valores experimentales se presentan como las líneas discontinuas.

De este análisis obtuvimos las características de los pozos resumidas en la tabla IX:

Pozo (ancho nominal Å)	Energía (E_{pc}) (eV)	Intensidad (I) (u. arb.)	Intensidad Integrada (I_A) (u. arb.)	Ancho medio (ΔE_{pc}) (eV)
60	1.5675	0.00851	5.16E-5	0.00501
45	1.6111	0.01378	1.10E-4	0.00638
25	1.6882	0.00407	6.47E-5	0.02166

Tabla IX Características del espectro de FL de la muestra 5

En la Fig. 5.16 a) se muestra la intensidad para cada pico de emisión de la muestra 5. La emisión más intensa es la que corresponde a la capa colchón y supera considerablemente la emisión de los pozos. La intensidad de emisión del pozo 2 es la segunda más grande, pero su valor corresponde aproximadamente a la mitad de la emisión del GaAs. El pozo 3 presenta la menor intensidad.

La intensidad integrada (I_A) se muestra en la Fig. 5.16b), en este caso el mínimo corresponde al pozo 1 y el valor máximo al pozo 2.

Haciendo uso de la ecuación (5.3), se estimó la rugosidad de cada pozo; los resultados se muestran en la tabla X.

Pozos	Pozo (ancho real Å)	Incertidumbre ΔL (ml)
1	71	1.3795
2	47.5	0.6659
3	29	0.7957

Tabla X Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 5

Los valores del ancho medio y de la rugosidad (ΔL) obtenidos para la muestra 5 se presentan en las Figs 5.17a)-b).

El ancho medio del pozo 1 es muy similar al valor obtenido para el pozo 2, valores que se encuentran alrededor de 6 meV, para el pozo 3 el valor para el ancho medio se duplica.

En cuanto a la rugosidad de los pozos, es el pozo 1 el que presenta la rugosidad mayor, que supera por mucho la presentada por los otros 2 pozos.

De nueva cuenta se tiene que es el pozo 1 el que siente los efectos del tratamiento hecho en la interfaz, pues a pesar de que en este caso la interrupción se realizó in-situ,

afectó fuertemente las propiedades del pozo más cercano a ella, pues no sólo el pozo 1 es el más rugoso, sino el que posee la intensidad integrada menor.

5.3 Muestra 7

Para la muestra 7 se creció una capa colchón con reconstrucción superficial c(4x4). El espectro de FL se muestra en la fig. 5.18.

Lo que se observa es que la configuración que presentaban las emisiones de los pozos, cambió radicalmente. En este espectro se ve claramente que el pozo 2 tiene la emisión más pequeña y que el pozo 3 presenta una emisión mucho más grande que el resto.

Las energías correspondientes a cada pico resultaron ser de 1.532, 1.569, 1.610, 1.680 eV. Nuevamente el espesor de 130Å de la capa colchón, produce que esta presente efectos de confinamiento y no propiedades de bulto. En este caso, tampoco se realizó un análisis detallado de este pico. Los anchos reales de los pozos de la muestra 7 se presentan en la tabla XII. En la Fig. 5.1 corresponden a los puntos señalados mediante triángulos horizontales.

En la Fig. 5.19, se muestran los ajustes realizados para cada pico de emisión de la muestra 7 de donde obtuvimos las características presentadas en la tabla XI.

Pozo (ancho nominal Å)	Energía (E_{pc}) (eV)	Intensidad (I) (u. arb.)	Intensidad Integrada (I_A) (eV)	Ancho medio (ΔE_{pc}) (eV)
60	1.5696	0.00811	3.25E-5	0.00328
45	1.6103	0.00735	5.73E-4	0.00680
25	1.6802	0.02447	3.83E-4	0.01295

Tabla XI Características del espectro de FL de la muestra 7.

En la Fig. 5.20a) se muestra la intensidad (I) de los picos de emisión de la muestra 7. Se observa claramente la intensidad tan superior del pozo tres con respecto al resto de las emisiones.

En la Fig. 5.20b) se observa la intensidad integrada (I_A); análogamente, el pozo 3 presenta una intensidad integrada casi 10 veces más grande que para los otros pozos.

Los anchos medios y las rugosidades obtenidas para la muestra 7 se presentan en las Figs. 5.21 a) y b). Los resultados del cálculo de la rugosidad de acuerdo a los anchos medios obtenidos y la ecuación (5.3) se resumen en la tabla XII

Pozos	Pozo (ancho real Å)	Incertidumbre ΔL (ml)
1	70	0.8968
2	48	0.7139
3	30	0.8260

Tabla XII Incertidumbre en el ancho del pozo de la muestra 2

Para los anchos medios, las diferencias no resultan ser tan grandes como para las intensidades. En este caso el pozo 3 presenta el ancho medio mayor, siendo el menor el correspondiente al pico de emisión del pozo 1.

Consistentemente con los casos anteriores, la rugosidad mayor no la presenta el pozo 3 sino el pozo 1, el pozo 2 es el que resulta en esta ocasión el menos rugoso.

De la comparación de los espectros de las muestras procesadas in-situ, queda claro la repercusión que la reconstrucción superficial de la capa colchón tiene sobre las características de la heteroestructura. Es evidente que los cambios que se presentan van más allá de simples modificaciones a las características de emisión de las muestras, pues como se observa la forma de la distribución de la intensidad de emisión también cambia.

Durante los procesamientos in-situ en ningún pozo se observa ningún daño evidente, mostrando con esto las ventajas de los tratamientos en ultra-alto vacío.

5.4 Comparación de resultados.

De la comparación de los espectros de FL de las muestras procesadas y la muestra de referencia, mostrados en las Figs. 5.22 y 5.23 observamos que para todos los pozos en las muestras procesadas, se presenta un corrimiento a menores energías. Esto pudiera deber tener su origen en el cambio de flujo de las celdas, ocasionado por la interrupción en el crecimiento.

Conforme avanza el crecimiento los flujos de las celdas de efusión tienden a estabilizarse, al realizar una interrupción esta inercia se rompe, de modo que al reiniciar el crecimiento la variación en el flujo al abrir de nuevo las fuentes, produce fluctuaciones en los anchos reales de los pozos, alejándolos de su valor nominal. Este corrimiento se

observa más claramente en la Fig. 5.24. En la Fig. 5.25 se muestra la comparación de la rugosidad de los pozos en las diferentes muestras.

Realizando un análisis comparativo de la rugosidad de los pozos para las distintas muestras, observamos que las variaciones que presenta el pozo 2 son análogas a las que presenta el pozo 3. El cambio más notorio es en la rugosidad del pozo 1, siendo el pozo 1 de la muestra 5 el que presenta la rugosidad mayor.

En la muestra de referencia se observa que el pozo más rugoso es el más cercano a la capa colchón, se observa también que la rugosidad presente en los pozos 2 y 3 es muy similar, de modo que podemos concluir que conforme se realiza el crecimiento las interfaces se suavizan.

Para las muestras con procesamiento ex-situ también el pozo 1 es el más rugoso y presentó una rugosidad mayor a la muestra de referencia, poniendo de manifiesto el daño que sufre este pozo por los procesamientos ex-situ.

Comparando las muestras ex-situ entre sí, es claro que el daño ocasionado a la capa colchón de menor espesor es más grande.

El panorama es distinto para las muestras procesadas in-situ; la mayor rugosidad para el pozo 1 corresponde a la muestra 5, por el contrario para ese mismo pozo, la muestra 7 presenta una rugosidad más baja, inclusive menor a la de la muestra de referencia. Esta muestra que la reconstrucción c(4x4) es aparentemente la mejor para terminar la superficie en los procesamientos in-situ.

La superioridad de las muestras procesadas in-situ se puede ver por la mayor intensidad de emisión del pozo 1. La Fig. 5.26 muestra la comparación de las intensidades integradas de FL de los pozos en las diferentes muestras.

De todo lo anterior podemos decir que, definitivamente, los procesos in-situ resultan ser más apropiados que los ex-situ, pues el poco control que se tiene sobre la incorporación de impurezas al momento de exponer las muestras al aire, afecta de manera directa las transiciones radiativas de las mismas, y ante estos daños es poco lo que se puede hacer.

Cambios interesantes, se presentan en las muestras procesadas in-situ con el cambio de reconstrucción, evidentemente la muestra 7, es la que tiene la FL más intensa y la menor rugosidad, por lo que sin lugar a dudas es la de mejor calidad.

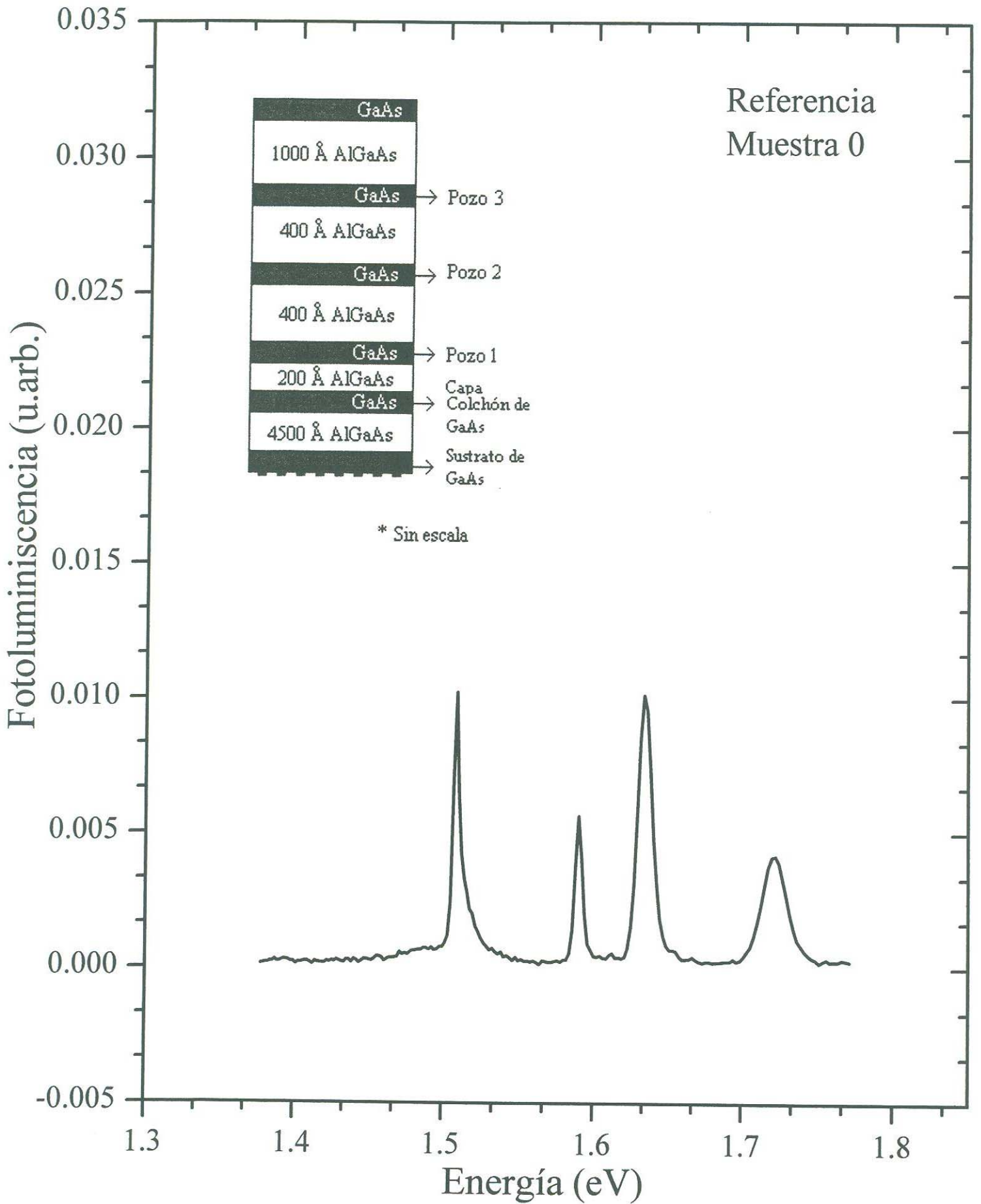


Fig 5.2 Espectro de FL a 77K de la muestra de referencia.

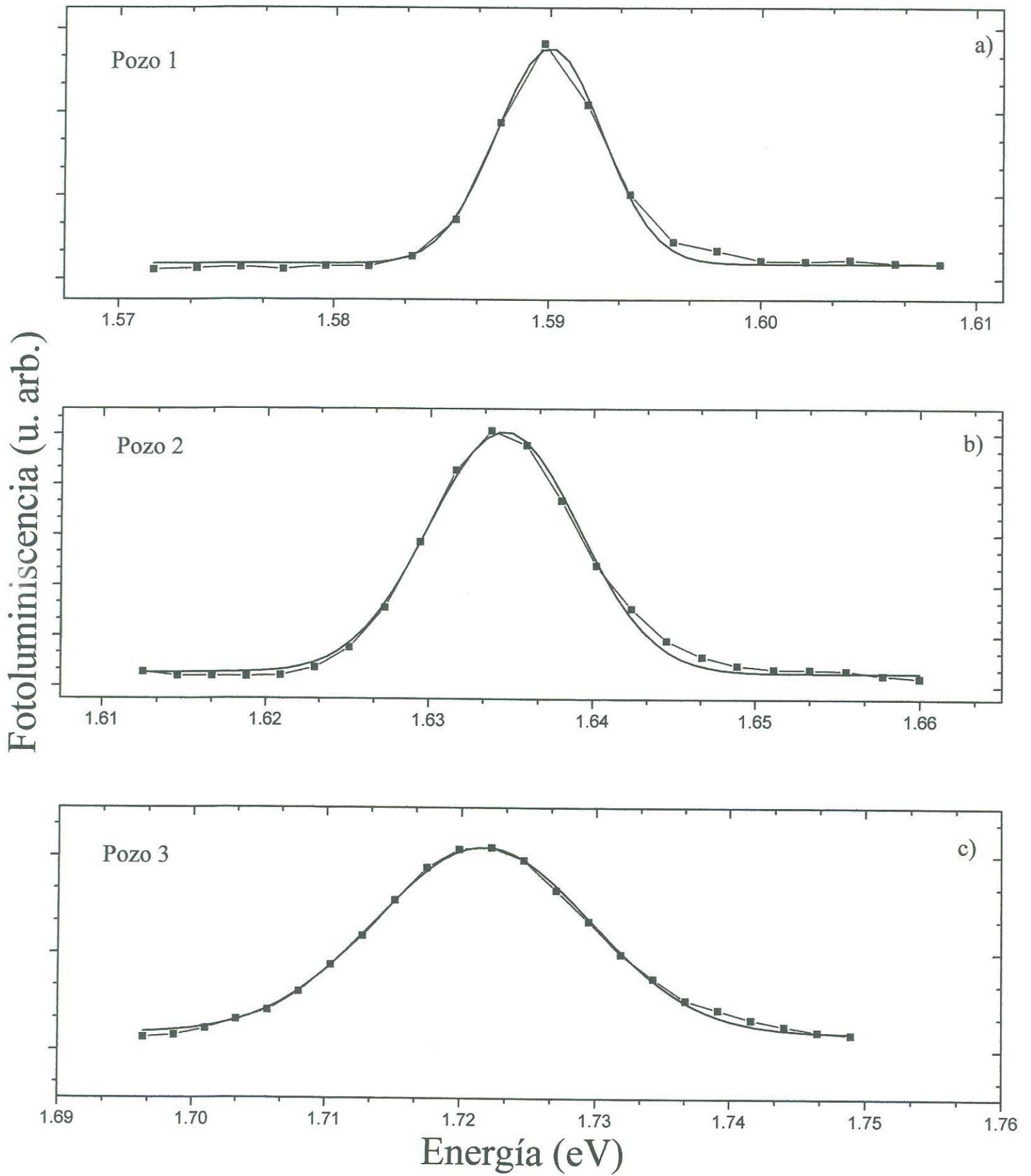


Fig 5.3 Ajustes del espectro de FL de la muestra 0

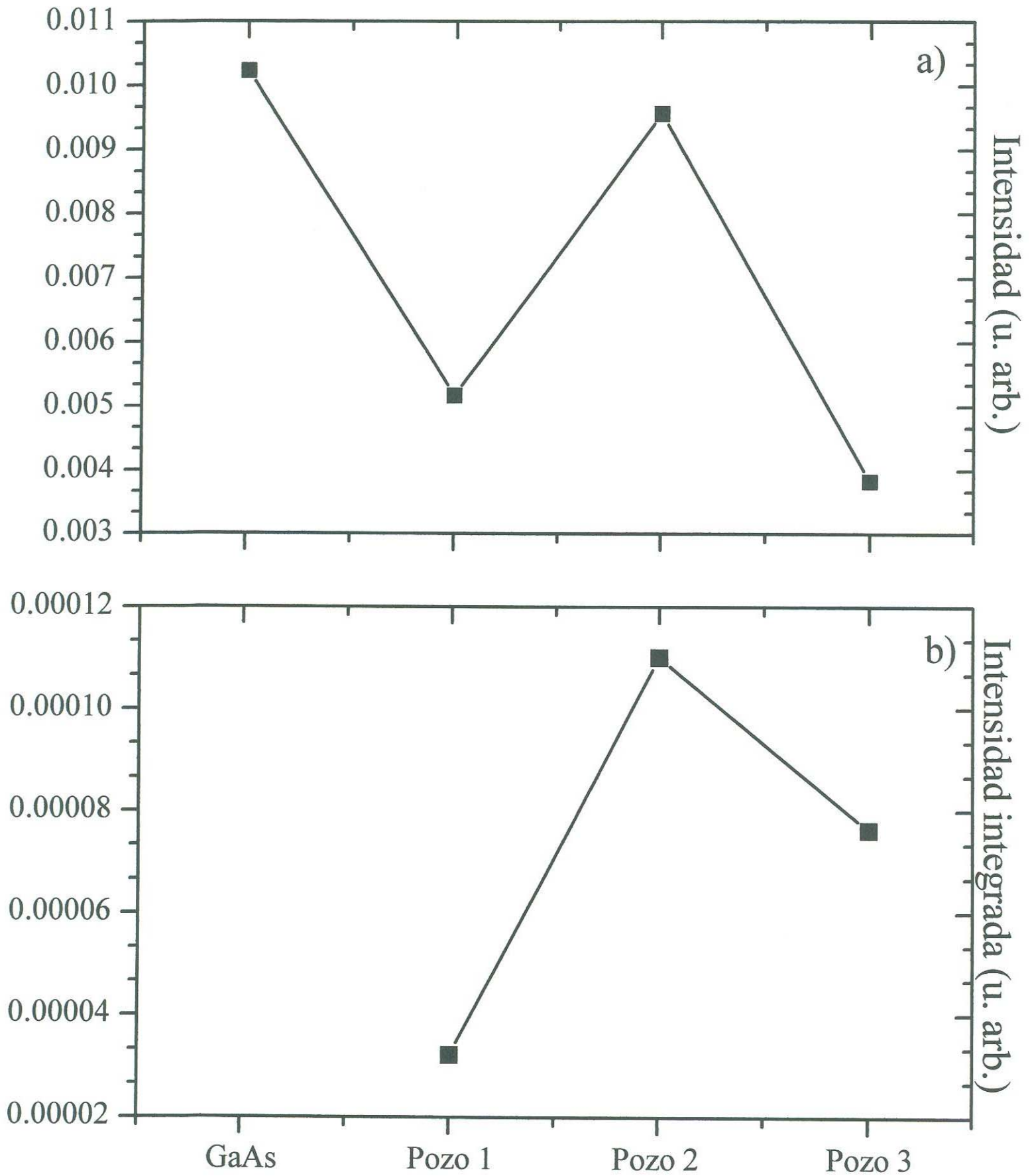


Fig. 5.4 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 0

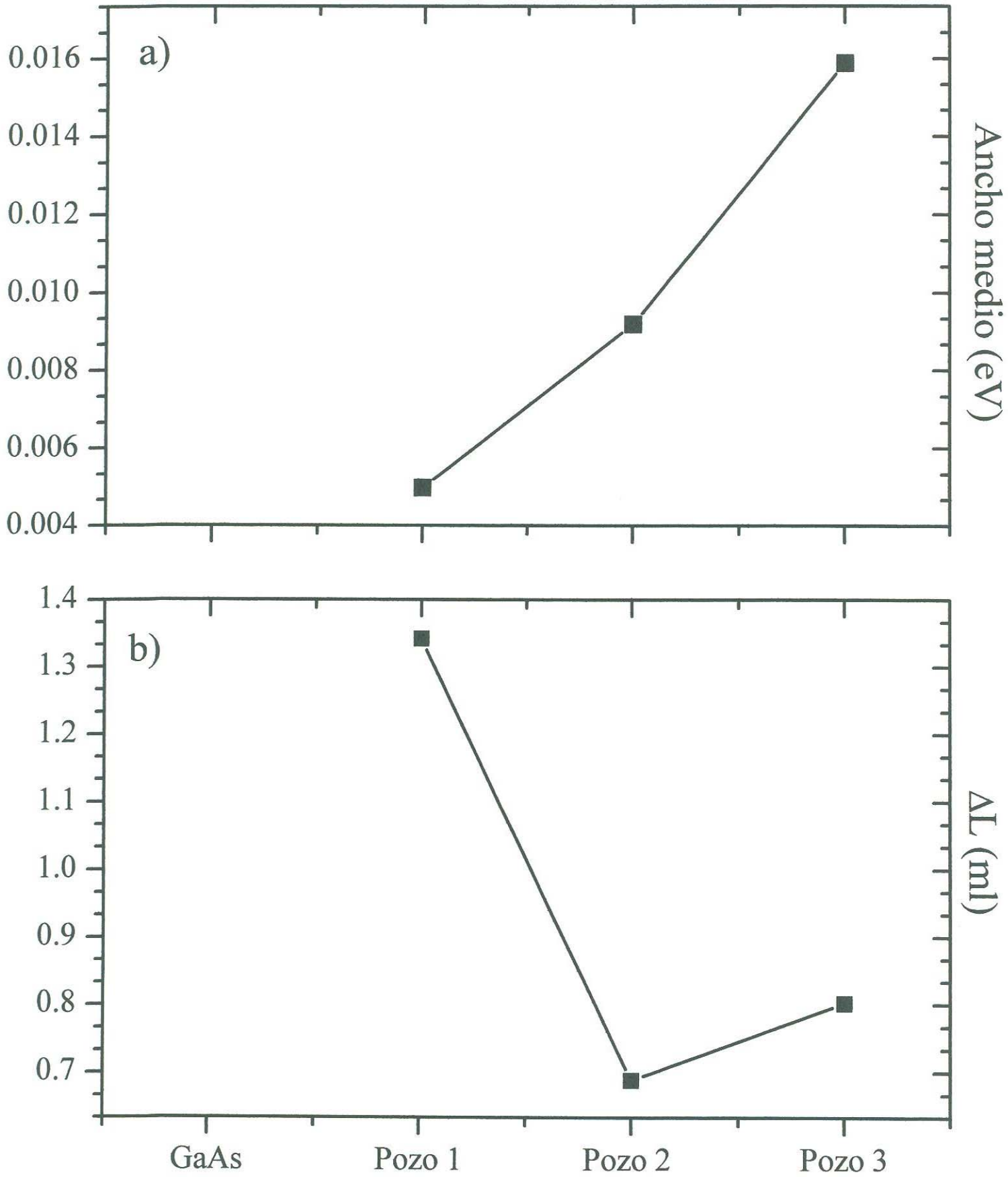


Fig. 5.5 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 0

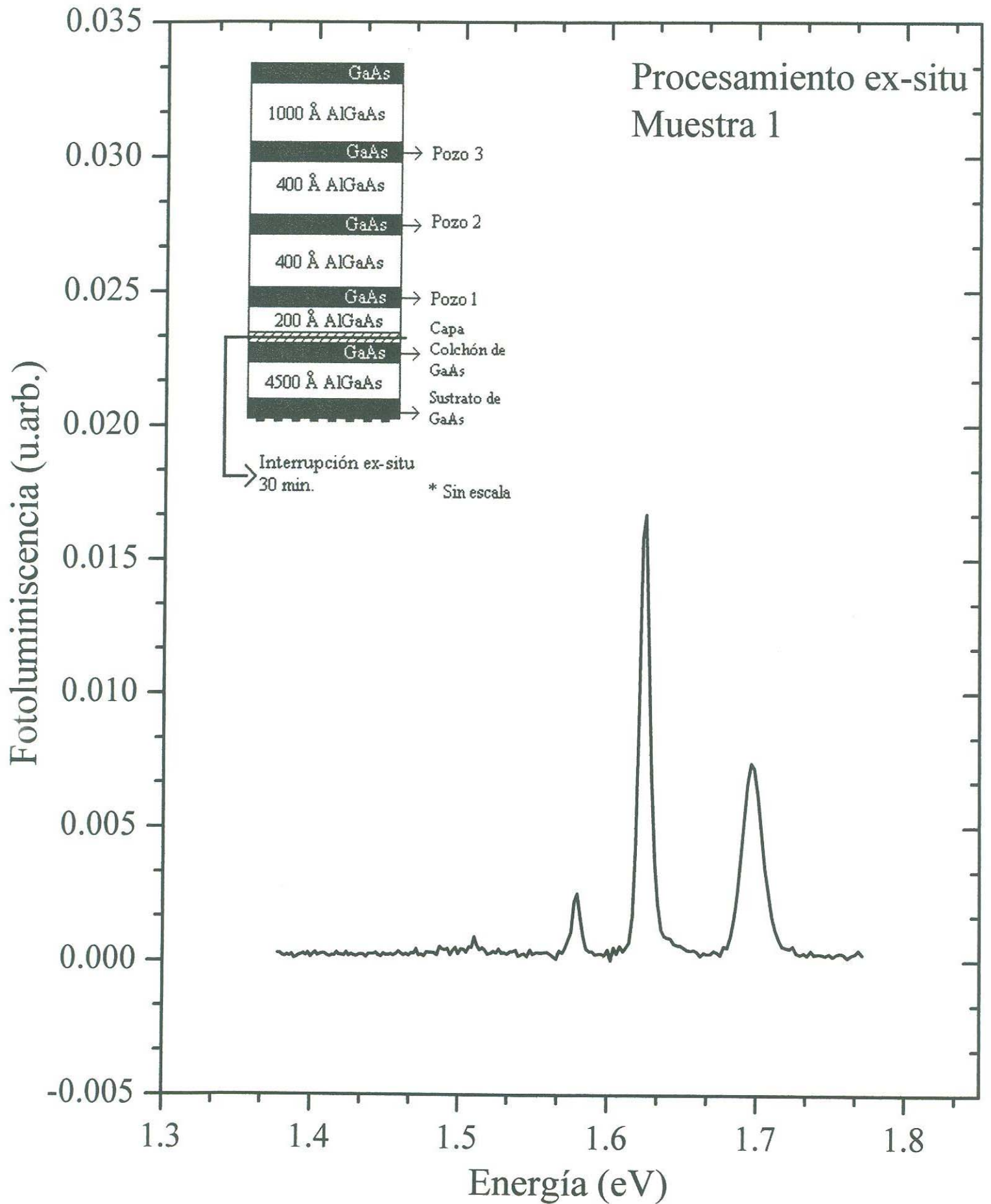


Fig. 5.6 Figura de FL a 77K de la muestra 1

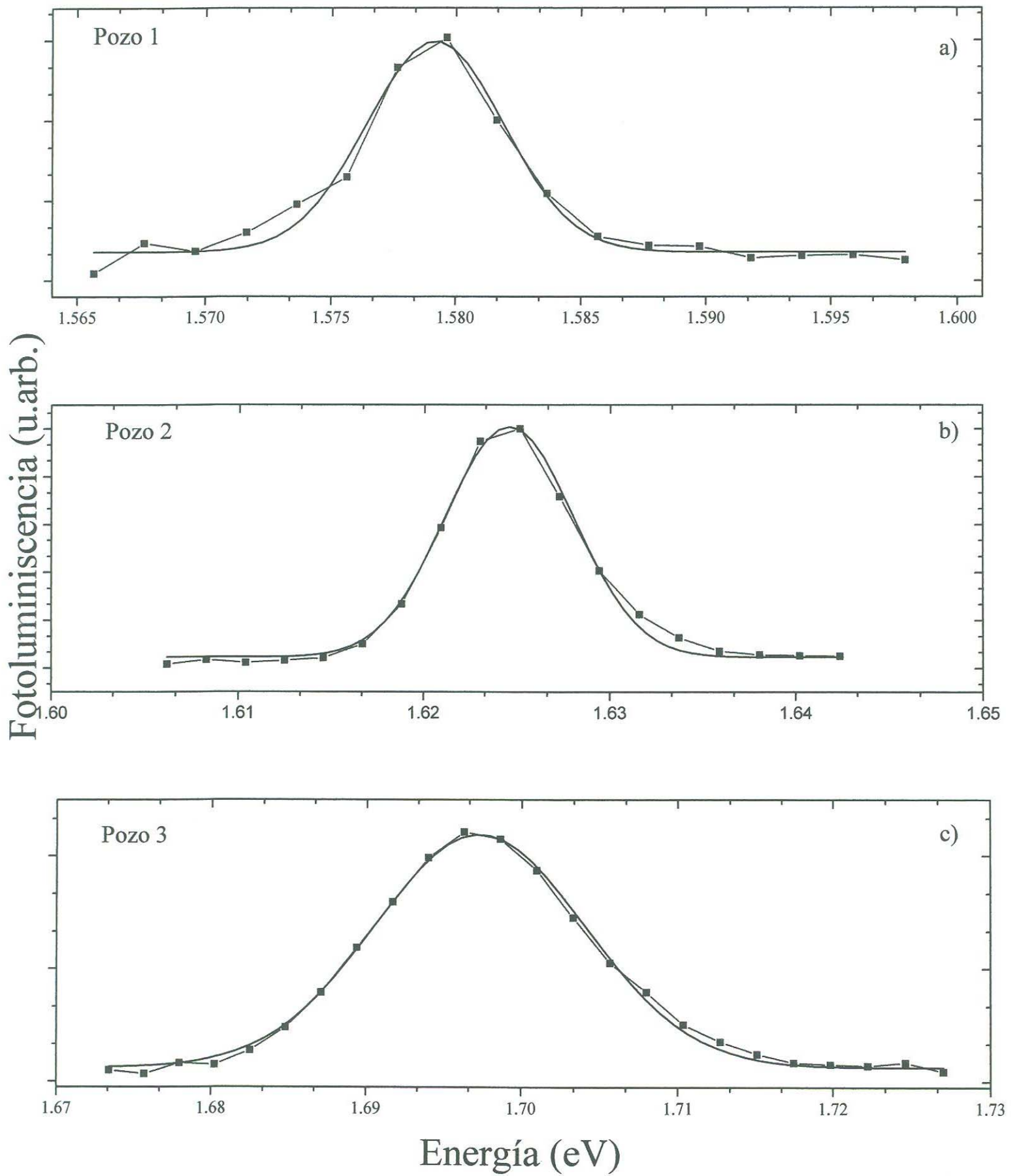


Fig 5.7 Ajustes del espectro de FL de la muestra 1

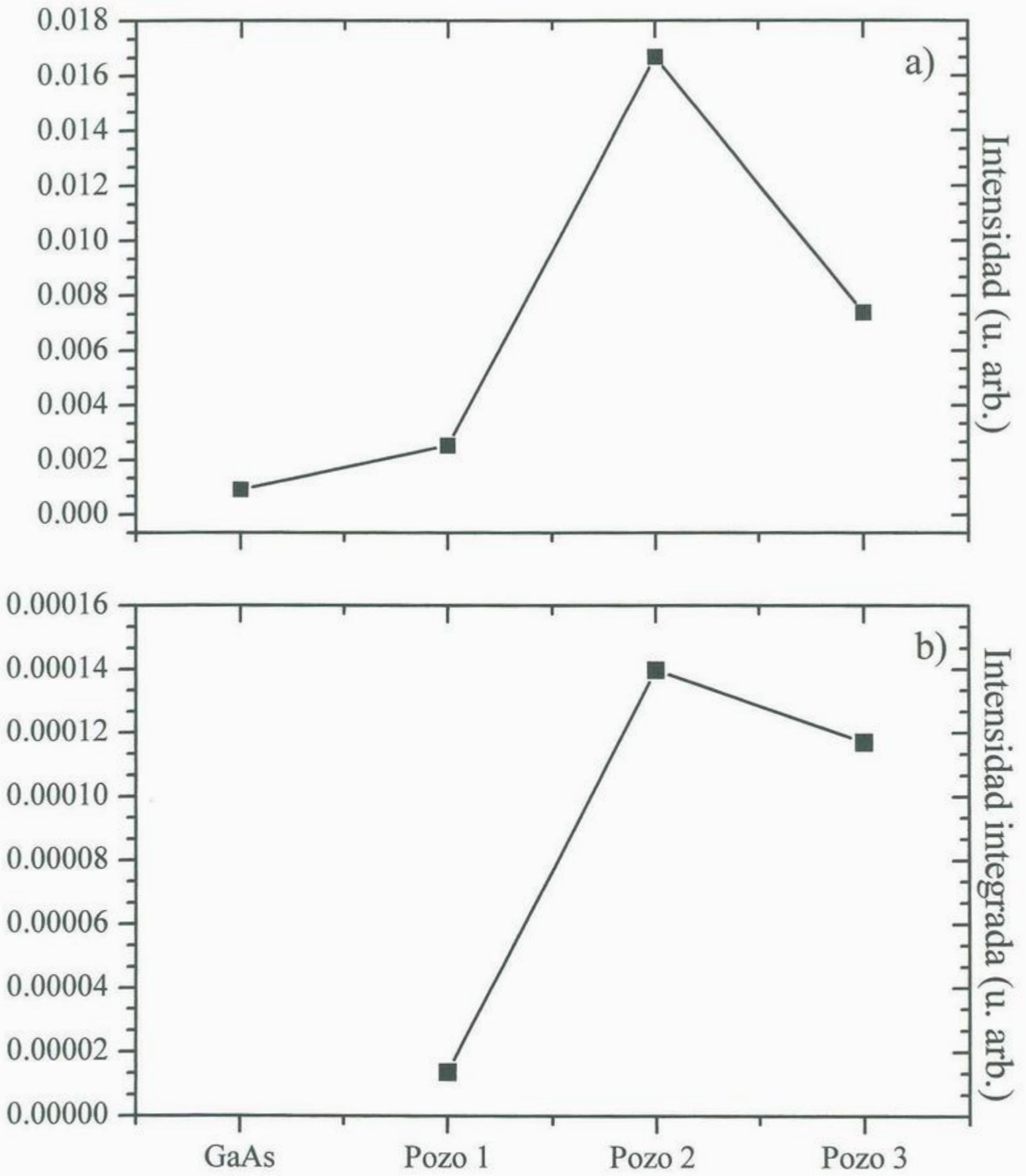


Fig. 5.8 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 1

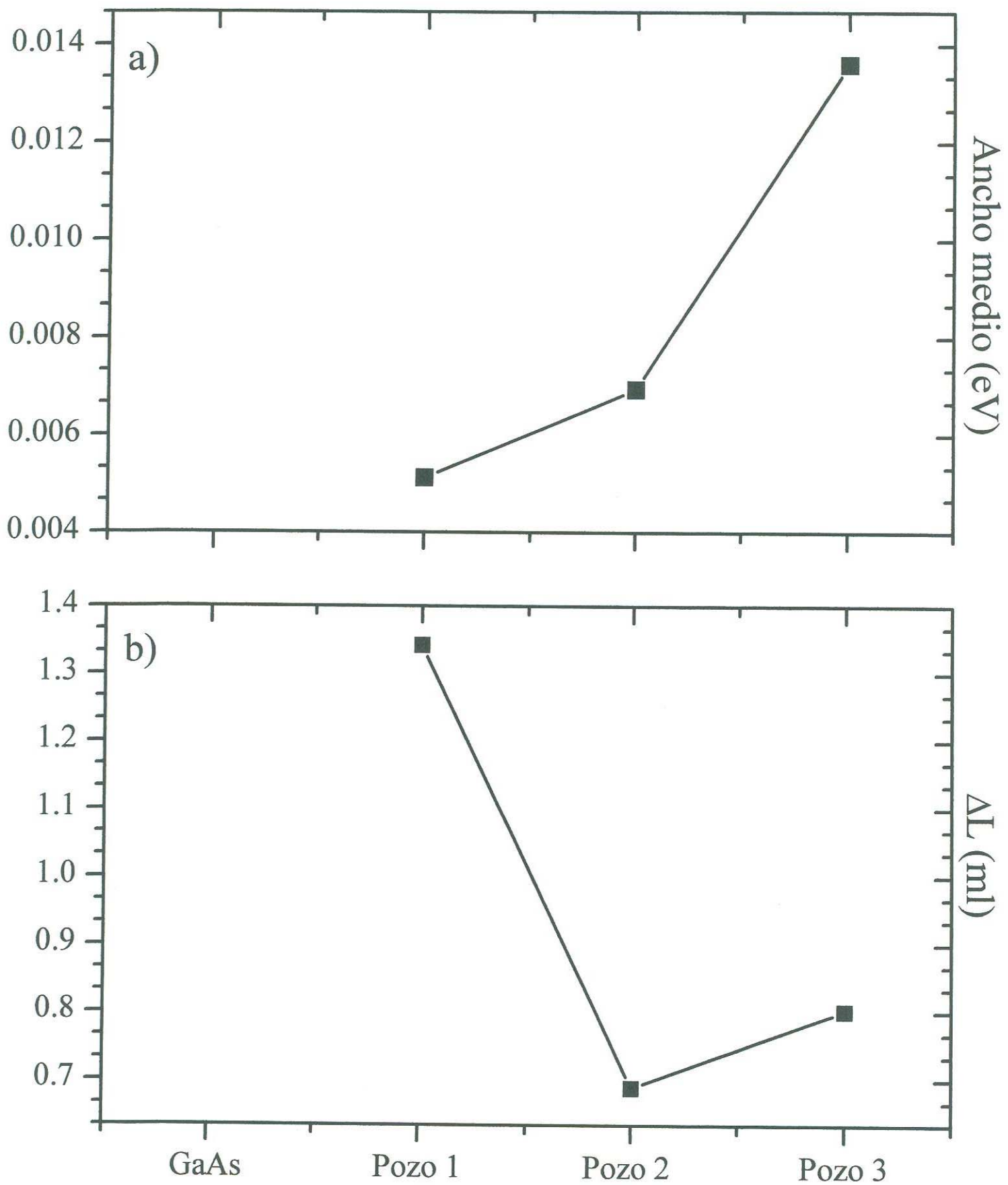
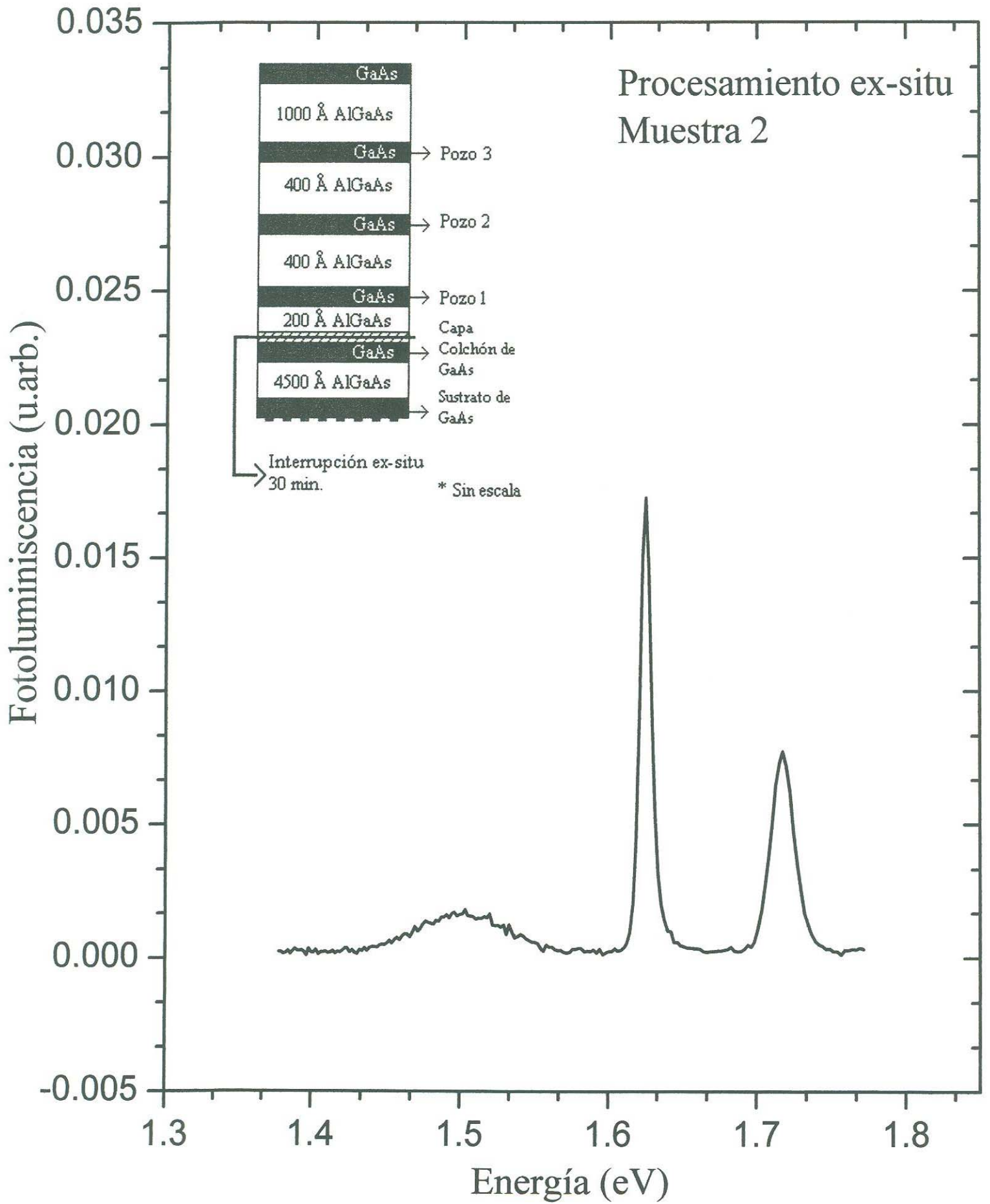


Fig. 5.9 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 1



5.10 Espectro de FL a 77K de la muestra 2

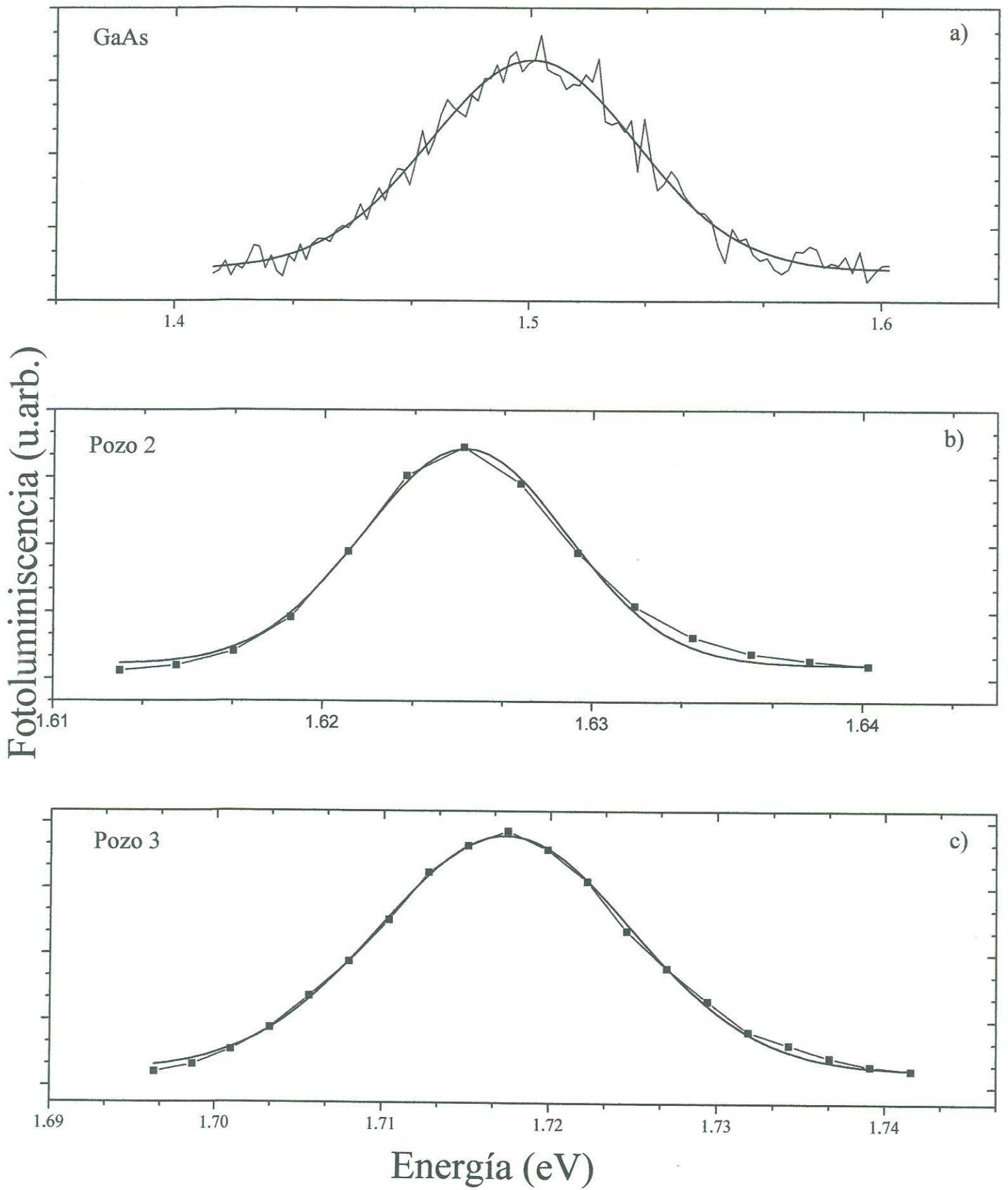


Fig. 5.11 Ajustes del espectro de Fl de la muestra 2

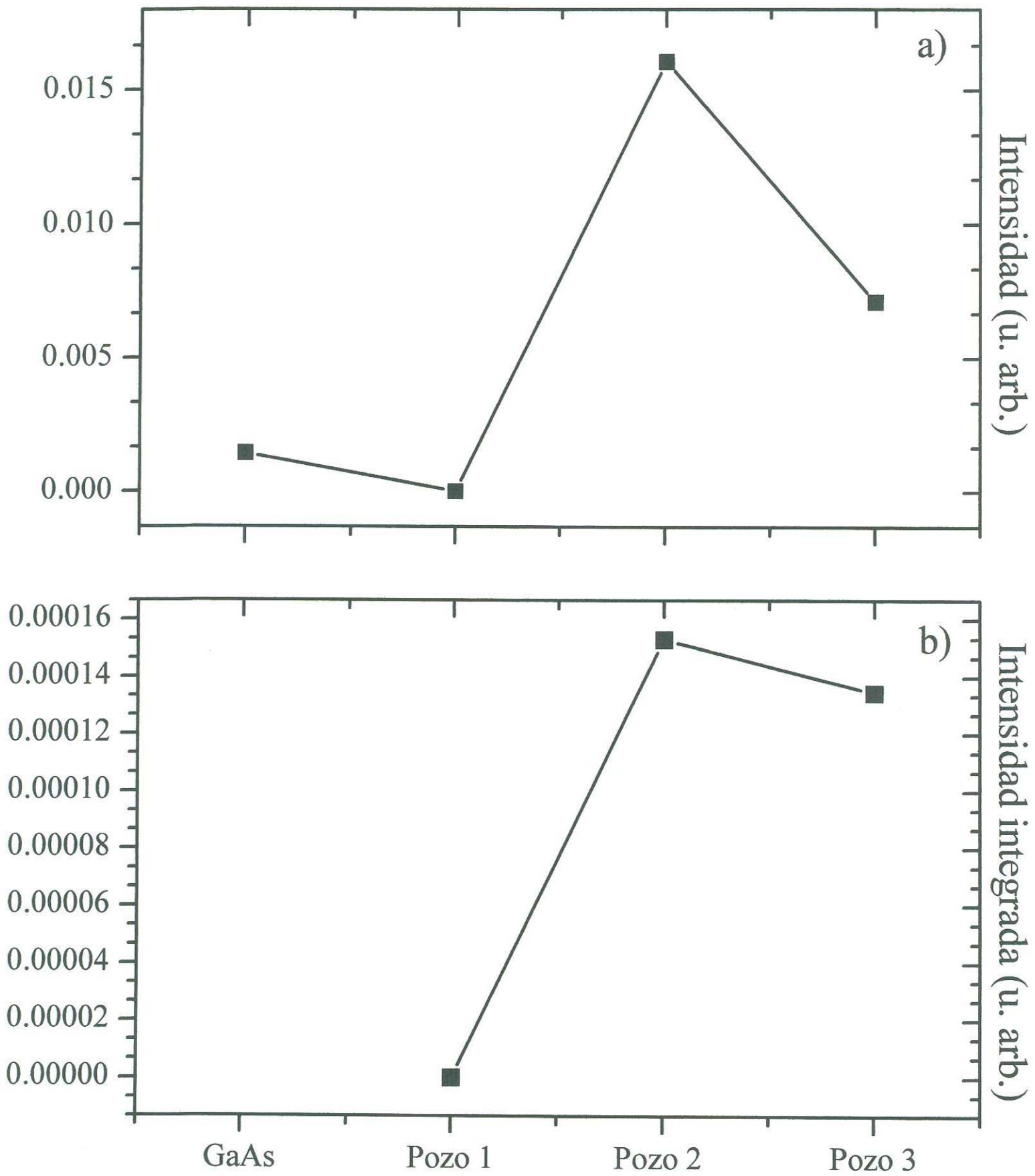


Fig. 5.12 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 2

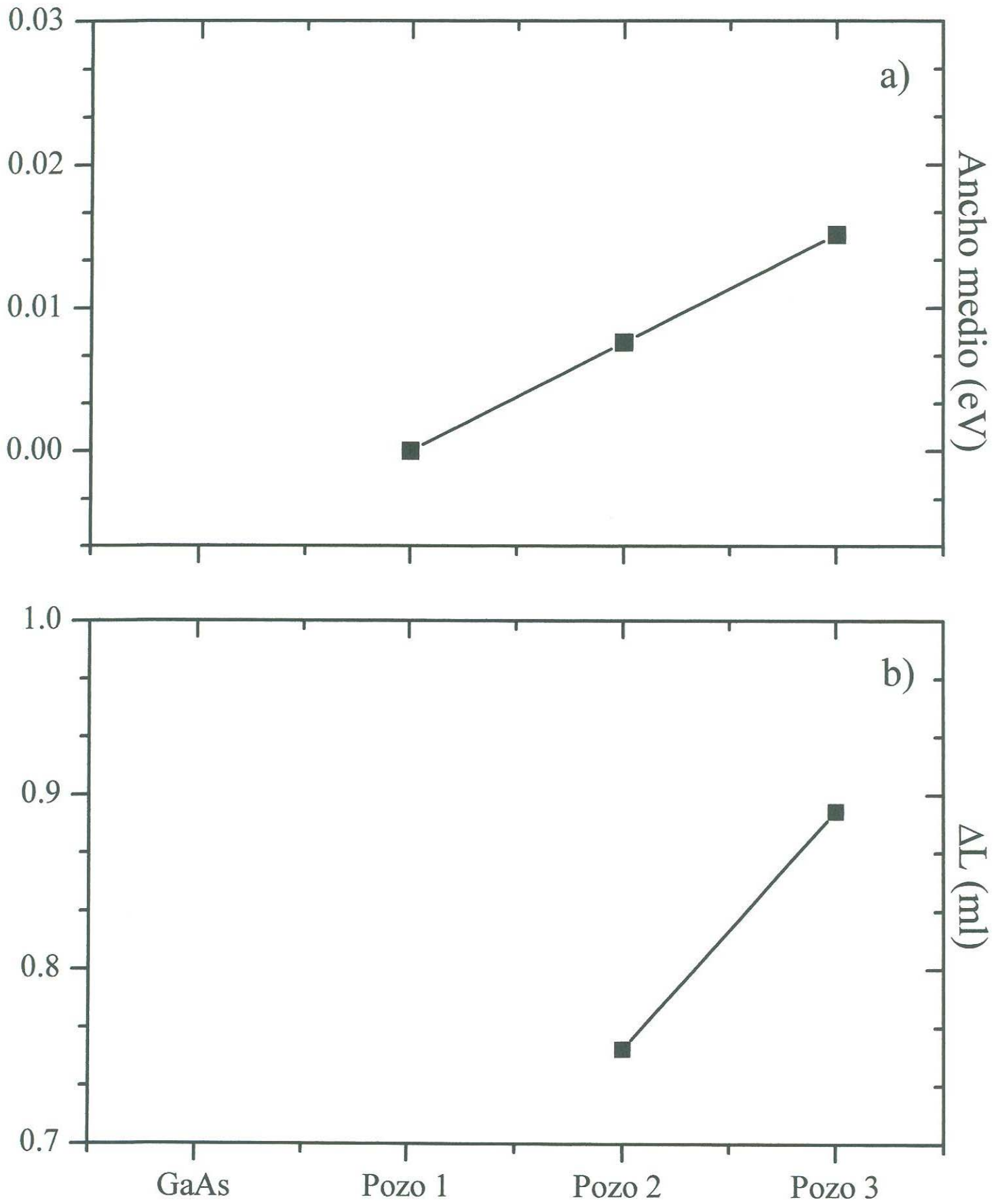


Fig. 5.13 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 2

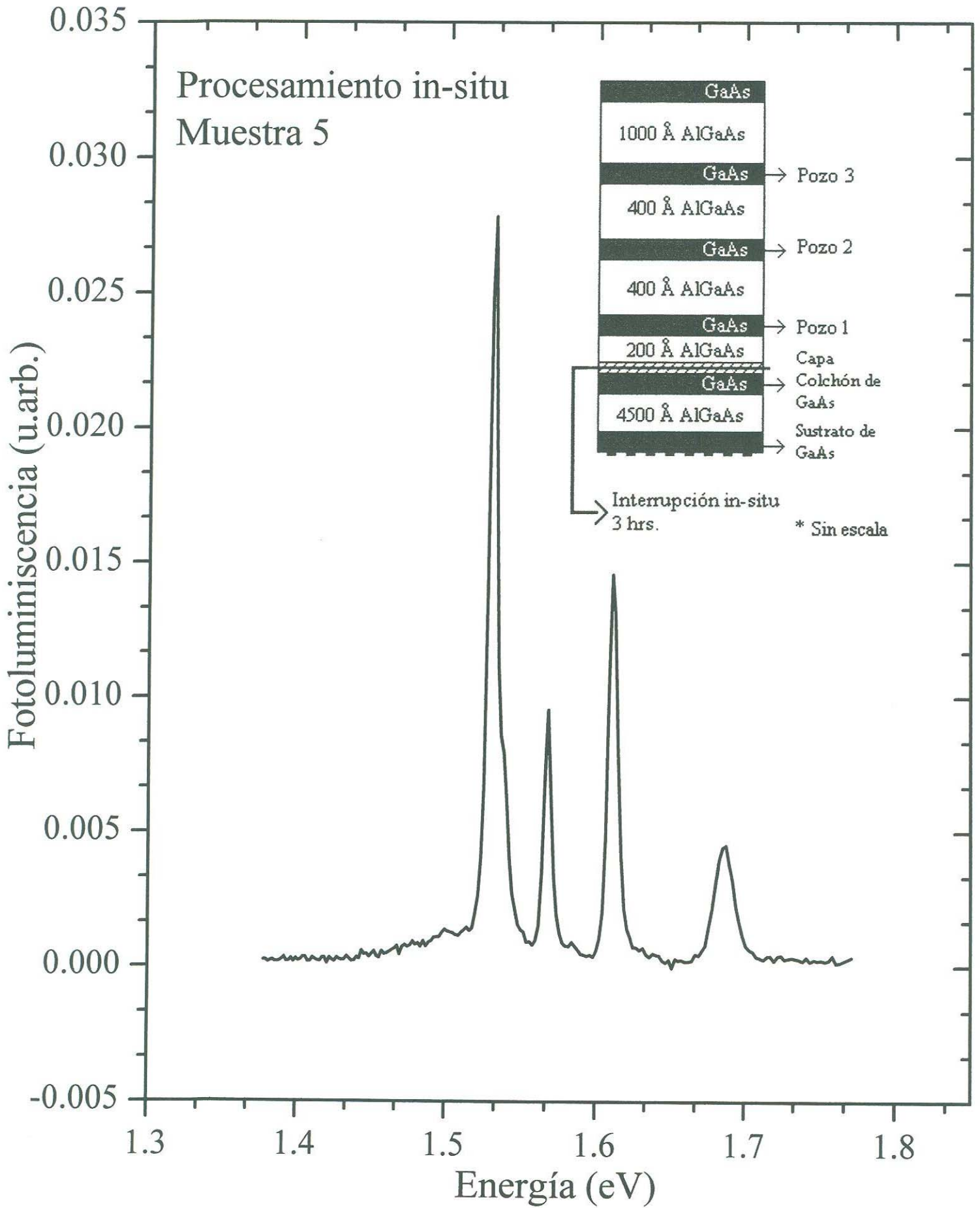


Fig. 5.14 Espectro de FL a 77K de la muestra 5

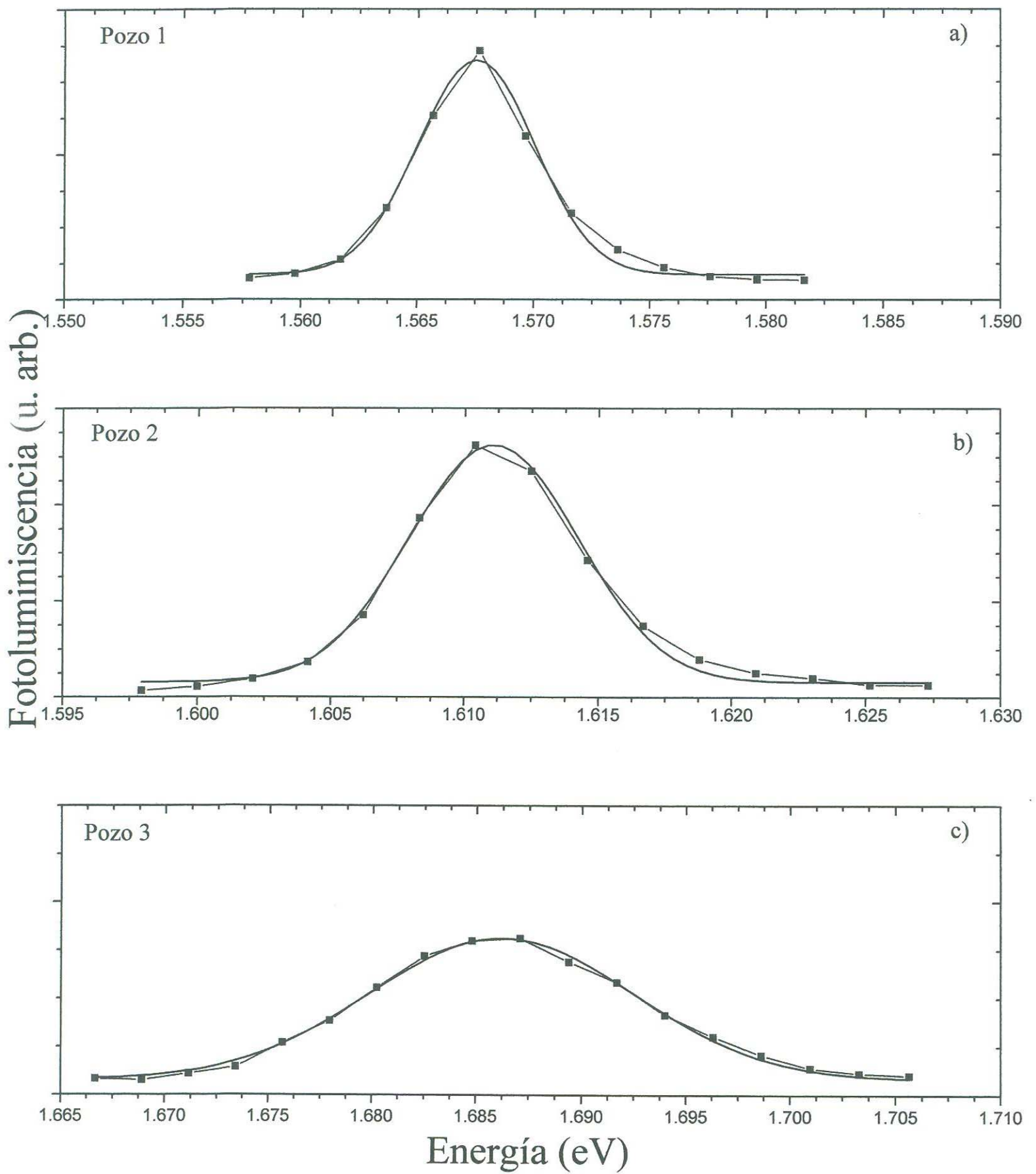


Fig. 5.15 Ajustes del espectro de FL de la muestra 5

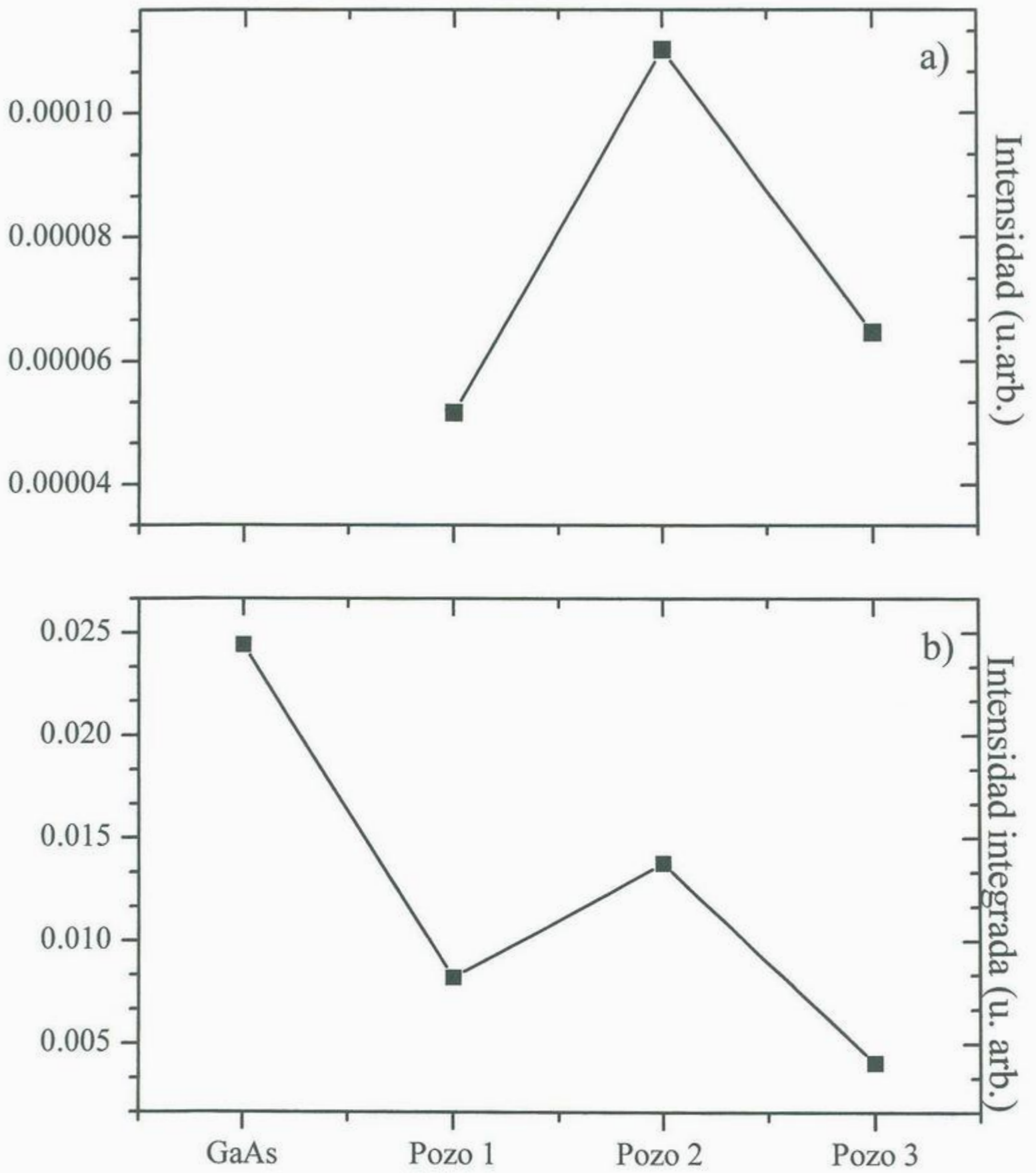


Fig. 5.16 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 5

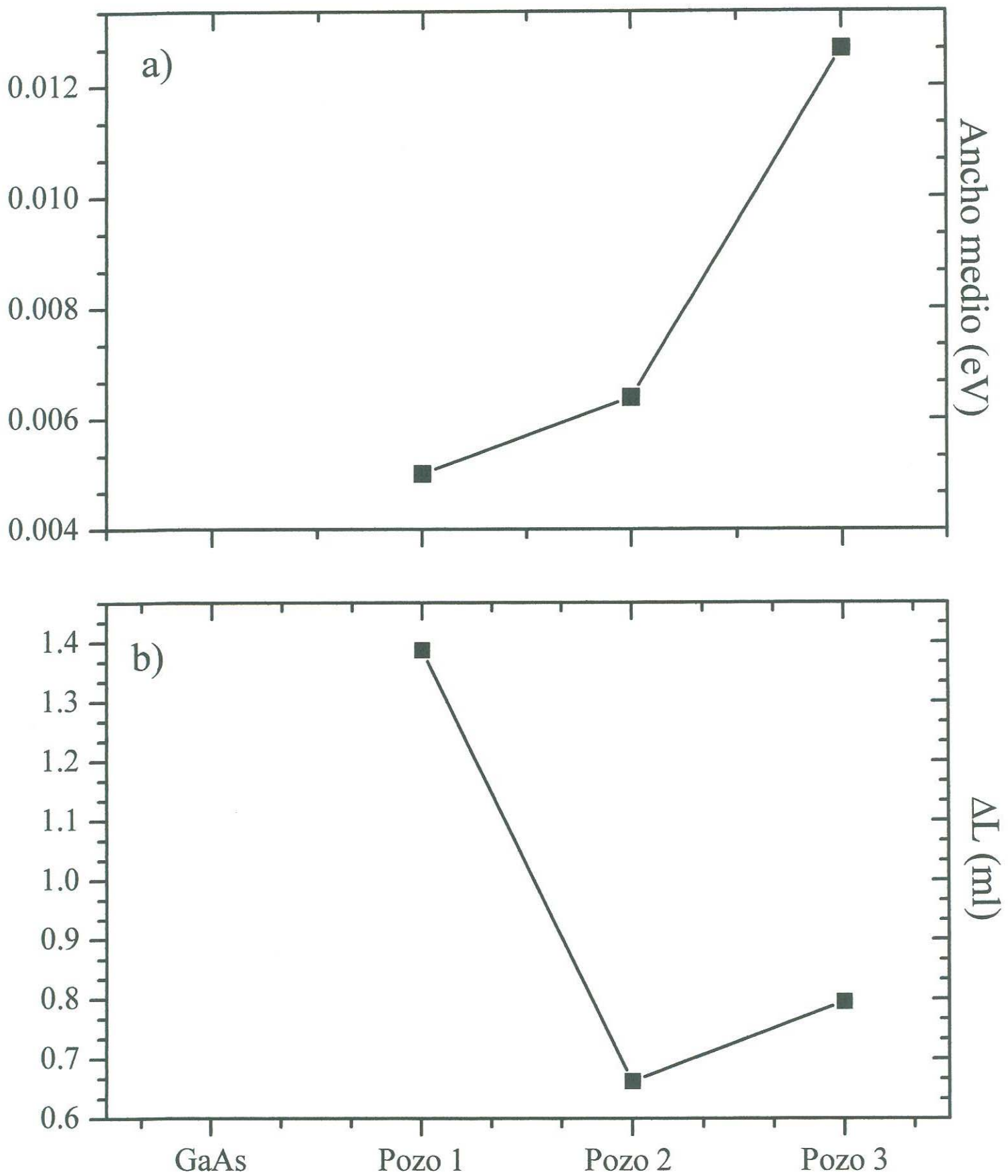


Fig. 5.17 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 5

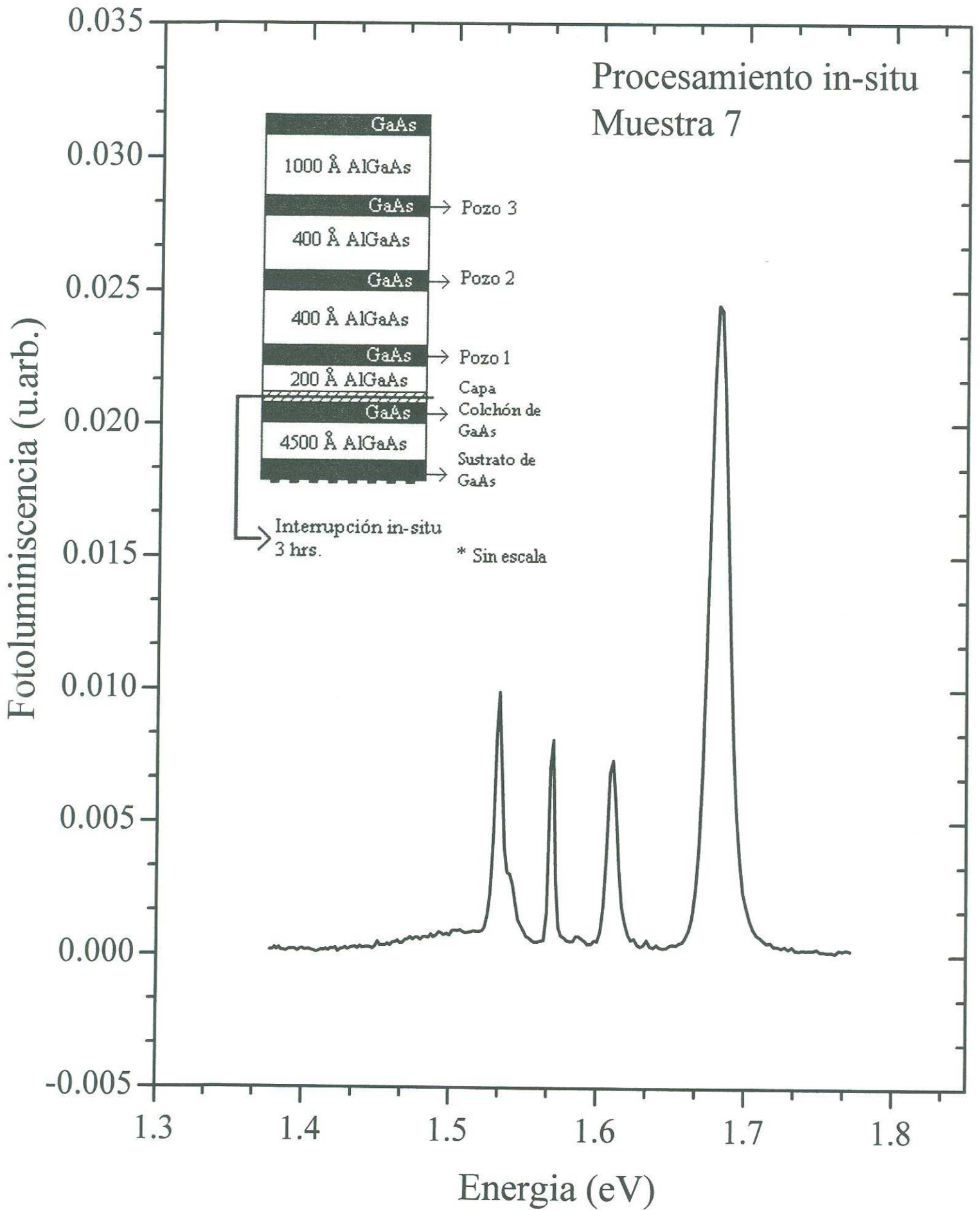


Fig. 5.18 Espectro de FL a 77K de la muestra 7

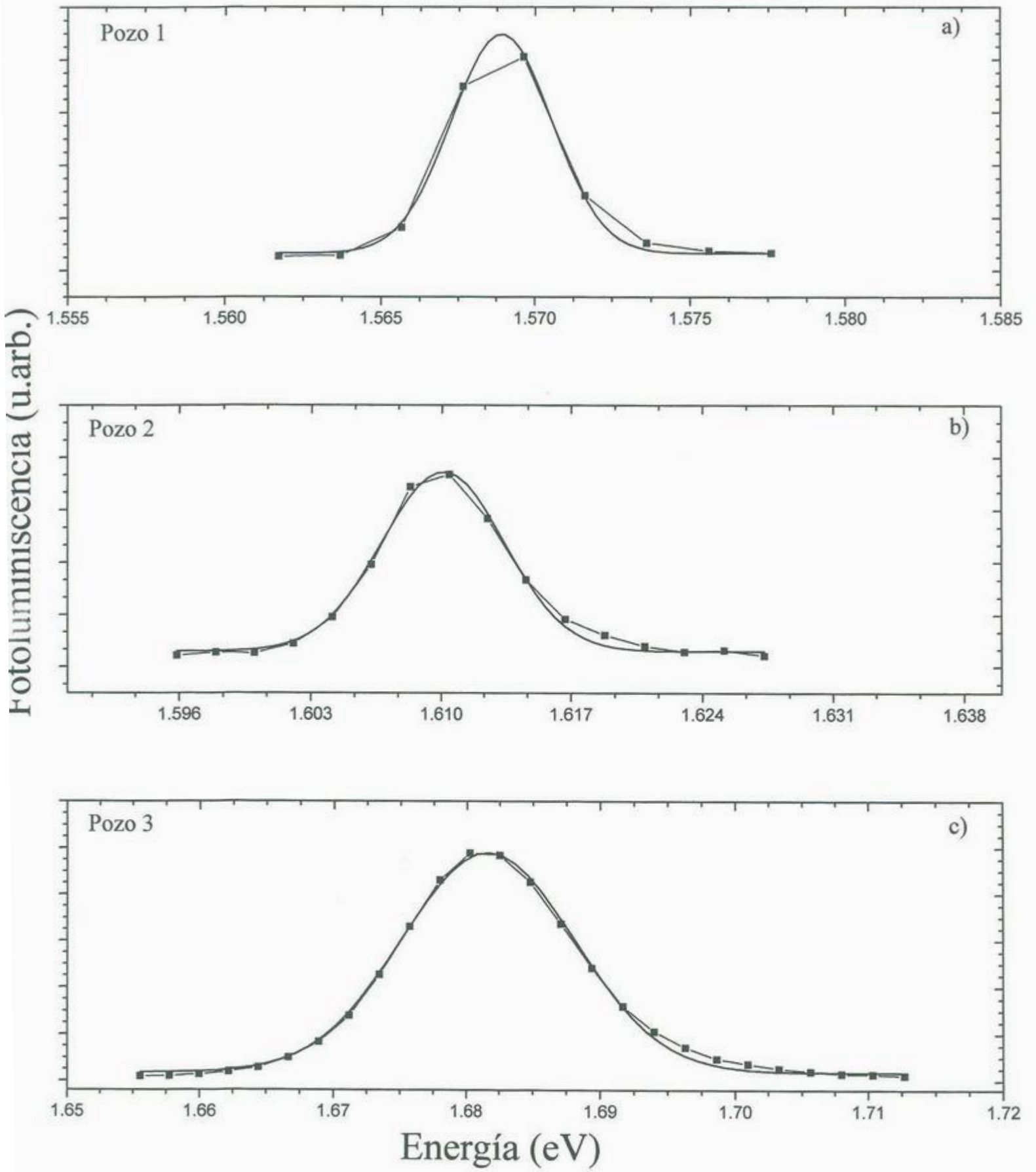


Fig. 5.19 Ajustes del espectro de Fl dela muestra 7

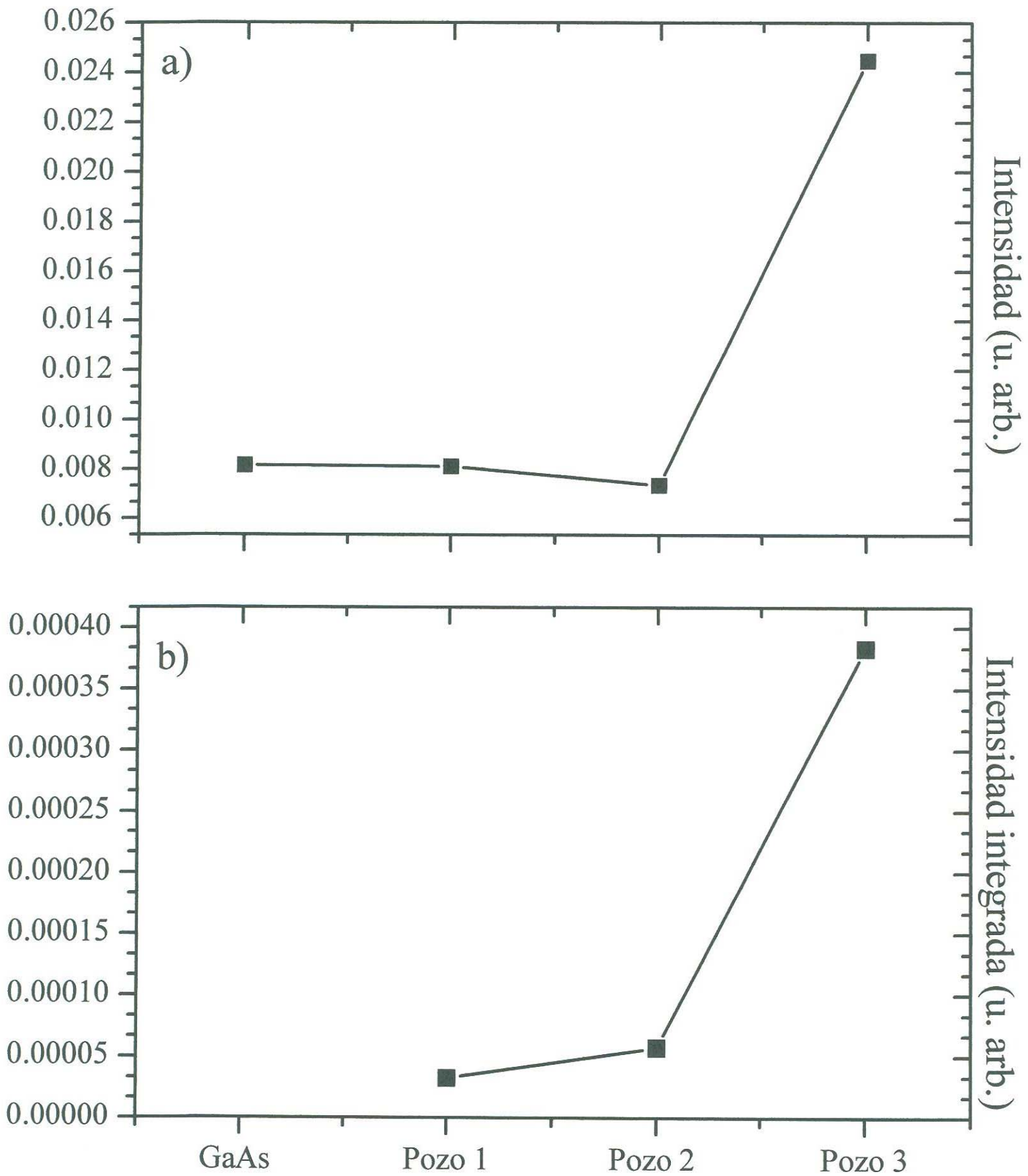


Fig. 5.20 Gráficas de la intensidad de las emisiones e intensidad integrada de los pozos de la muestra 7

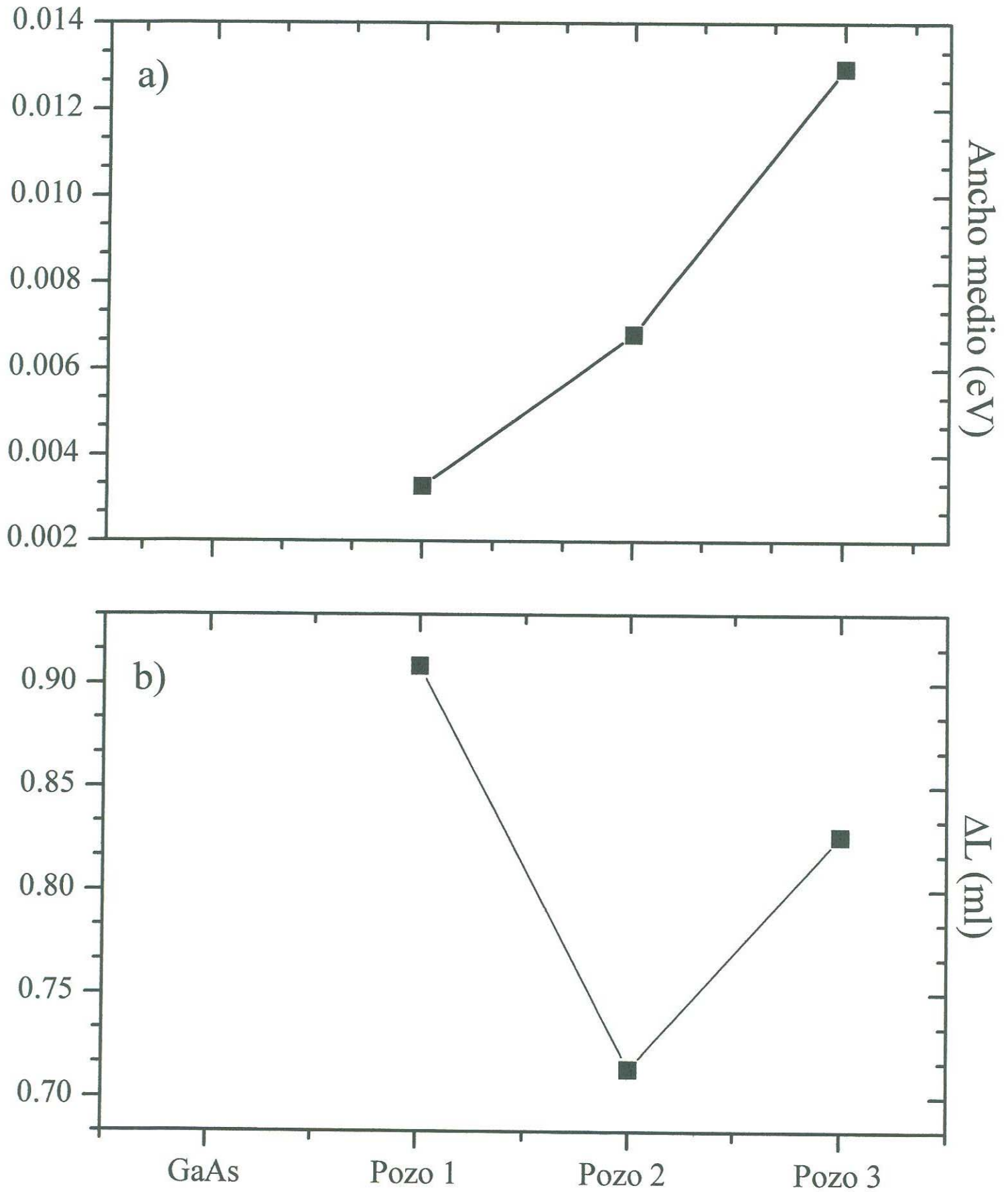


Fig. 5.21 Gráficas del ancho medio y de la rugosidad de los pozos de la muestra 7

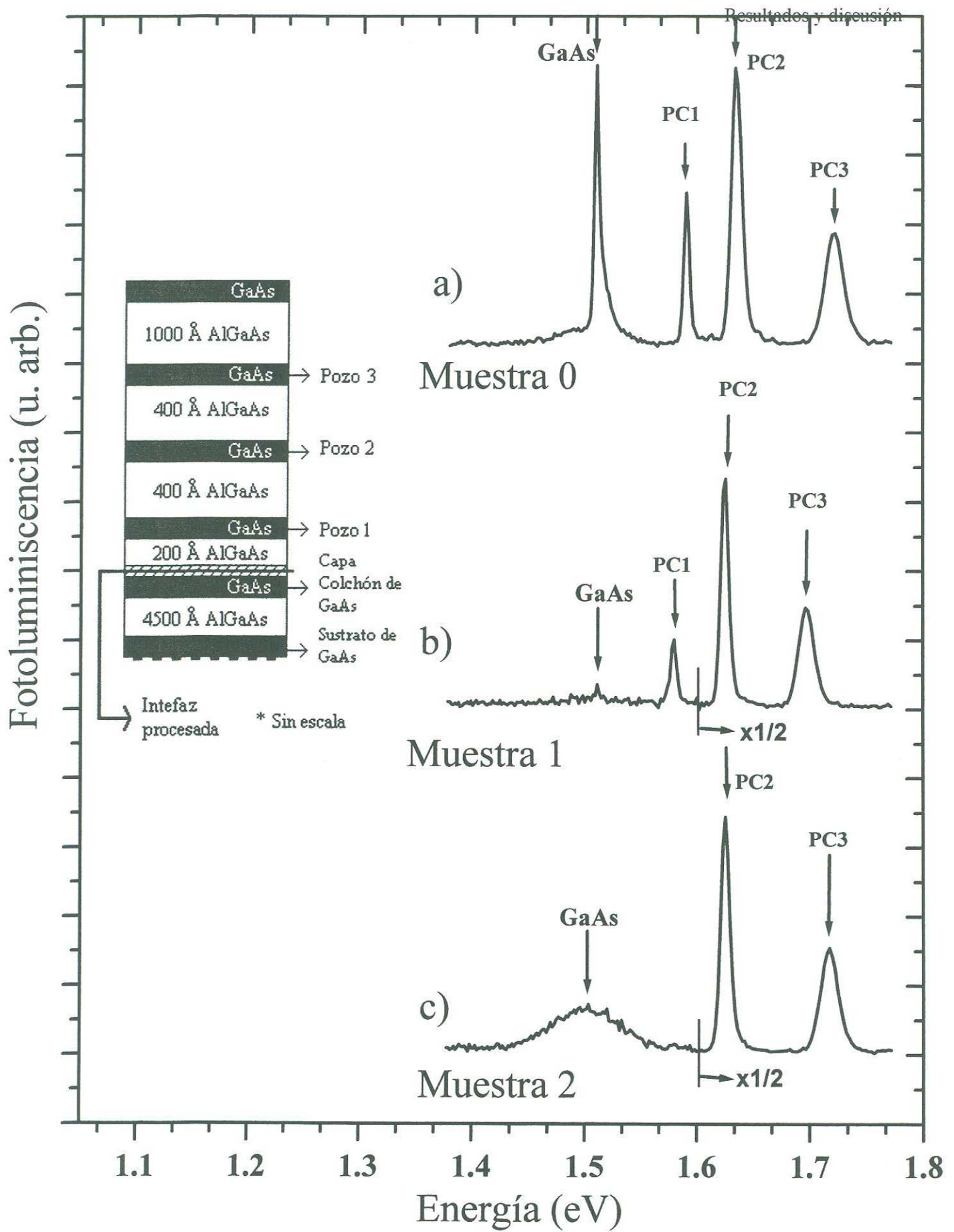


Fig. 5.22 Espectros de FL a 77K de la muestra de referencia y las muestras procesadas ex-situ

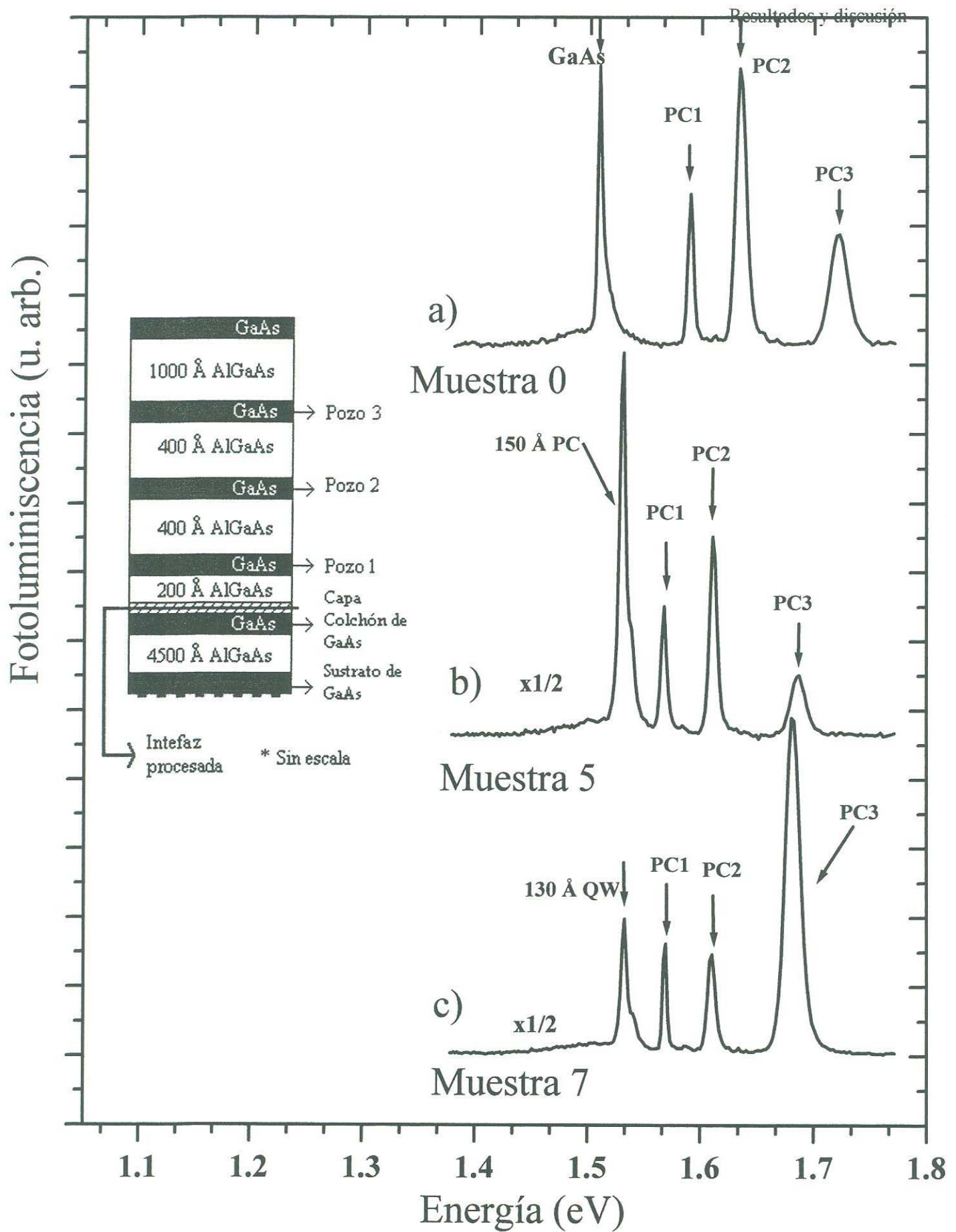


Fig. 5.23 Espectros de FL a 77K de la muestra de referencia y las muestras procesadas in-situ

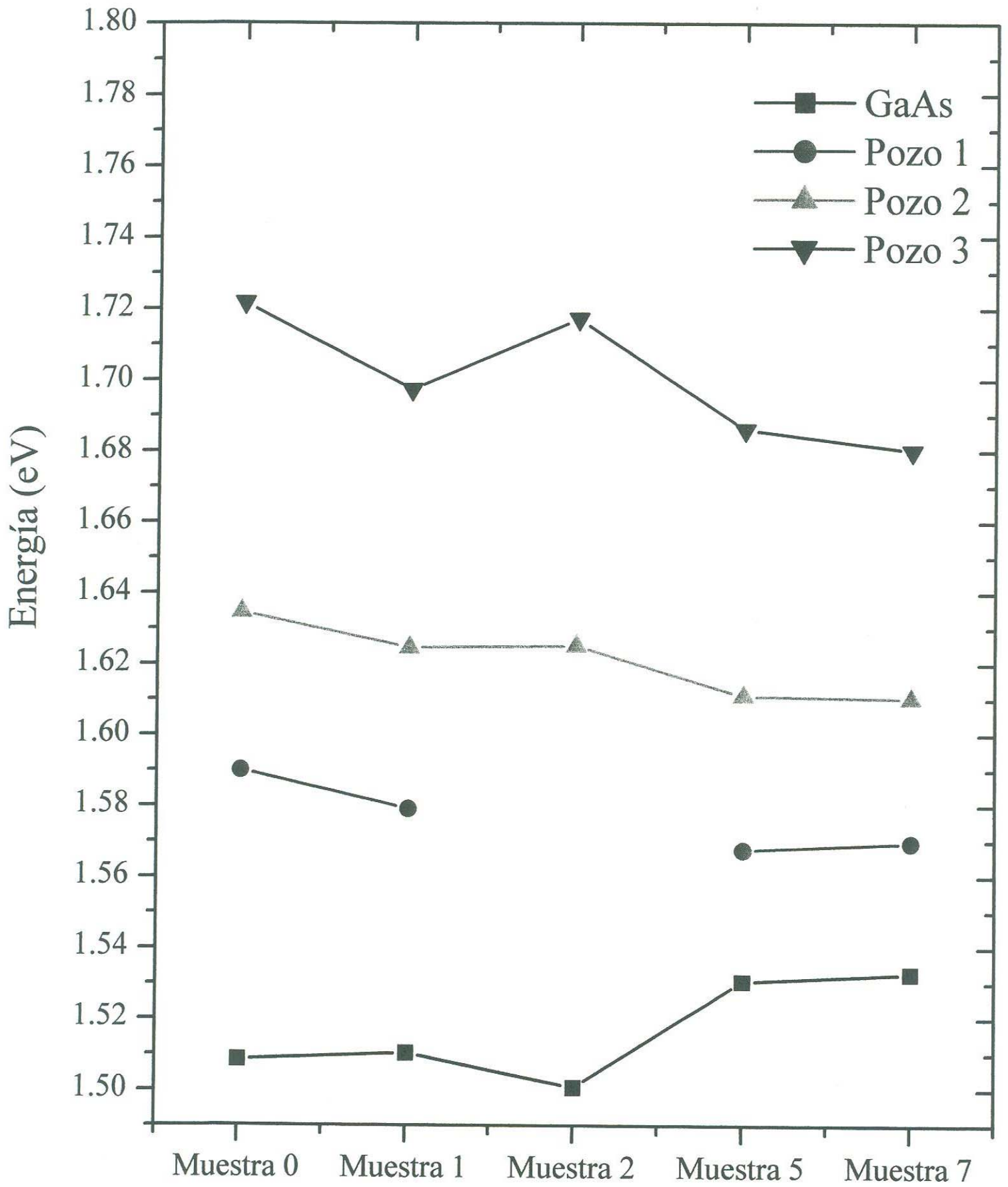


Fig 5.24 Posición de la energía de cada una de las emisiones para las distintas muestras

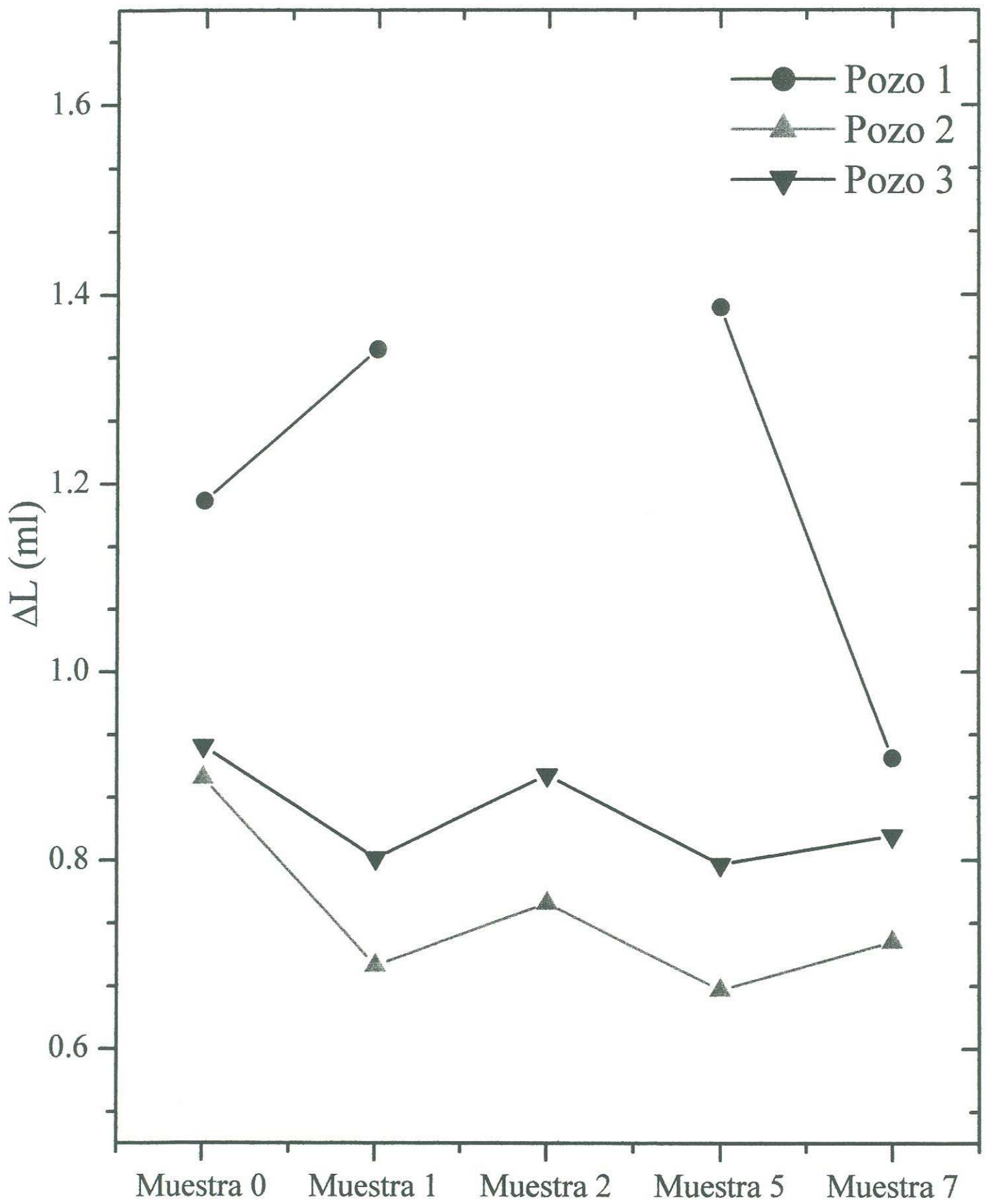


Fig 5.25 Rugosidad de cada pozo de las muestras estudiadas

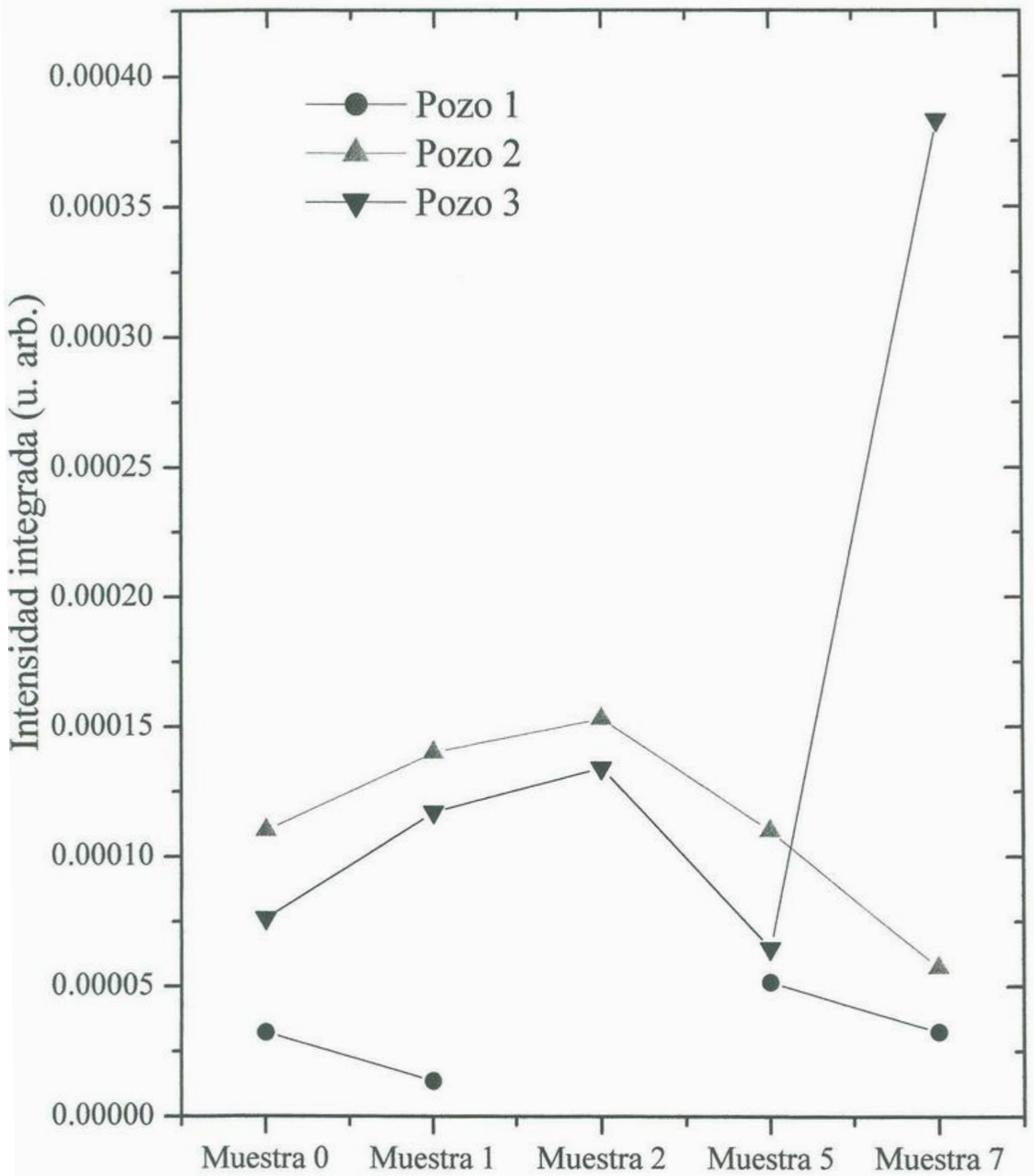


Fig 5.26 Intensidad integrada de cada uno de los picos de las muestras estudiadas

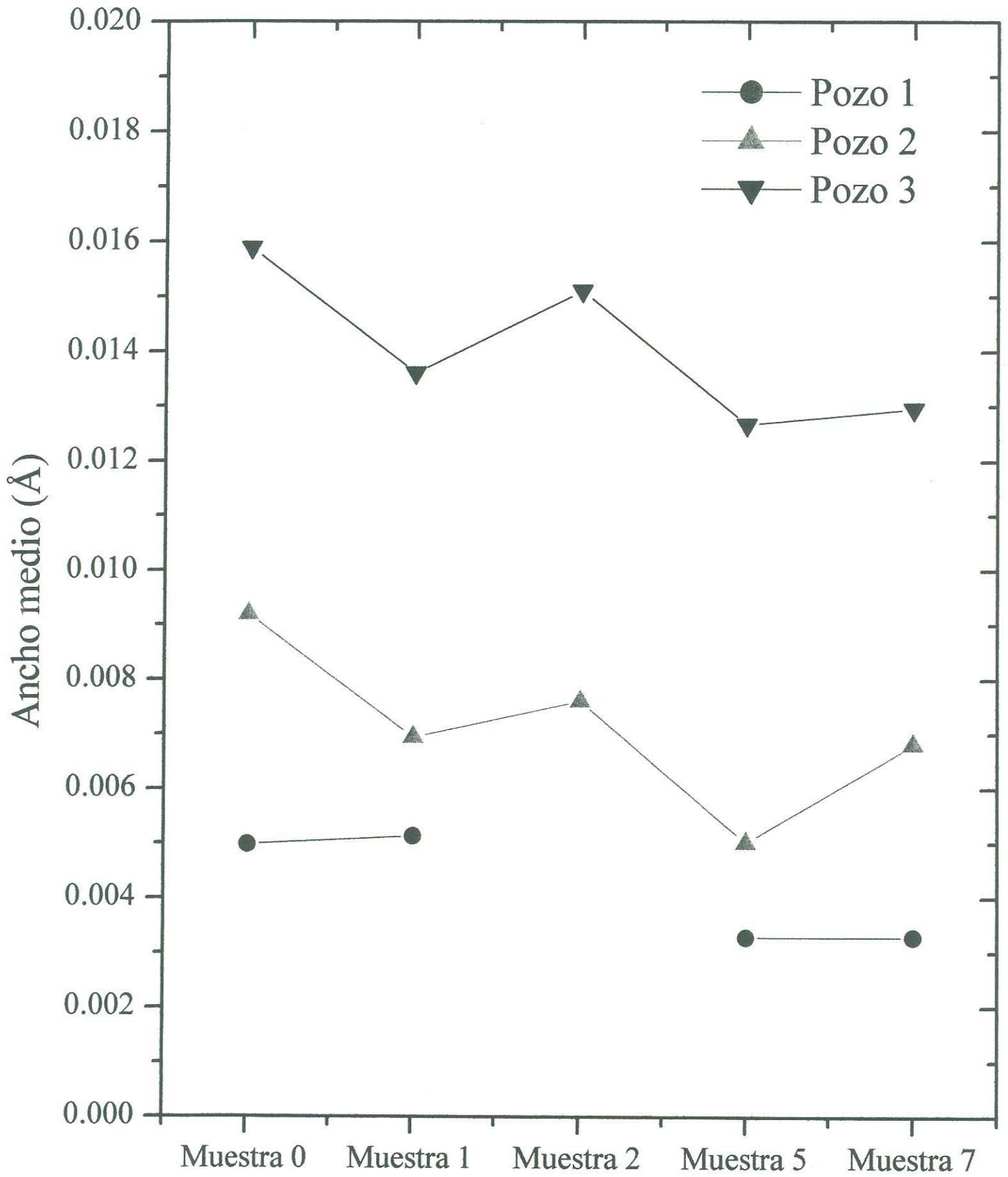


Fig. 5.27 Ancho medio obtenido a partir de los ajustes de cada pozo para las muestras estudiadas

6**Conclusiones**

1. El proceso ex-situ daña fuertemente las propiedades de la capa colchón de GaAs
2. El daño por el procesamiento ex-situ se extiende hasta el primer pozo cuántico.
3. Al aumentar el espesor de la capa colchón el daño por el procesamiento ex-situ disminuye.
4. El procesamiento in-situ es superior a los procesamientos ex-situ. Con los procesos in-situ, no se observa daño aparente a la capa colchón ni a los pozos cuánticos.
5. Para los procesamientos in-situ, la terminación de la superficie de la capa con una reconstrucción c(4x4) da los mejores resultados. Esto es probablemente debido a que el exceso de As en esta reconstrucción actúa como capa protectora.

Trabajos a futuro.

1. Se realizará un análisis de los campos eléctricos internos mediante la técnica de Fotorreflectancia. Con esta técnica se determinará el contenido real de Aluminio.
2. Se obtendrán imágenes de la interfaz de la capa colchón y el primer pozo mediante SEM (Scanning Electron Microscopy)

A1

Aproximaciones

A.1

La clave para el entendimiento de las propiedades ópticas y electrónicas de los sólidos es la teoría de bandas, que describe las propiedades de los electrones ante un potencial periódico.

El problema resulta altamente complicado, no sólo por el gran número de cuerpos que interaccionan al formar un sólido, sino por que aun no ha sido posible conocer con exactitud la naturaleza de todas las interacciones presentes. El desarrollo de la teoría actual está basado en diversas aproximaciones consideradas a priori, cuya validez ha sido probada mediante experimentación.

La descripción del electrón en un material periódico se obtiene mediante la ecuación de Schrödinger:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

donde $V(\vec{r})$ es el potencial de interacción, para el cual existen diversas aproximaciones (véase Solid State /Ashcroft-Mermin). Debido a la periodicidad R del material cristalino se tiene que $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{R})$.

En el caso para el que $V(\vec{r}) = 0$ se tiene que

$$\Psi = \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{Vol.}} \quad \text{y} \quad \vec{p} = \hbar^2 \vec{k}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}.$$

En un cristal se espera que la densidad de probabilidad ($\Psi^*\Psi$) sea la misma para cada celda unitaria, porque éstas son idénticas entre sí. El formulismo matemático de esta afirmación se conoce como el Teorema de Bloch, el cual se expresa de la siguiente manera:

“ Las eigenfunciones de la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico son el producto de una onda plana $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ y una función $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ con la misma periodicidad R que la del potencial periódico”. Por lo tanto

$$\Psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

es la forma de la función de onda electrónica donde:

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R})$$

A1.1 Masa efectiva.

Consideremos ahora una fuerza externa (eléctrica o magnética) aplicada al cristal; si el potencial de las fuerzas aplicadas no varía de manera apreciable a lo largo de distancias interatómicas, es posible representar el efecto de todas las fuerzas periódicas en el cristal mediante un parámetro llamado “masa efectiva m^* ”.

Para comprender mejor el movimiento de un electrón en esta situación, se deberá localizar la función de onda superponiendo soluciones con distintos valores de k . Si se hace esto, la velocidad de grupo asociada con el “paquete de ondas” del electrón es:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$

donde ω es la frecuencia angular, la cual se relaciona con la energía mediante la relación $E = \hbar\omega$, por lo tanto:

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}$$

concluyéndose que la velocidad es proporcional a la pendiente de la curva E contra k , es decir depende directamente de la estructura de bandas del material ($E = E(k)$).

Al aplicar un campo externo al electrón, se producirá un trabajo ($F_{\text{ext}}dx = F_{\text{ext}}v_g dt$), el cual se traduce en un incremento en la energía cinética:

$$dE = F_{\text{ext}} v_g dt = \frac{dE}{dk} dk = F_{\text{ext}} \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} dt$$

de la ecuación anterior se puede obtener:

$$F_{\text{ext}} = \hbar \frac{dk}{dt}$$

Esta ecuación es equivalente a la segunda ley de Newton, por lo tanto si

$$F = m \frac{dv}{dt}$$

Teniendo en cuenta que F_{ext} corresponde solo a la fuerza externa aplicada al electrón y F corresponde a la fuerza externa más las internas y producidas por las interacciones entre el electrón considerado y los electrones del sólido (F = fuerza total), entonces la aceleración de grupo es:

$$a_g = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dt} \left(\frac{dE}{dk} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{dk}{dt} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

de la expresión anterior y la de la fuerza externa tenemos que:

$$a_g = \frac{F_{\text{ext}}}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

de modo que F_{ext} se puede expresar como:

$$F_{\text{ext}} = \frac{\hbar^2}{(d^2 E/dk^2)} a_g$$

De la comparación formal con la segunda ley de Newton podemos definir a

$$m^* = \frac{\hbar^2}{(d^2 E/dk^2)}$$

como la “masa efectiva”.

Para utilizar la imagen clásica de electrones de conducción para el movimiento de electrones en un sólido cristalino es necesario utilizar en lugar de la masa del electrón libre m , la masa conocida como masa efectiva m^* . Esto significa que las principales características cuánticas de movimiento de los electrones en el sólido quedan incluidas en m^* .

Cabe señalar que la masa gravitacional nada tiene que ver con la masa efectiva, a menos que en realidad el electrón sea libre, ie. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$. Si se presenta el caso en el que

E es una función parabólica de k , de la forma:

$$E = A (k-k_0)^2$$

entonces $m^* = \frac{\hbar^2}{2A}$ y el comportamiento dinámico del electrón será como el de partícula

libre sólo con esta masa efectiva. Si la energía no es una función parabólica de k , entonces dicha masa no será constante con la energía y el comportamiento dinámico del electrón será de una masa variable complicándose con ello la situación. En cualquier caso, para una primera aproximación, todo el efecto del potencial del cristal periódico reside en sustituir la masa del electrón libre por una masa efectiva.

A.1.2 Aproximación de la función envolvente.

Esta aproximación sólo es válida para el caso de heteroestructuras con interfaces abruptas como las descritas en la sección 3.1. Es decir, se considera que en las interfaces no hay mezclas de estados entre un material y otro, que la constante de red de ambos materiales es aproximadamente igual y que ambos materiales cristalizan con la misma estructura. Otra característica necesaria para poder aplicar esta aproximación es que ambos materiales posean una estructura de bandas muy similar y se restringe a la vecindad de los puntos de alta simetría de la zona de Brillouin (Γ , X , L). A pesar de estas restricciones, su ventaja radica en la sencillez y versatilidad que presenta.

Para el caso de pozos cuánticos de AlGaAs/GaAs crecidos por MBE, es posible hacer uso de esta aproximación pues cumple con todos los requerimientos de la aproximación; aunado a esto las propiedades ópticas de ambos materiales y de transporte se sitúan en el punto Γ , por lo que no se necesita ningún desarrollo fuera de ese punto.

Para una heteroestructura formada por capas de materiales A y B, las suposiciones claves de este modelo son:

- i) Dentro de cada capa la función de onda se desarrolla en las partes periódicas de las funciones de Bloch de los bordes a considerar:

$$\Psi(\bar{r}) = \sum_l f_l^{(A)} u_{l,\bar{k}_o}^{(A)}(\bar{r})$$

si \bar{r} corresponde a la capa de A y

$$\Psi(\bar{r}) = \sum_l f_l^{(B)} u_{l,\bar{k}_o}^{(B)}(\bar{r})$$

si \bar{r} corresponde a la capa de B.

En ambas ecuaciones \bar{k}_o corresponde a un punto de simetría dentro de la zona de Brillouin alrededor del cual están construidas las interfaces.

- ii) Las partes periódicas de las funciones de Bloch se consideran iguales en cada una de las diferentes capas de la heteroestructura:

$$u_{l,\bar{k}_o}^{(A)}(r) = u_{l,\bar{k}_o}^{(B)}(r)$$

Por lo tanto la función de onda de la heteroestructura puede ser escrita como:

$$\Psi(\bar{r}) = \sum_l f_l^{(A,B)}(\bar{r}) u_{l,\bar{k}_o}(\bar{r})$$

y el objetivo principal será entonces determinar la función $f_l^{(A,B)}(\bar{r})$

Una de las consecuencias de considerar a las funciones de Bloch idénticas es que, si consideramos a \hat{z} como el eje de crecimiento y a \bar{z}_o como el plano de separación entre A y B, dado que las $u_{l,o}$ son independientes y las $\Psi(\bar{r})$ deben ser continuas en, entonces:

$$f_l^{(A)}(\bar{r}_\perp, \bar{z}_o) = f_l^{(B)}(\bar{r}_\perp, \bar{z}_o)$$

donde \bar{r}_\perp es un vector de posición bi-dimensional. Dado que las constantes de red son iguales (al menos en el plano de crecimiento), la heteroestructura se vuelve invariante ante traslaciones con respecto al plano de crecimiento, de modo que las f_l 's pueden factorizarse como:

$$f_l^{(A)}(\bar{r}_\perp, z) = \frac{e^{i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp}}{\sqrt{A}} \chi_l^{(A)}(z)$$

$$f_l^{(B)}(\bar{r}_\perp, z) = \frac{e^{i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp}}{\sqrt{A}} \chi_l^{(B)}(z)$$

o resumidamente:

$$f_l^{(A,B)}(\bar{r}_\perp, z) = \frac{e^{i\bar{k}_\perp \cdot \bar{r}_\perp}}{\sqrt{A}} \chi_l^{(A,B)}(z)$$

donde A corresponde al área de la muestra y \overline{k}_\perp es un vector de onda bi-dimensional, que en ambas capas A y B resulta ser el mismo, para así poder lograr la invariancia traslacional en el plano. Vemos ahora que de esta consideración, el problema se ha simplificado a encontrar solo la $\chi_i^{(A,B)}(z)$.

Para los pozos cuánticos de AlGaAs/GaAs se utilizan los hamiltonianos de Ben Daniel Druke. Estas ecuaciones para la función envolvente $\chi_i(z)$, tanto para electrones como para los huecos tiene la forma:

$$\frac{-\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{m(z)} \frac{\partial \chi(z)}{\partial z} \right] + V(z) \chi(z) = E \chi(z)$$

donde:

$V(z) = \Delta E_c$ para los electrones y $V(z) = \Delta E_v$ para los huecos.

A2

Excitones

A.2 Excitones

El proceso de emisión radiativa es el contrario al proceso de absorción. Un electrón ocupando un nivel más alto de energía que el que le correspondería en condiciones de equilibrio, puede decaer a un estado de más baja energía desocupado, emitiendo total o parcialmente la diferencia de energía entre estos dos estados, mediante la emisión de radiación electromagnética.

La condición necesaria para la emisión es que el sistema no esté en un estado de equilibrio. Para ello se requiere alguna forma de excitación. Se conoce como luminiscencia al proceso de emisión de luz. Al caso específico de excitación mediante fotones (vía absorción) se le conoce como fotoluminiscencia.

En un material semiconductor de banda directa, es posible promover electrones de la banda de valencia a la banda de conducción mediante la absorción de fotones. Al ser promovido el electrón automáticamente se crea un estado vacío en la banda de valencia, estado mejor conocido como hueco, que por sus características, es considerado una partícula con carga eléctrica igual a la del electrón pero con el signo opuesto.

Es decir al absorber el fotón se tiene un electrón en la banda de conducción y un hueco en la banda de valencia. A este hecho se le conoce como la formación de un par electrón-hueco o excitón, pues ambas partículas mantienen entre sí una interacción coluombiana y es al recombinarse, que el proceso de emisión se produce.

Es debido a esta interacción atractiva que el electrón puede considerarse como si orbitara alrededor del hueco y describir al excitón como un átomo hidrogenoide con energía dada como:

$$E_x = \frac{-m_r^* q^4}{2\hbar^2 \epsilon^2}$$

donde ϵ es la constante dieléctrica del cristal y m_r^* es la masa reducida dada por:

$$m_r^* = \frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*}$$

con m_e^* = masa efectiva del electrón y m_h^* = masa efectiva del hueco.

El par electrón-hueco se considera como un excitón libre, pues posee cierta movilidad, que le permite vagar en algunas regiones del cristal. Se conoce como excitones ligados cuando el par está formado por vacancias de un átomo aceptor con el cual está dopado el material y un electrón de la banda de conducción, o bien con un electrón proveniente de una impureza donadora y un hueco de la banda de valencia, estos excitones por su naturaleza, no poseen la libertad de vagar por el cristal.

Al considerar el modelo de Bohr para describir al excitón, se tiene que este posee una extensión lateral, es decir es posible asociarle un radio, que está dado como:

$$r_{exc} = \frac{\hbar^2 \epsilon}{q^2 m_r^*}$$



Referencias

- 1 Fundamentals of semiconductors.
 - 2 Journal of Applied Physices 58, R1-R29 (1985).
 - 3 Properties of GaAs 4.1, 145.
 - 4 Properties of GaAs 4.2, 151.
 - 5 Phy. Rev. B, Vol 9 (1974) , 5168-77
 - 6 Physica (Netherlands) vol. 34 (1967), 149.
 - 7 Phy. Rev. B, vol. 30 (1984), 1979.
 - 8 Phy. Rev. B, vol. 31 (1985), 947.
 - 9 Phy. Rev. B, vol. 35 (1987), 9174.
 - 10 Phy. Rev. B, vol. 31 (1985), 947.
 - 11 J. Vac. Sci. Tech., vol. 8 (1971), 31.
 - 12 Proc. Solid State Chemi., vol 10 (1975), 157.
 - 13 IEEE J. Quantum Electron, QE-22 (1986), 1611.
 - 14 J. Vac. Sci. Tech. B, vol. 19 (2001), 495.
 - 15 J. of Applied Phys., vol. 35 (1964), 1306.
 - 16 Semiconductors and semimetals, vol 8 (1972), 181.
 - 17 J. Applied Phys., vol. 75 (1994), 10.
 - 18 J. Appl. Phys. 70, vol. 2 (1981), R1
- Peter Yu, Manuel Cardona.
Sadao Adachi.
Ed. M.R. Brozel and G.E. Stillman.
Ed. M.R. Brozel and G.E. Stillman.
D. Auvergne, J. Camassel, H. Matheiu, M. Cardona
Y.P. Varshni
L- Vina, S Logothetidis, M. Cardona.
S Logothetidis, L- Vina, M. Cardona.
P. Lautenschlager, M. GarrigaS Logothetidis, M. Cardona.
S Logothetidis, L- Vina, M. Cardona.
A. Cho
A. Cho, J. Arthur
L. Esaki
J. Luyo et al
E. Wood
Ed. R.K. Willardson, A.C. Beer
L. Pavesi, M. Guzzi
M.A. Herman, D.Bimberg, J. Christen