



Universitat de Barcelona
Facultat de Física
Departament de Física Aplicada i Electrònica

**OPTIMIZACIÓN DE TÉCNICAS ÓPTICAS Y ELÉCTRICAS
PARA EL ESTUDIO DE HETEROESTRUCTURAS BASADAS EN
COMPUESTOS III-V**

José BOSCH ESTRADA

Memoria presentada para optar
al grado de doctor en Ciencias Físicas

Barcelona, Septiembre 1993



Universitat de Barcelona
Facultat de Física
Departament de Física Aplicada i Electrònica

**OPTIMIZACIÓN DE TECNICAS OPTICAS Y ELECTRICAS
PARA EL ESTUDIO DE HETEROESTRUCTURAS BASADAS EN
COMPUESTOS III-V**

José BOSCH ESTRADA

Memoria presentada para optar
al grado de doctor en Ciencias Físicas

Barcelona, Septiembre 1993

Universitat de Barcelona
Facultat de Física
Departament de Física Aplicada i Electrònica

**OPTIMIZACIÓN DE TECNICAS OPTICAS Y ELECTRICAS
PARA EL ESTUDIO DE HETEROESTRUCTURAS BASADAS EN
COMPUESTOS III-V**

Programa de doctorat: Microelectrònica Física

Bienni: 88-90

Barcelona, Septiembre 1993

Autor: José BOSCH ESTRADA

Director Tesi: Dr. Pere ROURA GRABULOSA Tutor: Dr. Albert Cornet Calveras

En Dr. Pere ROURA GRABULOSA, Professor Titular de la Facultat de Física de la Universitat de Barcelona:

CERTIFICA que la memòria "OPTIMIZACIÓN DE TECNICAS OPTICAS Y ELECTRICAS PARA EL ESTUDIO DE HETEROESTRUCTURAS BASADAS EN COMPUESTOS III-V" que presenta José Bosch Estrada para optar al grado de Doctor en Ciencias Físicas, se ha realizado bajo su dirección.

Barcelona, 6 de Septiembre de 1993

A handwritten signature in cursive script, reading "Pere Roura", enclosed within a large, hand-drawn oval. A horizontal line extends from the right side of the oval.

Dr. Pere ROURA GRABULOSA

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido realizado en el **Laboratorio de Caracterización de Materiales para la Microelectrónica LCMM**, de la Universidad de Barcelona.

La realización del presente trabajo no hubiera sido posible de no ser gracias a la colaboración, la ayuda y el apoyo prestado por un gran número de personas a las cuales quiero dedicar un pequeño espacio de esta memoria para hacerles llegar mi más sincero agradecimiento.

Agradecimiento al Profesor **J.R.Morante**, director del LCMM, por haberme permitido formar parte de su grupo de investigación.

Agradecimiento a mi director de tesis, el **Dr. Pere Roura Grabulosa**, por la continua labor de seguimiento, colaboración y apoyo que ha desarrollado durante la realización de este trabajo. Quiero recordar especialmente su paciencia y disponibilidad para comentar y discutir resultados e ideas, así como su actitud de crítica constructiva en la fase final de redacción.

Asimismo, agradezco vivamente la colaboración y el apoyo, que a expensas de su tiempo, me han dispensado todos mis compañeros y amigos del grupo de Electrónica.

CAPITULO I: TECNICAS EXPERIMENTALES

INTRODUCCION	I.1
I.1-TECNICAS OPTICAS	I.1
I.1a-FOTOLUMINISCENCIA	I.1
FUNCION DE TRANSFERENCIA DEL SISTEMA	I.11
TEMPERATURA DE EMISION DE UNA LAMPARA	I.12
I.1b-ABSORCION OPTICA	I.17
I.1c-EXCITACION DE LA FOTOLUMINISCENCIA	I.21

CAPITULO II: CARACTERIZACION DE CAPAS EPITAXIALES

II.1-CAPAS EPITAXIALES DEFORMADAS	II-1
II.2-LIMITE DE CRECIMIENTO COHERENTE	II-5
II.3-ALEACIONES DE COMPUESTOS TERNARIOS	II-8
II.4-VARIACION DE LA DEFORMACION CON LA COMPOSICION	II-10
II.5-INFLUENCIA DE LA DEFORMACION EN LA ESTRUCTURA DE BANDAS	II-12
II.6-VARIACION DE LA ENERGIA DEL GAP CON LA COMPOSICION	II-16
II.7-MUESTRAS	II-18
II.8-FORMA DE LOS ESPECTROS DE ABSORCION OPTICA	II-20
II.9-CARACTERIZACION MEDIANTE FOTOLUMINISCENCIA	II-28
II.10-RELACION ENTRE PL Y AO	II-32
II.11-DISPERSIONES ENERGETICAS DEL VALOR DEL GAP	II-37
II.12-EVOLUCION DEL GAP CON LA TEMPERATURA EN EL InGaAs.	II-41
II.13-CUANTIFICACION DE LA DISPERSION DE COMPOSICION BASTA	II-48
II.14-CUANTIFICACION DE LA DISPERSION DE COMPOSICION EN InGaAs/GaAs	II-56
II.15-CUANTIFICACION DE LA MODULACION FINA	II-65
II.16-DINAMICA DE RECOMBINACION EN MUESTRAS DEFORMADAS CON RELAJACION PARCIAL MEDIANTE DISLOCACIONES	II-71

CAPITULO III: CARACTERIZACION DE POZOS CUANTICOS

III.1-INTRODUCCION	III 1
III.2-NIVELES ENERGETICOS EN POZOS CUANTICOS	
SEMICONDUCTORES	III 3
III.2a- POZO DE POTENCIAL FINITO	III 3
III.2b- SOLUCION EN SEMICONDUCTORES (FUNCION ENVOLVENTE)	III 6
III.2c- HETEROESTRUCTURAS CUYAS BANDAS SIGUEN EL MODELO DE KANE	III 12
III.2d-ESTRUCTURA DE BANDAS DEL InGaAs Y EL InAlAs . .	III 18
III.2e-CALCULO DE ESTADOS EN LOS POZOS	III 21
III.2f-LIMITACIONES DEL MODELO	III 23
III.3-INTRODUCCION DE LAS MEDIDAS EXPERIMENTALES	III 27
III.4-MUESTRAS	III 30
MEDIDAS OPTICAS	III 33
III.5-CONSIDERACIONES SOBRE LA FORMA DE LOS ESPECTROS .	III 33
III.5a-REGLAS DE SELECCION	III 36
III.5b-CALCULO DE TRANSICIONES EN SQW Y MQW	III 41
III.5c-RESULTADOS EXPERIMENTALES	III 45
MEDIDAS DE ADMITANCIA	III 50
III.6a-ANALISIS DE ADMITANCIA DE ESTRUCTURAS SQW .	III 50
III.6b-RESULTADOS EXPERIMENTALES Y AJUSTES	III 60
III.6c-DETERMIMNACION DEL BAND OFFSET	III 62
III.7-CONCLUSIONES	III 63

INTRODUCCION

Aunque la teoría básica sobre el confinamiento de partículas en pozos de potencial se conoce desde los inicios de la mecánica cuántica, no fue hasta hace unos veinte años que comenzó a tener interés en el diseño de dispositivos electrónicos. En esa época grupos de ATT & Bell Laboratories y de IBM comenzaron a estudiar capas muy delgadas de GaAs y heteroestructuras de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de unos 250 Å de espesor.

Estos tipos de investigaciones se beneficiaron rápidamente de los primeros trabajos realizados en el crecimiento de capas epitaxiales mediante MBE (molecular beam epitaxy)[1] que permiten crecer capas muy delgadas de gran calidad.

Por otro lado, y en gran parte debido al perfeccionamiento de las técnicas de crecimiento cristalino, se comenzaron a crecer capas deformadas a base de heteroestructuras, en las que los dos materiales que la componen son de distinto parámetro de malla. Así, en 1982 Gordon Osbourn [2] de Sandia Laboratories propone que los efectos asociados a las deformaciones, existentes en estas clases de heteroestructuras, pueden ofrecer unos grados de libertad en el diseño de dispositivos semiconductores, cuyas ventajas superen los inconvenientes que provocan dichas deformaciones. En 1986, Temkin et al. [3] prueban un dispositivo basado en un fotodiodo de silicio en el que desplaza la banda de absorción de $1.3\mu\text{m}$ a $1.5\mu\text{m}$ mediante la inclusión de deformaciones.

En cuanto a los dispositivos basados en los efectos cuánticos de las capas ultrafinas, en 1974 se realizan dos experimentos básicos; por un lado Esaki and Chang [4] detectan el comportamiento oscilatorio de la conductancia diferencial perpendicular debido al efecto tunel resonante a través de una barrera de potencial, por otro lado, las medidas ópticas de Dingle[5] muestran directamente la cuantización de los niveles de energía en pozos cuánticos.

A partir de aquí, se han desarrollado una gran cantidad de dispositivos basados, tanto en las propiedades debidas a efectos cuánticos (que se pueden controlar actuando sobre las dimensiones de los dispositivos), como del control de las deformaciones en las

heteroestructuras. El diseño de estos dispositivos se basa en el control de varios parámetros:

1-La energía del gap. La posibilidad de modificar la energía del gap mediante capas deformadas se ha aprovechado en el diseño de varios tipos de dispositivos, por ejemplo, en la realización de fotodetectores de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, $\text{InAs}_y\text{Sb}_{1-y}/\text{InSb}$, $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$, etc. En este caso, la deformación modifica la energía del gap del fotodetector, y el control dicha deformación da lugar a la posibilidad de la frecuencia de trabajo y el ancho de banda del detector.

En cuanto a los pozos cuánticos, se puede modificar la longitud de onda de emisión de láser basados en este tipo de heteroestructuras.

2-Band Offset. El crecimiento de capas deformadas permite controlar el band offset entre los dos semiconductores que forman la heteroestructura, y con ello poder modificar las propiedades de transporte paralelo y perpendicular a las capas que forman el dispositivo. Esto ha dado origen a la creación de dispositivos que aprovechan tanto las propiedades de transporte paralelo, tal es el caso de los transistores TEGFET (two-dimensional electron gas field-effect), también llamados HEMT (high-electron mobility transistor), como las de transporte perpendicular a dichas capas, tal es el caso de los transistores de efecto tunel.

3-Estructura de bandas. El hecho de provocar deformaciones en una capa epitaxial, o la creación de un pozo cuántico, hace que se rompa la degeneración de la banda de valencia entre huecos pesados y ligeros. En el caso de las deformaciones se puede hacer dominar el comportamiento de un tipo u otro de portadores, controlando el sentido de la deformación (compresiva o tensionada).

En el presente trabajo nos hemos dedicaremos a analizar heteroestructuras en forma de capas epitaxiales de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crecidas sobre substratos de InP o GaAs, tanto en estado de deformación como relajado (libre de deformaciones), y pozos cuánticos de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$. El principal cometido de este estudio no es sólo la caracterización de estas muestras en concreto, sino que nos interesamos más por las técnicas de medición y análisis utilizadas para realizar dicha caracterización.

TECNICAS EXPERIMENTALES

INTRODUCCION

El objetivo de este capítulo es la descripción de las técnicas experimentales que hemos utilizado para el estudio de las heterouniones. Algunas de las técnicas ya existían en el LCMM, y por lo tanto sólo hemos tenido que adaptar el montaje a las necesidades específicas de las muestras, este es el caso de la Absorción Óptica o las medidas eléctricas (Admitancia y Capacitancia). En el caso de la Fotoluminiscencia y la Excitación de la Luminiscencia el sistema experimental se ha ideado, montado y puesto a punto específicamente para este trabajo. Por esta razón nos extenderemos más en la descripción de estas dos últimas técnicas.

I-1.TECNICAS OPTICAS :

Estas técnicas utilizan las propiedades de las transiciones ópticas entre bandas (o subbandas) del semiconductor para obtener las propiedades de dicho material. Hemos trabajado con tres técnicas distintas:

- A- Fotoluminiscencia (PL)
- B- Absorción Óptica (AO)
- C- Excitación de la Luminiscencia (PLE)

I-1a.FOTOLUMINISCENCIA :

En este tipo de medidas analizamos la radiación emitida por la muestra cuando en ella se realizan transiciones entre dos niveles con energías E_i y E_f , tal que $E_i > E_f$. Las transiciones suelen ser entre la BC y la BV, o bien entre una de estas bandas y un nivel de la banda prohibida.

En la figura 1 hemos representado un esquema del montaje utilizado para estas medidas. Puesto que el estado inicial es de mayor energía que el final necesitaremos excitar los portadores hasta el estado E_i , y esto lo conseguiremos mediante una fuente luminosa. Hemos utilizado un láser de Argón (INNOVA 90) con líneas de emisión comprendidas entre 351 y 528 nm y una potencia multilinea que podemos variar entre 0 y 6 Watios (lo que nos

permitirá elegir el grado de población del nivel E_i). Además, este láser actúa como fuente excitadora

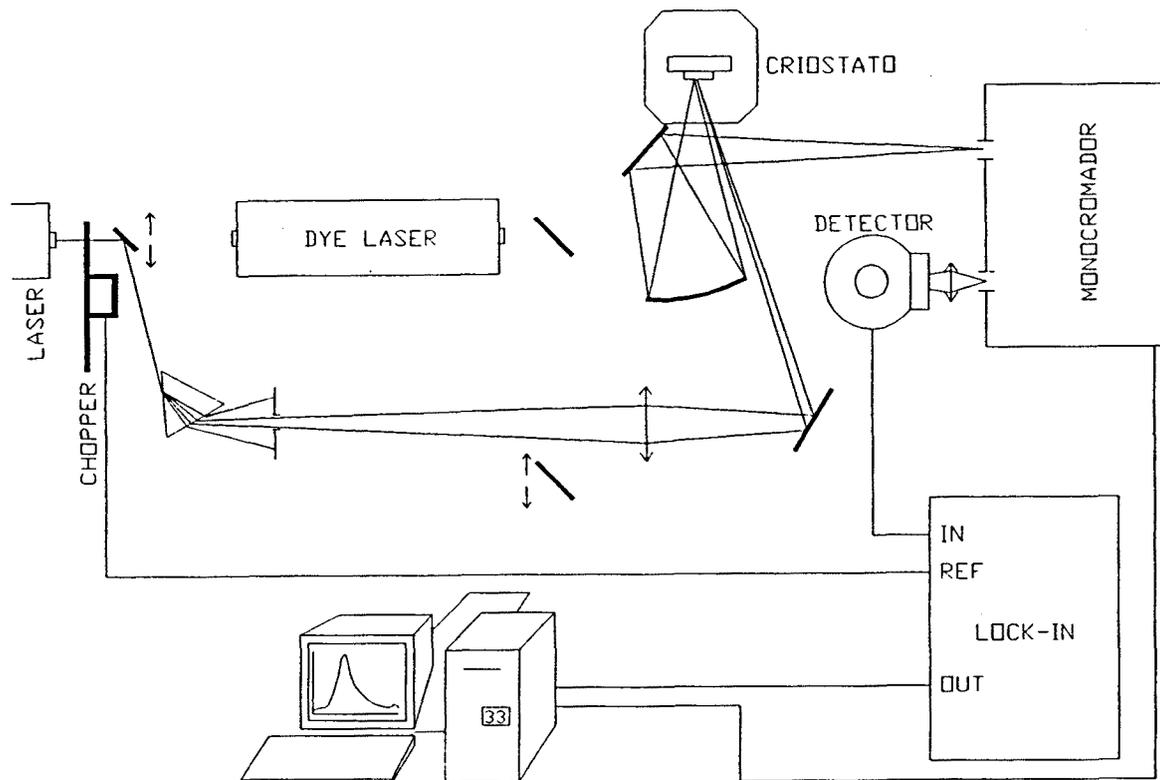


Figura 1. Esquema del montaje para las medidas de fotoluminiscencia.

de un láser de colorante (DYE láser) que nos da una línea láser ajustable en un determinado rango, dependiendo del colorante utilizado. En nuestro caso hemos utilizado el DCM de LAMBDA PHYSIK que nos proporciona fluorescencia láser entre 610 y 710 nm, y cuyo máximo se sitúa en 644nm con una potencia máxima de 500mW para esta λ .

Como podemos ver, entre el láser y la muestra hemos colocado un sistema óptico constituido por un prisma y un diafragma para seleccionar las líneas deseadas para excitar la muestra. Esto es imprescindible porque, además de las líneas mencionadas anteriormente, el láser emite líneas parásitas que en caso contrario se superpondrían al espectro emitido por la muestra. Finalmente una lente de 30cm de focal se encarga de focalizar el láser sobre la muestra. La superficie excitada tiene un diámetro del orden de $500\mu\text{m}$.

El siguiente paso en el montaje consiste en recoger la radiación emitida por la muestra para ser analizada mediante un monocromador. Primero lo intentamos realizar con lentes, pero el sistema no resultó operativo debido a las aberraciones cromáticas. Incluso utilizando dobletes acromáticos la posición de la imagen podía variar en varios centímetros según la λ que analizábamos se desplazaba hacia el infrarrojo. Por esta razón utilizamos un espejo esférico que recoge la luz y forma la imagen sobre la rendija del monocromador. Esto nos evita la aberración cromática, aunque implica un ligero aumento de otras aberraciones puesto que el sistema ha de trabajar ligeramente fuera del eje óptico del espejo. La posición de este espejo en el sistema es la que corresponde a un aprovechamiento óptimo de la luminiscencia tal como exponemos seguidamente. La situación ideal sería recoger toda la radiación y colocarla en la rendija de entrada del monocromador. Puesto que esto es imposible intentamos abarcar el mayor ángulo sólido posible y formar la imagen sobre la rendija. En realidad esta posición viene determinada por su distancia focal su diámetro y el del espejo recolector situado dentro del monocromador (justo después de la rendija). En la figura 2 se presenta un esquema de esta parte del montaje.

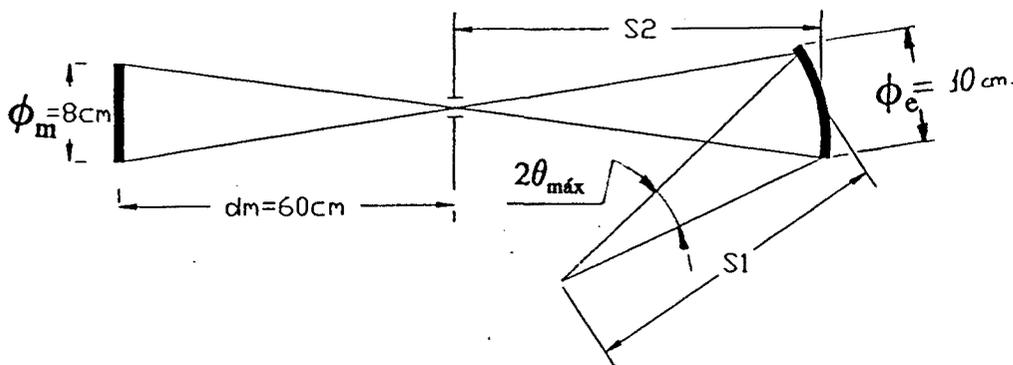


Figura 2. Diagrama del sistema de recolección de la señal fotoluminiscente emitida por la muestra.

Para aprovechar el máximo de radiación los espejos han de presentar la misma apertura respecto a la rendija de entrada del monocromador, lo que nos lleva a la siguiente relación:

$$\frac{S_2}{\phi_e} = \frac{d_m}{\phi_m} \Rightarrow S_2 = 75\text{ cm} \quad (1)$$

Y la distancia a la muestra vendrá dada por :

$$\frac{1}{S_1} = \frac{1}{f} - \frac{1}{S_2} \Rightarrow S_1 = 37.5 \text{ cm} \quad (2)$$

Mientras que el ángulo sólido que aprovechamos viene dado por :

$$\Omega = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\theta_{\max}} \sin\theta d\theta = 2\pi(1 - \cos\theta_{\max}) \quad (3)$$

con lo que recojemos la luz en un ángulo sólido de 0.0175π radianes, o lo que es lo mismo, del orden de un uno por ciento de la energía emitida por la superficie excitada de la muestra. Con esta configuración el tamaño teórico de la imagen sería el doble que el del objeto. Sin embargo, debido a las aberraciones mencionadas sobre la rendija del monocromador el haz se focaliza en un punto de 1.5mm de diámetro. Un sistema de aumentar la fracción de energía recogida sería disminuir la focal del espejo, pero en tal caso las aberraciones se incrementarían y anularían cualquier mejora.

El monocromador que hemos utilizado es un JOBIN YBON modelo HRS con una focal de 600mm y una resolución de $16\text{\AA}/\text{mm}$, para una red de 1200 líneas/mm, el cual hemos modificado para poder gobernarlo desde el ordenador. Podemos trabajar con tres redes diferentes según el rango espectral en que nos movamos :

líneas/mm	λ central (nm)	$\Delta\lambda/\Delta x$ (nm/mm)
1200	500	1.6
600	1000	3.2
300	2000	4.8

Tabla I Características de las redes de difracción utilizadas

En la salida del monocromador colocamos el detector que convertirá la radiación electromagnética en señal eléctrica. El detector que utilizemos dependerá también del rango espectral en que trabajemos además de la intensidad de la señal que tengamos. Básicamente hemos trabajado con tres detectores diferentes, que son los siguientes :

DETECTOR	Rango Espectral (μm)
Ge	1.0 - 1.7
InAs	hasta 3.0
InSb	hasta 5.4

Tabla II Rango espectral de los detectores utilizados

Aunque el detector de Ge tiene un rango espectral menor que los otros dos, es mucho más sensible y puesto que el gap del InGaAs (material con el que básicamente hemos trabajado) se encuentra en este rango es el detector que hemos utilizado en la mayoría de ocasiones.

La salida de los detectores está conectada a un amplificador síncrono tipo Lock-In, bien mediante un convertidor I-V en el caso del InAs e InSb, o bien directamente o mediante un filtro especial en el caso del Ge.

El detector de Ge necesita un filtro especial debido a su alta sensibilidad a radiaciones externas. Efectivamente, el diodo PIN de Ge es un excelente detector de radiaciones nucleares. En particular, los picos de tensión producidos por la detección de muones presentes en la radiación cósmica limitan mucho la sensibilidad del detector. Conectando directamente el detector al Lock-In para hacer una medida del ruido de fondo, figura 3, se distinguen claramente los picos debidos a la radiación cósmica. Podemos comprobar que mientras el nivel del ruido de fondo es del orden de $50\mu\text{V}$, los impulsos debidos a la muones son del orden de varios mV. Por lo tanto, cuando sólo utilizemos una detección síncrona para la medida de espectros, tendremos una sobrecarga del ruido que nos saturará el sistema al aumentar la ganancia. Por otra parte no se puede aumentar la cte. de tiempo del Lock-In, lo

cual reduciría la intensidad de los picos parásitos, puesto que tendríamos que aumentar el tiempo de medida.

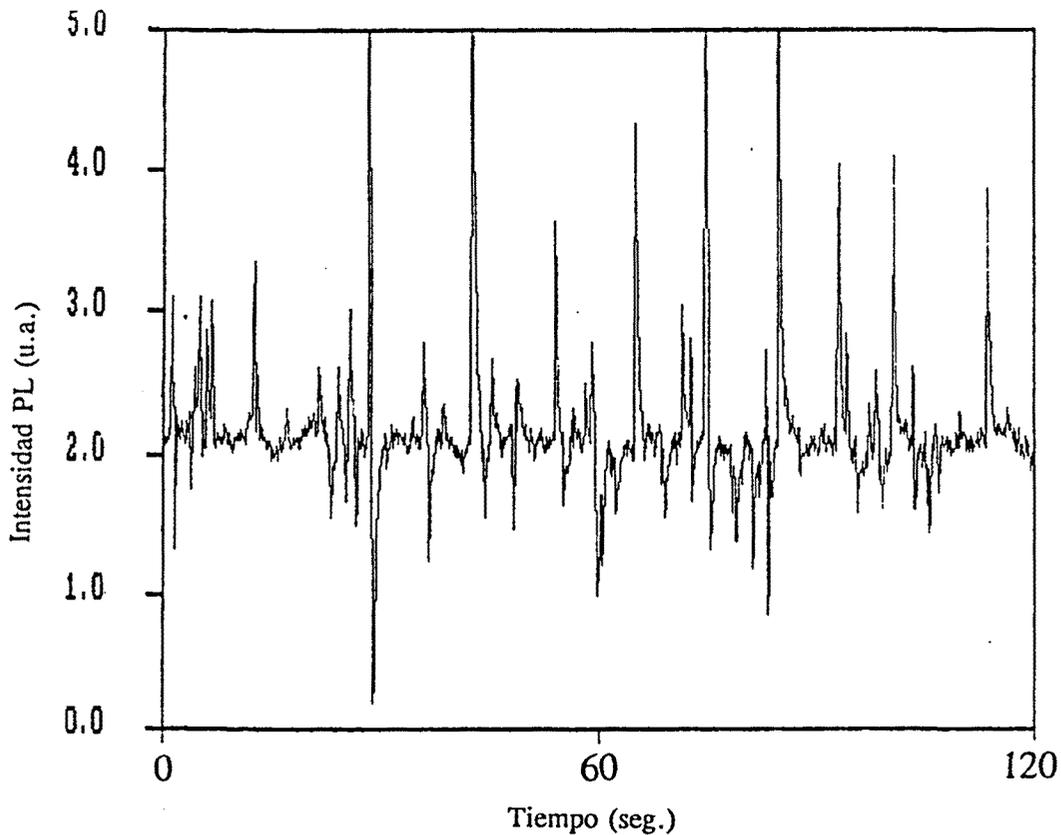


Figura 3. Ruido de fondo debido a radiación cósmica.

Veamos la forma de la señal de salida AC del detector de Ge y la de los picos debidos a los muones, figura 4. La constante de tiempo de la señal de salida del detector es del orden de 10^{-3} seg, en cambio la forma de los picos parásitos es muy diferente, para ellos el tiempo de subida es del orden de μ seg. Esta subida tan rápida es debida a la deposición instantánea de una carga suplementaria en la región de depleción del diodo PIN cuando llega una partícula energética. Mientras que el tiempo de caída sigue la cte. de tiempo del sistema.

Para suprimir estos picos hemos realizado un amplificador discriminador, tipo sample and hold[1], conectado a la salida del detector de Ge. El esquema de principio de funcionamiento está representado en la figura 5.

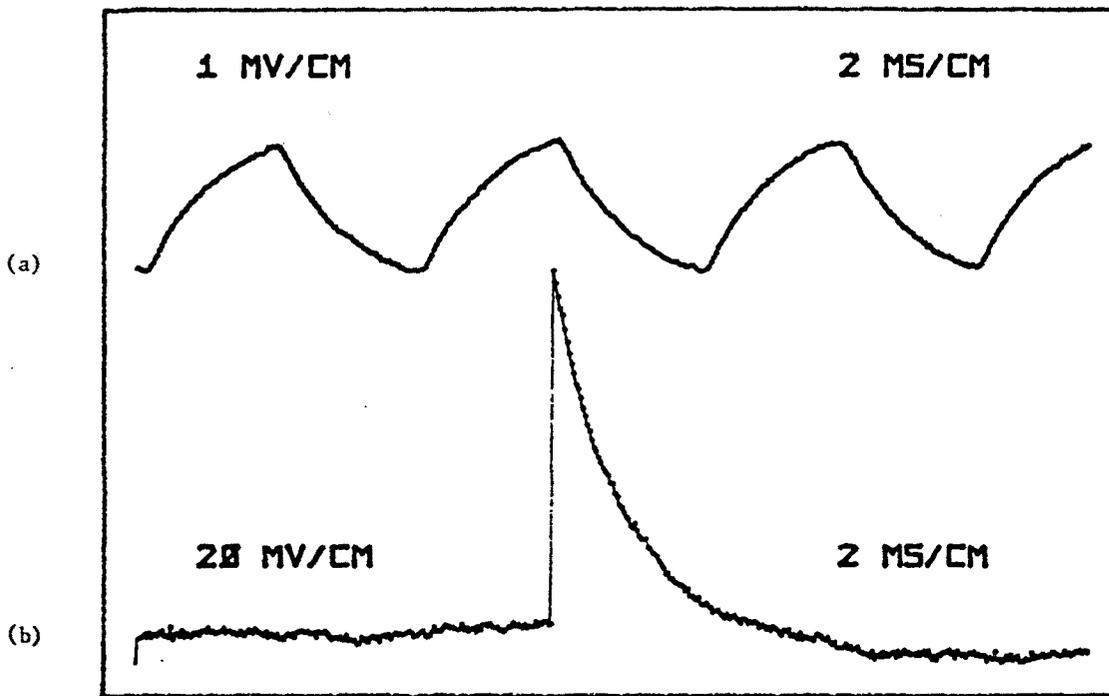


Figura 4. Señales de salida AC correspondientes (a) al detector de Ge y (b) a la presencia de muones.

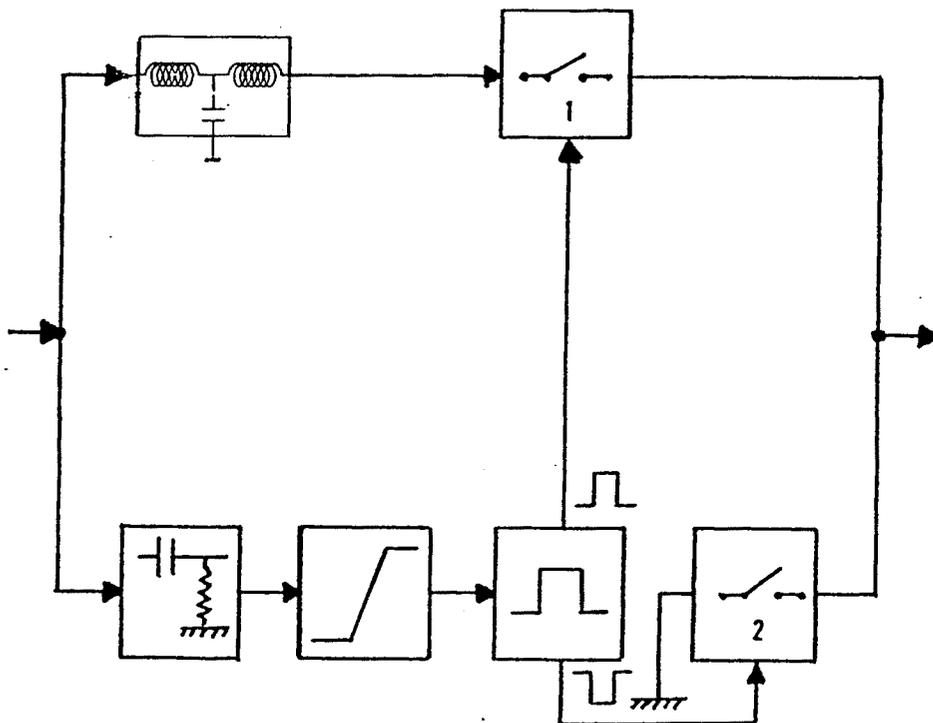


Figura 5. Diagrama de bloques del amplificador discriminador.

La señal de salida del detector pasa, por una parte a una línea de retardo, y por otra a un circuito diferencial cuyo papel es el de dejar pasar sólo los picos debidos a los muones. Después se encuentra un circuito comparador que nos permite regular la tensión de discriminación para detectar solamente los picos parásitos, figura 6b. Cuando se detecta un pico, figura 6c, se genera un impulso de un periodo de duración, figura 6d, que gobierna una puerta de paso analógica CMOS la cual corta el paso de la salida de la línea de retardo, proceso necesario para compensar el intervalo de tiempo entre la detección del pico y la creación del pulso, figura 6e y f. Cuando no se detectan picos la puerta 2 se mantiene abierta y la 1 cerrada. Por el contrario, cuando se detecta un pico la puerta 1 se abre y la 2 se cierra poniendo a masa la salida durante el tiempo que dura un pulso. En la salida se recupera una señal deformada, figura 6g, pero sin picos debidos a la radiación cósmica que saturan el Lock-In. A continuación éste amplificará la señal y la convertirá en sinusoidal, centrada en la frecuencia de choppeado, figura 6h.

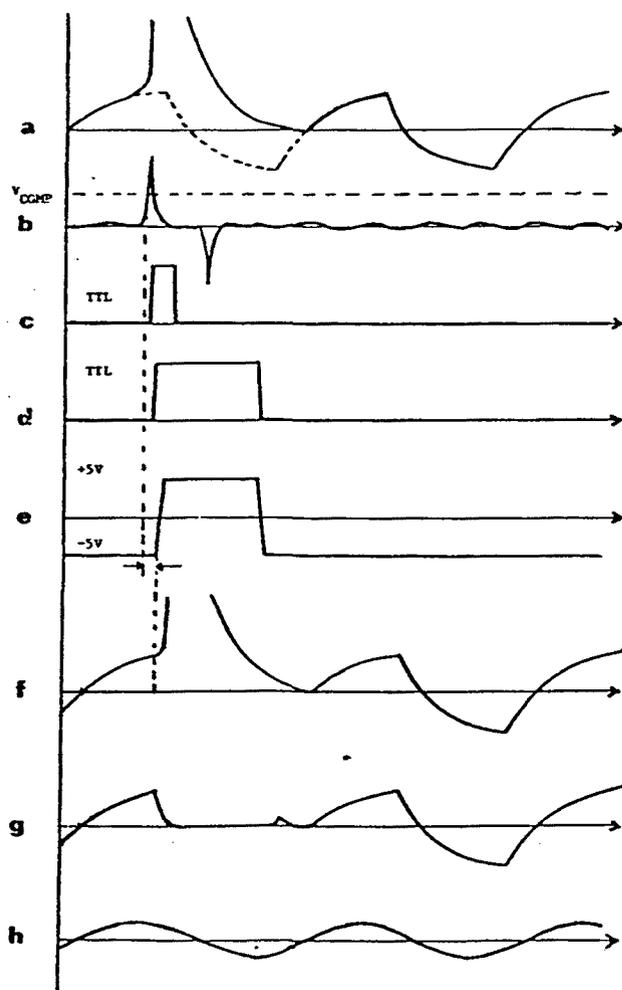


Figura 6. Evolución de la señal a lo largo de las distintas etapas del amplificador discriminador.

En la figura 7 está representado el esquema electrónico del circuito.

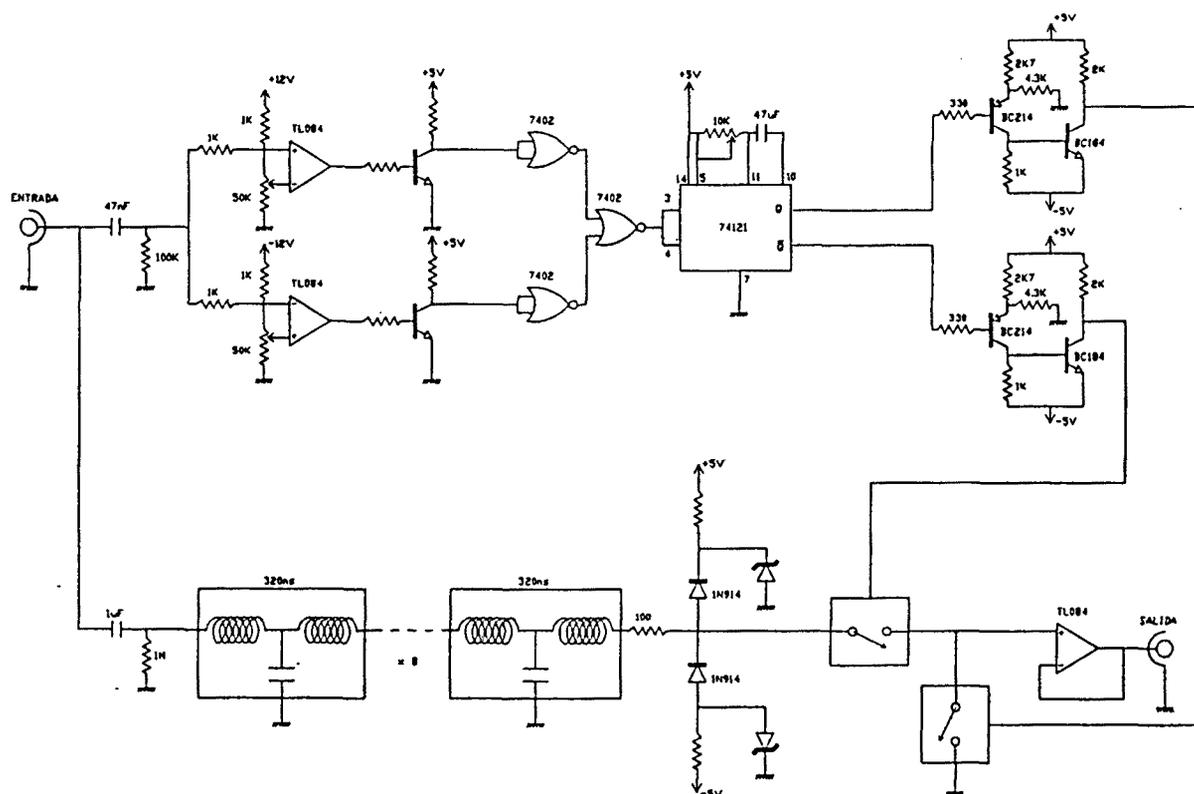


Figura 7.

Para ver un ejemplo de como actúa finalmente el discriminador en la medida de un espectro en la figura 8 tenemos el espectro del Au en Si, sin discriminador (figura 8a), y con discriminador (figura 8b). La mejora es evidente.

La automatización de la captura de datos nos permite realizar medidas repetitivas con lo que se mejora la relación señal/ruido. En la figura 8c tenemos el mismo espectro pero promediado con 50 medidas.

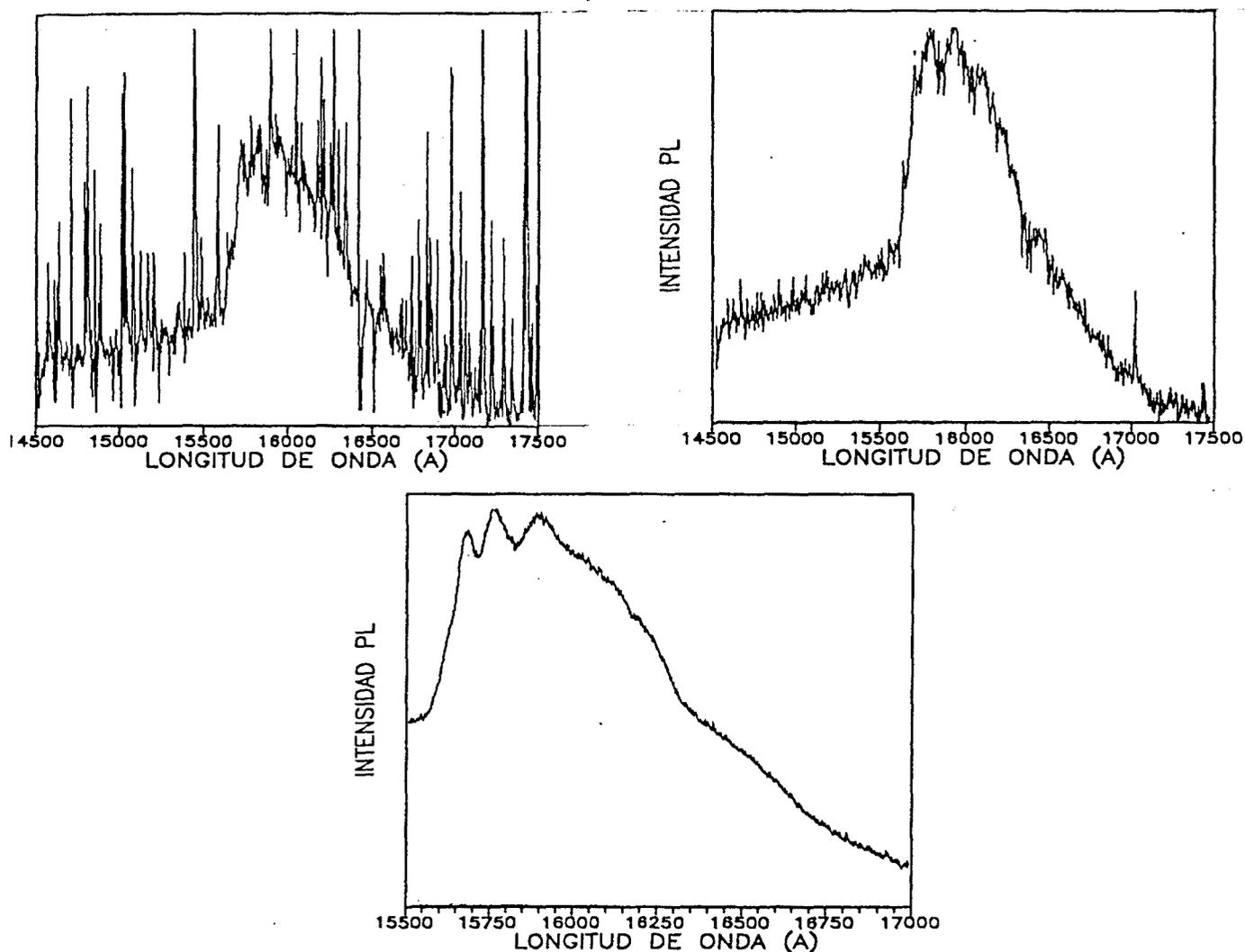


Figura 8. Señal PL de Au en Si. (a) Sin discriminador. (b) Con discriminador. (c) Igual que (b) pero con adquisición repetitiva.

El sistema se completa con un criostato para mantener las muestras a baja temperatura, debido a que los procesos de recombinación radiativa dependen fuertemente de la temperatura. El criostato utilizado es un Leybold de circuito cerrado de helio que nos permite llegar hasta 12K. La temperatura la medimos mediante un diodo de Si calibrado. Un controlador de temperatura tipo PID que gobierna un calefactor instalado junto al portamuestras nos permite regular la temperatura entre 12K y la del ambiente.

La medida de la temperatura de la muestra suele ser un parámetro crítico, puesto que el sensor no puede estar físicamente en la muestra y ésta es excitada mediante un láser que

puede calentarla y crear un gradiente de temperatura entre la muestra y el sensor. Sin embargo, hemos desarrollado un sistema de comprobación de la temperatura de la muestra basado en el propio espectro de luminiscencia que obtenemos. Este método lo describiremos en el próximo capítulo cuando hablemos del tratamiento de los espectros de PL. Haremos notar solamente que en la mayoría de ocasiones la temperatura de la muestra es la misma que la medida por el sensor, y sólo se observa un calentamiento local bajo condiciones de muy fuerte excitación.

El sistema está gobernado por un ordenador personal que nos permite tanto el control del monocromador, lo cual será esencial sobre todo para hacer medidas repetitivas y promediar, como la captura del espectro y su posterior tratamiento, puesto que el espectro medido está modificado por el sistema y ha de ser tratado antes de su interpretación física.

FUNCION DE TRANSFERENCIA DEL SISTEMA :

Evidentemente nuestro interés consiste en determinar la forma espectral de la emisión de la muestra $\phi_i(\lambda)$ al ser excitada por el láser. Sin embargo la sensibilidad del detector así como la eficiencia de la red de difracción y transmitancia de los elementos ópticos depende de λ , por lo que el espectro medido en la salida del amplificador puede estar seriamente modificado. En realidad lo que nosotros obtenemos en el ordenador es una $I_0(\lambda)$ que corresponde a:

$$\phi_0(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} T'(\lambda') F(\lambda-\lambda') \phi_i(\lambda') d\lambda' \quad (4)$$

en donde $F(\lambda-\lambda')$ es la ventana de integración que depende de la apertura de las rendijas del monocromador. Si suponemos que es lo suficientemente estrecha, de forma que $T'(\lambda')\phi_i(\lambda')$ varíe poco, entonces podremos aproximar la integral (4) por :

$$\phi_0(\lambda) = T'(\lambda) \phi_i(\lambda) \int_{-\infty}^{\infty} F(\lambda-\lambda') d\lambda' = T'(\lambda) \phi_i(\lambda) \Delta\lambda A \equiv T(\lambda) \phi_i(\lambda) \quad (5)$$

donde $\Delta\lambda$ es la resolución del monocromador que se calcula a partir de la dispersión lineal $\Delta\lambda/\Delta x$ de la tabla I y la apertura de las rendijas :

$$\Delta\lambda = \frac{\Delta\lambda}{\Delta x} \Delta x \quad (6)$$

la función $T(\lambda)$ definida en (5) es la función de transferencia del sistema, en la cual está contenida la función de respuesta del monocromador, red de difracción, filtros y detector utilizados.

Si conocemos $T(\lambda)$ podremos acceder a $\phi_i(\lambda)$ una vez medida $\phi_o(\lambda)$ ya que :

$$\phi_i(\lambda) = \frac{\phi_o(\lambda)}{T(\lambda)} \quad (7)$$

Para conocer la $T(\lambda)$ sólo tenemos que considerar cual es la deformación introducida por el sistema sobre una emisión de referencia $\phi_r(\lambda)$ conocida y despejar la $T(\lambda)$ de (7). Como espectro de referencia podemos coger el de una lámpara de tungsteno o el de un glóbar, que consideraremos cercano al de un cuerpo negro, y cuyo único problema es conocer su temperatura de emisión.

TEMPERATURA DE EMISION DE UNA LAMPARA :

La emisión de un cuerpo depende de la temperatura a la que se encuentra y de su emisividad

$$\phi_{emi}(\lambda) = \varepsilon(\lambda) \phi_{CN}(\lambda) \quad (8)$$

Siendo $\phi_{CN}(\lambda)$ la emisión de un cuerpo negro :

$$\phi_{CN}(\lambda) d\lambda = \frac{A}{\lambda^4} \frac{d\lambda}{\exp\left(\frac{hv}{KT}\right) - 1} \quad (9)$$

Mientras que lo que nosotros mediremos será :

$$\phi_{med}(\lambda) = T(\lambda) \phi_{emi}(\lambda) \quad (10)$$

Por otra parte la potencia radiada es igual a la potencia eléctrica suministrada :

$$VI = B\epsilon'T^4 \quad (11)$$

donde ϵ' es la emisividad promedio, $V \cdot I$ la potencia eléctrica suministrada y B una cte. independiente de la temperatura, de donde obtenemos :

$$T = A(VI)^{1/4} \quad (12)$$

siendo $A \equiv (B\epsilon')^{-1/4}$. De (9), (10) y (12) obtenemos :

$$\phi_{med}(\lambda) = T(\lambda) \frac{\epsilon(\lambda)}{\lambda^4} \frac{1}{\exp\left(\frac{hv}{KA(VI)^{1/4}}\right) - 1} \quad (13)$$

Y puesto que en el visible y el infrarrojo cercano se cumple que :

$$\exp\left(\frac{hv}{KA(VI)^{1/4}}\right) > 1 \quad (14)$$

obtenemos que :

$$\phi_{med}(\lambda) = \frac{T(\lambda) \epsilon(\lambda)}{\lambda^4} \exp\left(-\frac{hv}{KA(VI)^{1/4}}\right) \quad (15)$$

Fijando λ podemos medir $\phi_{med}(\lambda)$ en función de la potencia suministrada. Si además $\epsilon(\lambda)$ y ϵ' no tienen una fuerte dependencia con la temperatura podremos ajustar las parejas $(V \cdot I)_i$, $(\phi_{med})_i$ a una recta:

$$-\ln\left(\frac{T(\lambda) \epsilon(\lambda)}{\lambda^4}\right) + \ln(\phi_{med}(\lambda)) = -\frac{hv}{KA} (VI)^{-1/4} \quad (16)$$

De la pendiente de esta recta obtenemos el valor de la constante A, y si las aproximaciones son validas, resultará ser independiente de la λ . Conociendo A podemos conocer la temperatura de emisión de la lámpara. En la figura 9 representamos esta recta para tres valores de λ .

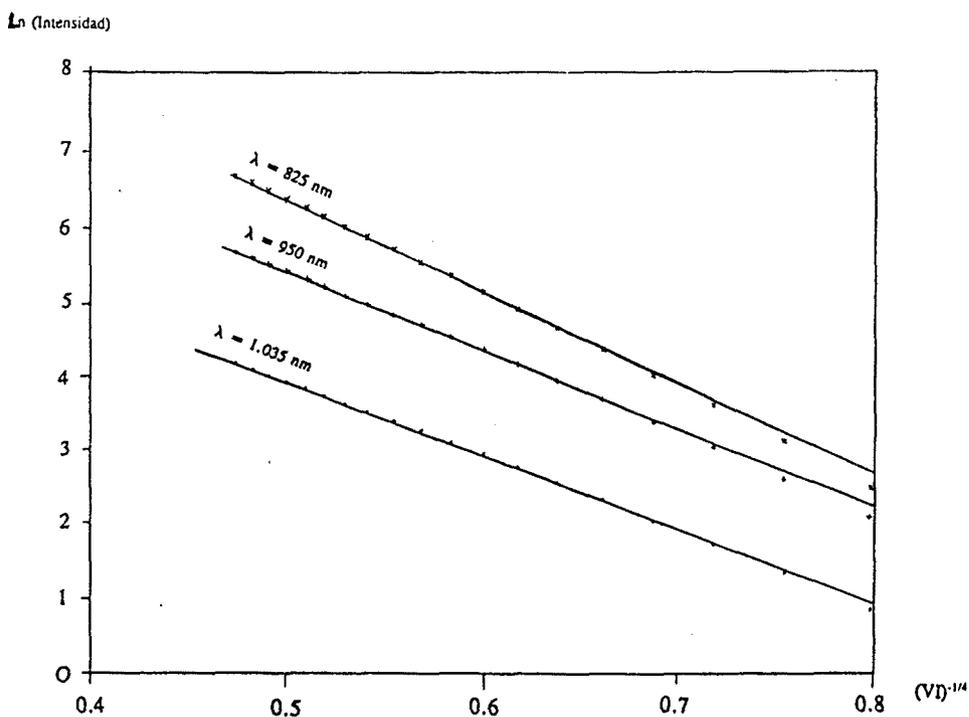


Figura 9. Ajuste de la expresión (16) para la determinación de la temperatura de la lámpara a tres longitudes de onda distintas.

y obtenemos los siguientes valores :

λ [nm]	$h\nu$ [eV]	A	T(a 15W)[K]
827	1.5	1412	2779
954	1.3	1414	2782
1033	1.2	1402	2759

Tabla III. Valores obtenidos en los ajustes de la temperatura de la lámpara.

Vemos que A es prácticamente independiente de λ , y por lo tanto podemos conocer la temperatura de la lámpara para una potencia determinada y su espectro de emisión.

Con estos elementos estamos en disposición de calcular la función de transferencia del sistema. Claro está que dicha función cambiará si hacemos alguna modificación en la configuración del sistema. Dichos cambios vendrán determinados por el rango espectral en que trabajemos y pueden ser cambios de filtros ópticos, de red de difracción o de detector. Por lo tanto hemos de medir la $T(\lambda)$ para todas las posibles combinaciones que utilicemos, estas funciones las guardaremos como ficheros en el ordenador para posteriormente corregir los espectros medidos.

En la figura 10 presentamos un ejemplo de función de transferencia del sistema; en ella podemos ver la ϕ_{med} , la emisión de la lámpara y la función de transferencia, que en este caso está realizada con un filtro óptico que corta las $\lambda < 1000\text{nm}$, una red de difracción centrada en $\lambda_B = 1000\text{nm}$ y el detector de Ge. En la figura puede verse como la función decrece cuando la λ se acerca a $1\mu\text{m}$; esto es debido al filtro, así como para las $\lambda > 1.7\mu\text{m}$; debido a la respuesta del detector de Ge.

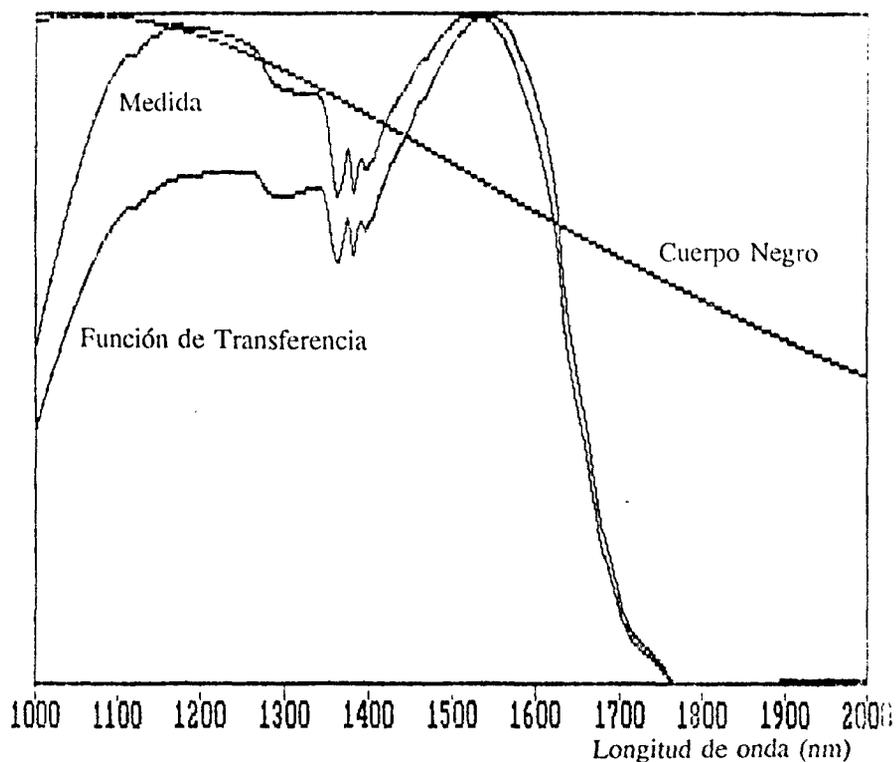


Figura 10. Intensidad luminosa emitida, medida, y función de transferencia.

Un ejemplo de cómo afectaría esta $T(\lambda)$ a una medida espectral puede verse en la figura 11. En la figura 11a tenemos el espectro medido y en la figura 11b el mismo corregido. El espectro final corresponde al número de fotones emitidos por unidad de energía.

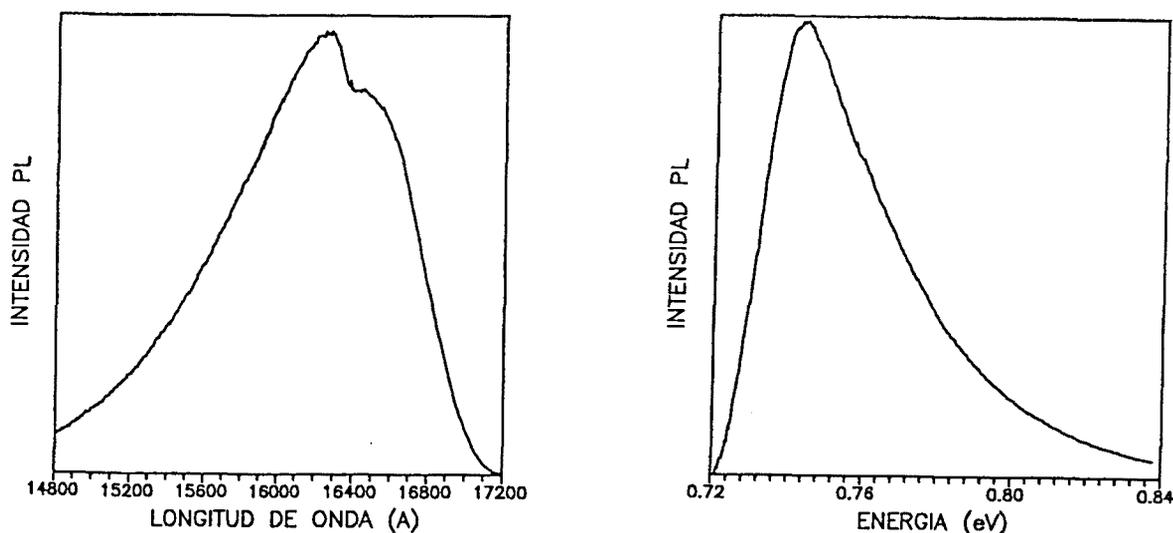


Figura 11. Espectro PL típico. (a) Medida directa. (b) Corregido por la función de transferencia.

I-1b.ABSORCION OPTICA :

La absorción óptica es quizás el método más sencillo y directo para determinar la estructura de bandas de un semiconductor. En un proceso de absorción, un fotón de energía conocida excita a un electrón desde un estado de energía E_i a otro de energía E_f , con $E_f > E_i$. Así, un experimento de AO consistirá en medir la atenuación de la radiación electromagnética que atraviesa el semiconductor. Estudiando los cambios de la radiación transmitida, para cada frecuencia, podremos conocer cuales son las posibles transiciones que puede realizar un electrón en el semiconductor, y por lo tanto conocer la estructura de bandas de éste.

La absorción se expresa en términos del coeficiente de absorción $\alpha(h\nu)$, que se define como el decrecimiento relativo de la intensidad de la radiación $I(h\nu)$ a lo largo de su trayectoria dentro del material :

$$\alpha(h\nu) = \frac{1}{I(h\nu)} \frac{dI(h\nu)}{dx} \quad (17)$$

Si el material es homogéneo y de grosr Δx podemos integrar la ecuación (17) para obtener la intensidad transmitida I_0 en función de la intensidad incidente I_i :

$$I_0 = I_i e^{-\alpha \Delta x} \quad (18)$$

La forma clásica de realizar medidas de AO consiste en iluminar la muestra con una fuente de radiación policromática a través de un monocromador, de forma que, variando la λ que incide sobre la muestra podemos realizar un estudio de α en función de λ . Sin embargo, nosotros hemos utilizado una técnica distinta llamada espectroscopía por transformada de Fourier (FTIR):

La espectroscopía FTIR nos permite realizar un análisis espectral rápido y detallado de la radiación electromagnética. Al contrario que en otras técnicas espectroscópicas, esta no es

dispersiva, es decir, las diferentes frecuencias no son separadas directamente sino que se genera un interferograma, que permite realizar un análisis frecuencial mediante el uso de la transformada de Fourier. Un sistema espectrométrico de este tipo lo podemos dividir en dos subsistemas :

- 1.- Un sistema óptico que permite una irradiación conveniente de la muestra, y la posterior detección de esta radiación. Básicamente es un interferómetro de Michelson.
- 2.- Un ordenador que efectúa el tratamiento de la señal para la obtención del espectro y su tratamiento posterior.

Describiremos el principio de funcionamiento basándonos en el equipo que nosotros utilizamos, un espectrofotómetro interferométrico BOMEM DA3.16, figura 12

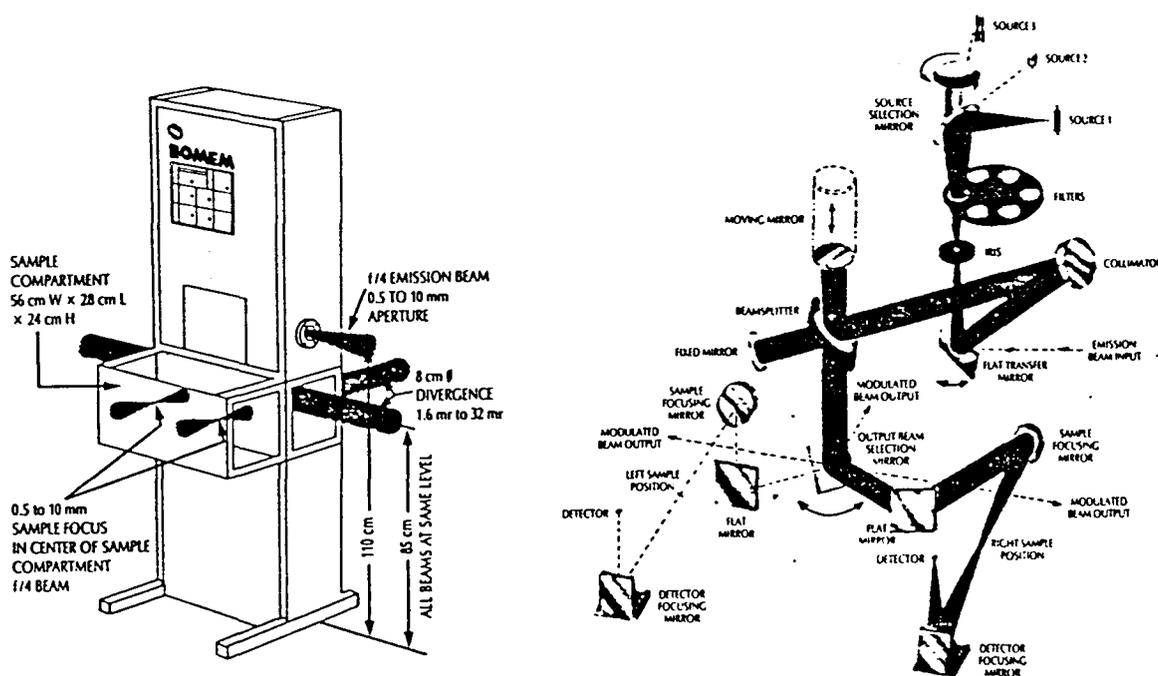


Figura 12. Interferómetro BOMEM DA3.16 con los haces disponibles y el camino óptico del haz.

El equipo tiene una resolución máxima de 0.02cm^{-1} que corresponde a $2.6\mu\text{eV}$. Tal resolución es innecesaria para nuestras medidas. Normalmente trabajamos entre 1 y 8cm^{-1} (0.12 y 1.0

meV, respectivamente). La configuración del sistema óptico utilizado normalmente la indicamos en la tabla y nos permite analizar desde 3200 a 1100 cm^{-1} (desde 0.4 a 1.3 eV).

Lámpara de wolframio.

Divisor de CaF_2 .

Detector de InSb.

Rango espectral: κ_{\min} : 3.1 μm κ_{\max} : 9.1 μm

Un cristato de circulación de helio OXFORD CF1204 permite mantener la muestra a la temperatura deseada 4.2 y 300 K. A diferencia de la fotoluminiscencia, la intensidad de la señal de absorción óptica prácticamente no depende de la temperatura. El interés de trabajar a baja temperatura reside en el hecho que la vibraciones de la red tienden a suavizar los detalles. Notemos, sin embargo, que la absorción debida a la banda prohibida del INGaAs no varía apreciablemente entre 4.2 y 20 K.

En primer lugar tenemos una fuente policromática que emite en un rango espectral muy amplio. El sistema permite la utilización de tres fuentes que cubren desde el UV hasta el IR lejano. La radiación emitida se colima y el haz paralelo incide sobre un beamsplitter o divisor de haz. Parte se transmite hacia un espejo fijo, y parte se refleja hacia uno móvil. Los dos espejos devuelven la radiación al Beamsplitter donde los dos haces se recombinan produciendo un haz que se hace incidir sobre la muestra. La radiación reflejada o transmitida por la muestra, según el tipo de análisis que queramos realizar, es la que llega al detector.

La función del espejo móvil es la de introducir una diferencia de caminos ópticos entre los dos haces. El detector mide variaciones de intensidad del haz emergente en función del retraso, y esto da lugar al interferograma.

Supongamos que $I(\kappa)$ ($\kappa = \lambda^{-1}$) es el espectro de la radiación que llega al detector y $\delta = 2(\text{OM-OF})$ (figura 13) la diferencia de caminos entre los dos haces. El interferograma viene dado por[3]:

$$IGM(\delta) = \int_{-\infty}^{\infty} B(\kappa) \cos(2\pi\kappa\delta) d\kappa \quad (19)$$

Inversamente, y teniendo en cuenta que $IGM(\delta)$ es una función par:

$$I(\kappa) = 2 \int_0^{\infty} IGM(\delta) \cos(2\pi\kappa\delta) d\delta \quad (20)$$

Cuando $\delta=0$ (espejos equidistantes al beamsplitter), los dos haces están en fase e interfieren constructivamente en el beamsplitter, pasando toda la radiación al detector. A medida que el espejo se va moviendo, introduciendo una diferencia de caminos ópticos, parte de la radiación interfiere destructivamente disminuyendo rápidamente la señal en el detector. Si la velocidad del espejo móvil es v , se tiene que $\delta=2vt$ y la frecuencia de la señal que llega al detector correspondiente al número de onda κ es $f_{\kappa}=2v\kappa$.

THE MICHELSON INTERFEROMETER

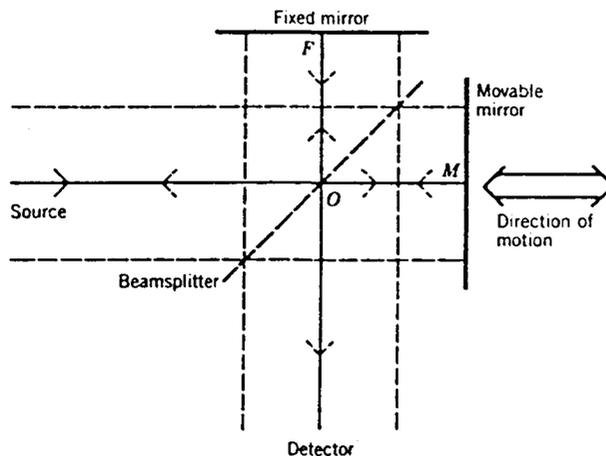


Figura 13. Esquema del interferómetro de Michelson.

La función $B(\kappa)$ incluye los siguientes factores :

- 1.- Espectro de emisión de la fuente.
- 2.- Espectro de absorción de la muestra.
- 3.- Respuesta del detector.
- 4.- Característica del amplificador.

Puesto que a nosotros nos interesa sólo el espectro de absorción de la muestra tendremos que eliminar los otros términos obtenidos en $B(\kappa)$. Por eso realizamos primero una medida espectral del sistema sin la muestra, y restamos la función $B(\kappa)$ así obtenida a la función que obtendremos del sistema con la muestra.

I-1c.EXCITACION DE LA FOTOLUMINISCENCIA

Las dos técnicas explicadas hasta ahora nos permiten obtener una amplia información sobre la estructura de bandas de un semiconductor. Sin embargo, como todas las técnicas experimentales, tienen sus limitaciones. La absorción óptica tiene el problema de la sensibilidad, ya que se necesita un espesor suficiente de semiconductor para que la absorción de radiación sea perceptible. Así, las capas epitaxiales de espesor inferior a unas $0.2\mu\text{m}$ y los SQW no se pueden estudiar correctamente mediante AO. Este no es un problema presente en la fotoluminiscencia, ya que esta es un técnica muy sensible, sin embargo de esta técnica se obtienen unos resultados que suelen ser difíciles de interpretar. La información que podemos extraer con la PL sobre los niveles energéticos de una heteroestructura es a menudo escasa, confusa y depende mucho de los conocimientos que a priori tengamos de dicha heteroestructura. Esto es debido a que en las medidas de PL hay una competencia entre transiciones radiativas y no radiativas, de forma que generalmente sólo se presenta el nivel de menor energía (la población de los otros niveles se desexcita, no radiativamente, hasta este nivel), independientemente de la densidad de estados de los niveles. En los semiconductores de volumen, la PL a baja temperatura es debida normalmente a transiciones entre niveles de impurezas (impureza-banda, donador-aceptador,...) a pesar de que sus densidades de estados son mucho menores que las densidades de los estados libres en las bandas.

La AO puede presentar otro problema, relacionado con la estructura de las muestras. Las muestras que analizamos, sean heteroestructuras o capas tensionadas, están crecidas sobre un substrato y la radiación utilizada en la AO ha de atravesar toda la muestra. Por lo tanto, sólo será posible analizar mediante AO aquellas muestras cuyo gap sea menor que el del substrato sobre el que están crecidas puesto que en caso contrario la absorción debida al substrato impedirá que se observe el espectro de AO de la muestra.

Una técnica que aprovecha las ventajas de las dos técnicas anteriores es la Excitación de la Fotoluminiscencia (EPL). Para este tipo de medidas se utiliza un monocromador de detección que se ajusta a una energía dentro de la banda de PL emitida por el material, además la energía de la radiación que excita a la muestra puede variarse mediante otro monocromador. El resultado es que se excitan diferentes niveles $|2\rangle$, $|3\rangle$, ... del semiconductor a unos ritmos g_2 , g_3 , ... respectivamente. Estos ritmos de generación son proporcionales a los coeficientes de absorción $\alpha(E_2)$, $\alpha(E_3)$, ... Una vez poblados, los electrones de los niveles excitados se relajan hacia energías menores, bien radiativamente o no radiativamente (figura 14).

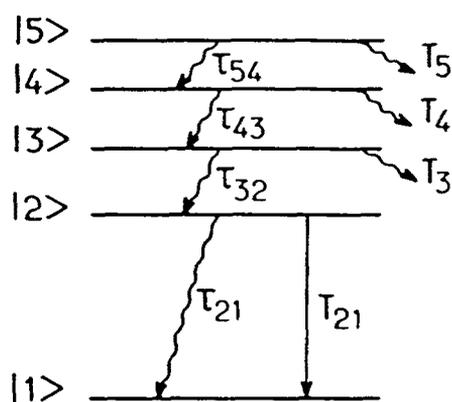


Figura 14. Diagrama de las distintas vías de relajación posibles en medidas PLE.

Así, observando la PL del último nivel, cuando la energía de la radiación incidente coincida con la de uno de los niveles superiores aumentará la señal de PL detectada, puesto que parte de los portadores generados se desexcitarán hasta el nivel del cual observamos la PL.

Por lo tanto, esta técnica tiene la ventaja de la gran sensibilidad de la PL y la claridad de la AO en la interpretación de los resultados, puesto que la intensidad de los picos depende de la densidad de estados. En la figura 15 está representado el montaje utilizado para realizar las medidas de EPL.

El sistema de iluminación consta de una fuente policromática (hemos utilizado una lámpara de incandescencia) y de un monocromador gobernado por ordenador, de forma que podemos controlar la energía de la radiación excitadora automáticamente. La radiación emergente del monocromador se focaliza mediante un espejo esférico, sobre la muestra que se encuentra

en el criostato. De hecho, toda esta sección del montaje es idéntica a la fase de detección del montaje de PL sustituyendo el detector por la lámpara de incandescencia y funcionando en sentido inverso. Una de las grandes diferencias entre los dos montajes reside en la recolección de la radiación emergente de la muestra. Efectivamente, como podemos observar en la figura 16, la radiación que nosotros captamos proviene de uno de los laterales de la muestra, a 90 grados de la radiación incidente. Así aprovechamos al máximo la abertura de las ventanas del criostato y reducimos la luz parásita que proviene del monocromador de excitación.

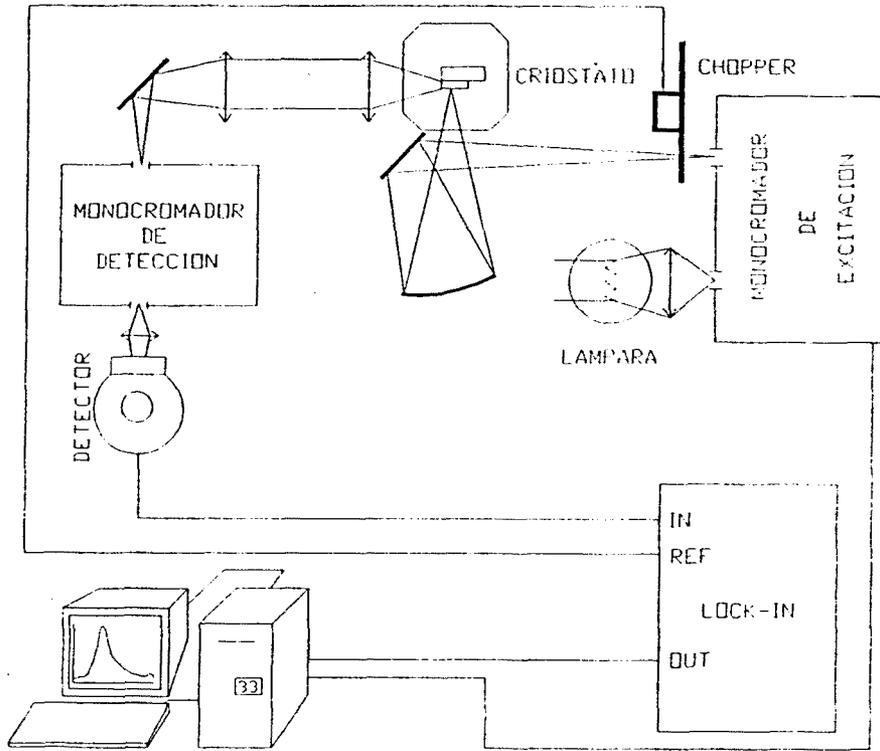


Figura 15. Montaje experimental para las medidas de PLE.

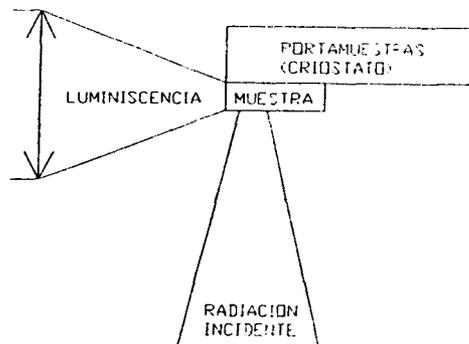


Figura 16. Esquema de iluminación y recolección de señal en las medidas PLE.

La radiación es recogida y focalizada en la rendija del monocromador de detección mediante un sistema de lentes. El monocromador utilizado es un ORIEL modelo 77250 de 220mm de focal con el que podemos trabajar con tres redes de difracción diferentes y cuyas características presentamos en la tabla IV.

líneas/mm	λ central (nm)	$\Delta\lambda/\Delta x$ (nm/mm)
1200	250	6.5
1200	500	6.5
600	1000	13.0

Tabla IV. Características de las redes de difracción utilizadas en el monocromador de detección.

Como se puede ver en esta tabla la resolución de este monocromador es mucho peor que la del monocromador de excitación, esto significa que el intervalo de λ s que hay a la salida del en este monocromador es mayor y por lo tanto también es mayor la intensidad que tenemos en este punto. En este caso es más importante el incremento de intensidad que la pérdida de resolución. Tras el monocromador colocamos el detector que como en el caso de la PL puede ser el de Ge, InAs o InSb.

Como podemos ver, a diferencia del montaje de PL, en éste hemos utilizado lentes en el sistema de detección. Aquí no tendremos problemas de cambio de posición de la imagen debido a aberraciones cromáticas porque en la detección trabajamos con una longitud de onda fija durante toda la medida. Este mismo hecho implica que el sistema de detección no modifique el espectro debido a una función de transferencia, tal como ocurre en la PL. Lo que si hemos de tener en cuenta es que debido al espectro de emisión de la lámpara y a la modificación de éste por la respuesta de los diferentes elementos que componen el sistema excitador, el flujo de fotones que llegan a la muestra es diferente para cada energía de excitación. Por lo tanto el espectro de intensidad de la señal de PLE que medimos $I_{med}(\lambda)$ tendremos que modificarlo por el número de fotones que excitan la muestra para cada

energía. En principio podríamos pensar que midiendo una vez el espectro de excitación $\phi_{exc}(\lambda)$ podríamos utilizarlo para corregir todas las medidas, de forma similar a la corrección que hacemos con la FT del sistema en la PL. Sin embargo, la fuerte dependencia de este espectro con la temperatura de emisión, y por lo tanto con las condiciones de polarización de la lámpara, hacen esto imposible, por el contrario mediremos esta $\phi_{exc}(\lambda)$ cada vez que cinectamos el sistema y una vez estabilizado. Para realizar la medida de esta $\phi_{exc}(\lambda)$ colocamos un detector piroeléctrico justo antes de la muestra, de forma que haciendo un barrido con el monocromador de excitación tendremos la potencia excitadora para cada λ , y dividiendo es por $h\nu$ (energía de los fotones) obtendremos el espectro $\nu_{exc}(\lambda)$ que registraremos en el ordenador para la posterior corrección de los espectros de PLE. Así el espectro final de intensidad de PLE lo obtendremos aplicando la relación :

$$I_{PLE}(\lambda) = \frac{I_{med}(\lambda)}{\phi_{exc}(\lambda)} \quad (21)$$

Donde $I_{med}(\lambda)$ es el espectro que medimos, el cual obtenemos colocando el monocromador de detección en la banda de emisión de PL de la muestra, lo que implica que previamente hemos de realizar la medida del espectro de PL, y haciendo un barrido con el monocromador de excitación.

CARACTERIZACION DE CAPAS EPITAXIALES

II.1-CAPAS EPITAXIALES DEFORMADAS:

Como hemos mencionado con anterioridad, el control de la fracción molar (x) de los elementos del grupo III, que forman parte de las aleaciones de semiconductores ternarios III-V, permite diseñar semiconductores con energías del gap a medida. Ahora bien, la variación de x también afecta a otros parámetros, como por ejemplo el parámetro de red de la aleación. Si hacemos crecer este semiconductor en forma de capa epitaxial sobre un sustrato (en nuestro caso suele ser InP o GaAs), resulta evidente que sólo para un valor de x el parámetro de red de la aleación y del sustrato coincidirán. El resultado que se producirá será la generación de tensiones entre el sustrato y la capa, y puesto que el primero es lo suficientemente grueso, estas tensiones harán que la capa epitaxial se deforme para adaptarse al parámetro de red del sustrato. Por ejemplo, dos de los semiconductores ternarios que se utilizan frecuentemente son el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y el $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$, el acuerdo de parámetro de malla con el InP, como sustrato, ocurre para $x=0.53$ y $x=0.52$ respectivamente, mientras que si se crece $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre GaAs el acuerdo es para $x=0$.

Designemos por a_1 el parámetro de malla del sustrato y por a_2 el de la aleación, sin deformar. Como ya hemos indicado, si suponemos que el sustrato no sufre deformaciones a causa de las tensiones originadas al crecerle la capa epitaxial, será la capa la que intente ajustarse al parámetro de malla del sustrato, sufriendo una deformación biaxial, figura 1.

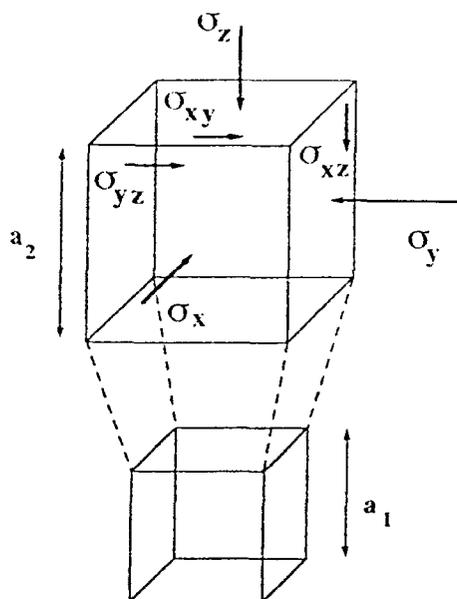


Figura 1. Distribución de esfuerzos que actúa sobre un cristal cúbico sujeto a una deformación elástica.

Si a_2 es mayor que a_1 la capa se verá sometida a una compresión, que reducirá la longitud de los enlaces atómicos en el plano de crecimiento; mientras que en el caso contrario la capa se verá sometida a una tensión, que aumentará la longitud de los enlaces atómicos en dicho plano.

Designaremos por f el desacuerdo de parámetros de malla, que está definido como $f = (a_2 - a_1)/a_1$. Para valores del desacuerdo de parámetro de malla pequeños, y capas epitaxiales no muy gruesas, el crecimiento de éstas tienen lugar de forma coherente, es decir, el material crece sobre el sustrato deformándose elásticamente. Y ajustando completamente su parámetro de malla a_2 al del sustrato en las direcciones del plano de la interficie (plano de crecimiento, o plano xy), es decir $a_2^{\parallel} = a_1$. En la dirección normal a esta interficie el parámetro de malla también se ve modificado, tomando un valor a_2^{\perp} que está relacionado con los esfuerzos originados a través de la teoría de la elasticidad lineal [1,2], en la cual se supone que las deformaciones son proporcionales a los esfuerzos.

Según esta teoría, las deformaciones ϵ_{ij} y los esfuerzos σ_{ij} están relacionados por la ley de Hooke generalizada para materiales monocristalinos :

$$\begin{aligned}\epsilon_{ij} &= S_{ijkl} \sigma_{kl} \\ \sigma_{ij} &= C_{ijkl} \epsilon_{kl}\end{aligned}\tag{1}$$

donde las s_{ijkl} son conocidas como constantes de deformación elástica, y las c_{ijkl} como constantes de rigidez, los subíndices i, j, k y l recorren las coordenadas x, y, z . Tanto las deformaciones como los esfuerzos son tensores de orden dos, mientras que las constantes que los relacionan, s_{ijkl} y c_{ijkl} , son tensores de orden cuatro. Sin embargo, debido a las condiciones de simetría, el número de componentes independientes se ve reducido y las deformaciones y los esfuerzos pueden expresarse como vectores de seis componentes, y las constantes como matrices de 6×6 , que en el caso de un sistema cristalino cúbico e isótropo [3] sólo tienen dos componentes independientes, c_{11} y c_{12} para las constantes de rigidez, y s_{11} y s_{12} para las de deformación :

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & c_{26} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ c_{61} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \\ \epsilon_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & s_{16} \\ s_{21} & s_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & s_{26} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ s_{61} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & s_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} \quad (2)$$

(3)

siendo $c_{44} = (c_{11} - c_{12})/2$ y $s_{44} = 2(s_{11} - s_{12})$.

Estas dos constantes pueden expresarse en función del módulo de Young, E, y el n° de Poisson, ν :

$$c_{11} = \frac{E}{1-2\nu} \frac{1-\nu}{1+\nu}, \quad c_{12} = \frac{E}{1-2\nu} \frac{\nu}{1+\nu} \quad (4)$$

o

$$\nu = \frac{c_{12}}{c_{11} + c_{12}}, \quad E = \frac{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{c_{11} + c_{12}}$$

y las constantes de rigidez pueden expresarse en función de la deformación, y viceversa, en la forma :

$$c_{11} = \frac{s_{11} + s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})} \quad s_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})}$$

$$c_{12} = \frac{s_{12}}{(s_{11} - s_{12})(s_{11} + 2s_{12})} \quad o \quad s_{12} = -\frac{c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})} \quad (5)$$

$$c_{44} = \frac{1}{s_{44}} \quad s_{44} = \frac{1}{c_{44}}$$

En la tabla presentamos los valores de las constantes de rigidez elástica, junto los del parámetro de red y los potenciales de deformación, de varios semiconductores III-V :

Compuesto	a (Å)	C ₁₁ (10 ¹⁰ Pa)	C ₁₂ (10 ¹⁰ Pa)	a (eV)	b (eV)
AlAs	5.6602	12.02	5.70	7.9	-1.5
GaP	5.4512	14.12	6.25	3.0	-1.5
GaAs	5.6533	11.26	5.71	2.7	-1.7
InP	5.8688	10.11	5.61	2.9	-2.0
InAs	6.0584	8.33	4.53	2.5	-1.8

Tabla I Parámetro de red, coeficientes de elasticidad y de deformación de algunos semiconductores binarios III-V

Para conocer los valores de estos parámetros en los semiconductores ternarios, formados a base de aleaciones de semiconductores binarios, se suele hacer una interpolación lineal entre los valores que toman estos parámetros en los binarios, en función de la fracción molar en que forman parte cada uno de ellos en el ternario.

Además, el hecho de que la deformación que se produce en la capa sea biaxial hace que tanto las ϵ_{ij} como las σ_{ij} sean igual a cero para $i \neq j$, y que σ_{zz} sea igual a cero. También se cumple que $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \equiv \epsilon^{\parallel}$, deformación en el plano de la interficie. Y renombraremos $\epsilon_{zz} \equiv \epsilon^{\perp}$ que es la deformación normal a la interficie. Estas deformaciones se definen de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \epsilon^{\parallel} &= \frac{a_2^{\parallel} - a_2}{a_2} \\ \epsilon^{\perp} &= \frac{a_2^{\perp} - a_2}{a_2} \end{aligned} \quad (6)$$

Y estas dos expresiones las relaciona la teoría de la elasticidad a través de la relación :

$$\epsilon^{\perp} = -\frac{2\nu}{1-\nu} \epsilon^{\parallel} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \epsilon^{\parallel} \quad (7)$$

Al igual que las constantes de rigidez, el parámetro de malla del compuesto ternario se calcula haciendo una interpolación lineal de los valores del parámetro de los dos semiconductores binarios que forman la aleación, aproximación del cristal virtual. Así, si el substrato es de GaAs y la capa epitaxial que crecemos es de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, a partir de los datos de la tabla I, podemos comprobar que para cualquier valor de x , a_2 siempre (parámetro de red del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sin deformar) es mayor que a_1 (correspondiente al GaAs). Por lo tanto, si el crecimiento es coherente, para cualquier valor de x la capa epitaxial estará sometida a una compresión biaxial. Si en cambio utilizamos InP como substrato se pueden dar tres situaciones diferentes: si $x < 0.53$ entonces $a_2 < a_1$ y la capa estará en tensión; si por el contrario $x > 0.53$ ocurre que $a_2 > a_1$ y por lo tanto la capa estará comprimida; y por último si $x = 0.53$ coinciden los dos parámetros de malla y la capa no se deformará.

En este mismo capítulo veremos como afectan las deformaciones sobre propiedades del semiconductor, tal como la estructura de bandas. Ahora, sin embargo, veamos algunas consideraciones sobre la problemática del crecimiento de las capas.

II.2-LIMITE DE CRECIMIENTO COHERENTE

El crecimiento de capas epitaxiales de compuestos con un parámetro de malla distinto al del substrato presenta varios problemas. Cuando se hacen crecer las primeras monocapas los átomos se van situando de forma que el parámetro de malla de la capa se ajusta al del substrato, provocando un crecimiento coherente de la capa mediante una deformación elástica de ésta. Esta deformación supone un cambio en la longitud de los enlaces atómicos, y por lo tanto un incremento de la energía potencial de la capa. A medida que aumenta el espesor de la capa aumenta la energía potencial acumulada, hasta llegar a un espesor crítico[4], t_c ,

a partir del cual es energéticamente más favorable una relajación plástica inducida por la creación de defectos, que continuar con el proceso de deformación elástica.

El valor de este espesor crítico (t_c) depende del desacuerdo entre parámetros de malla, f , y por tanto, para compuestos ternarios de la fracción molar (x). Se han realizado muchos cálculos teóricos para determinar el valor de t_c basados en diferentes hipótesis. Los primeros fueron realizados por Van der Merwe[5,6] y se basan en un balance energético entre la densidad superficial de energía elástica en la capa y la energía asociada a una red de dislocaciones localizada en la interficie entre la capa y el sustrato. Pero este modelo tiene varios problemas puesto que en primer lugar supone la creación simultánea de todas las dislocaciones, mientras que esto es un proceso secuencial; y en segundo lugar, supone que las dislocaciones se producen en la interficie, y en muchas ocasiones se producen en la capa. Uno de los modelos más interesantes, de los basados en condiciones de equilibrio, fue descrito por Matthews et al.[7] (MB), el cual obtiene una relación entre f y t_c considerando la condición de equilibrio entre las fuerzas que actúan sobre una dislocación. Hay medidas experimentales, como las de Temkin et al.[8] que dan valores de t_c muy próximos a los predichos por este modelo para QW de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre InP , lo mismo ocurre con el sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ según las medidas de Anderson et al.[9]. Sin embargo otras experiencias muestran heteroestructuras que mantienen un crecimiento coherente por encima de los límites predichos por este modelo, tal es el caso de sistemas formados por capas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}$ sobre un sustrato de InP [10,11], y las de Tacano et al.[12] realizadas mediante RHEED (Reflection High Energy Electron Diffraction) in situ durante el crecimiento de capas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$. Estas últimas medidas se ajustan razonablemente bien a otro modelo también basado en condiciones de equilibrio, en el cual se establece un balance entre la energía de deformación elástica y la asociada a las dislocaciones, en este caso suponiendo que no hay dislocaciones previas en el sustrato a diferencia del modelo MB. Este modelo fue propuesto por People et al.[13] (PB). En la figura 2 hay representada la evolución de t_c con x , para el caso del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ según estos dos últimos modelos.

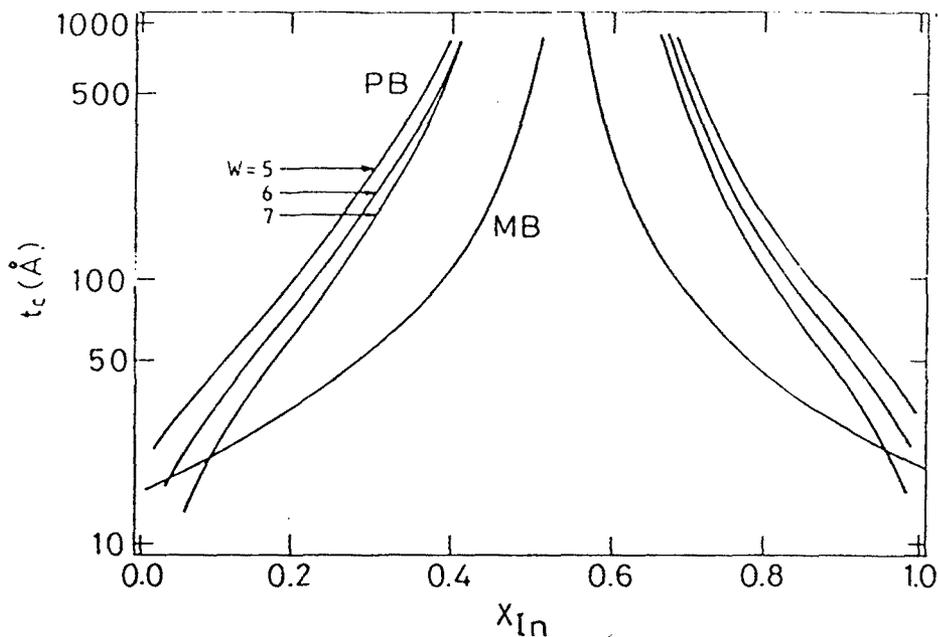


Figura 2. Valores de espesor crítico según los modelos Matthews-Blakeslee (MB) y People y Bean (PB), para $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crecido sobre InP en función de x_{In} .

Todos estos modelos presentan un problema común y es el considerar sólo la energía de nucleación de las dislocaciones, sin considerar la cinética de dicho proceso. Por esta razón, sólo dependen de f , y no de la temperatura y velocidad de crecimiento. Se han propuesto varios modelos, como el de Dodson et al.[14] (DT) en el que las dislocaciones evolucionan con el tiempo y están sometidas a una activación térmica. Estos dos efectos se han podido comprobar en experiencias de recocido durante observaciones de microscopía TEM en sistemas $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$, realizadas por Hull et al.[15]. Y las medidas realizadas por Whaky et al.[16] sobre el grado de relajación de tensiones según f y x con muestras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ crecidas a diferentes temperaturas.

La creación de dislocaciones en la capa epitaxial representa una degradación de dicha capa. En principio las deformaciones cuyo vector de Burger permanece en la interficie, es decir aquellas que no penetran en la capa epitaxial, son las que mayor cantidad de energía elástica pueden relajar [17] y las que menos degradan la capa, pero resultan difíciles de formar. Por lo que generalmente se crean dislocaciones que penetran en la capa degradando la calidad cristalina de ésta que, en definitiva, es donde se fabricarán los dispositivos electrónicos.

Además de este proceso de generación de dislocaciones, existe otro fenómeno que también da origen a dislocaciones durante el crecimiento de la capa epitaxial debido a la forma en que ésta se crece. Existen varias formas de crecimiento[18], la más sencilla de las cuales consiste en un crecimiento bidimensional (2D o de Frank van der Merwe), en el que la epitaxia crece monocapa a monocapa; un segundo modo es el crecimiento de islas (3D o de Volmer-Weber); y por último el crecimiento Stranski-Krastanov (o 2D-3D) que se caracteriza porque inicialmente se realiza un crecimiento bidimensional hasta alcanzar un determinado espesor, llamado t_{2D-3D} , a partir del cual se produce una nucleación tridimensional de islas. Este último es el proceso más frecuente en el crecimiento de capas deformadas tales como el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre GaAs [19,20], InAs sobre GaAs [21,22], etc. En cualquier caso, el modo en que crecerá cada heteroestructura será aquel mediante el cual el sistema tenga mínima energía, y dependerá de las condiciones en que se realice la epitaxia y del valor de f , únicamente en los sistemas deformados. En realidad, la configuración 2D, que daría lugar a superficies planas, casi nunca es la configuración de mínima energía[23] una vez creadas un número determinado de monocapas deformadas. Esto nos indicaría un crecimiento Stranski-Krastanov para todas las capas deformadas, sin embargo, existe una energía de activación del modo 3D, además de que a bajas temperaturas la movilidad de los átomos se reduce hasta tal punto que puede impedir la formación de islas, manteniendo un sistema de crecimiento bidimensional.

En cualquier caso la relajación de la capa se producirá a través de dislocaciones tanto si el crecimiento es 2D puro, como tras la formación de islas 3D, puesto que éstas acaban generando dislocaciones. El tener un tipo de crecimiento u otro dependerá tanto del desacuerdo de parámetros de malla (f) como de la temperatura de crecimiento (T_g).

II.3-ALEACIONES DE COMPUESTOS TERNARIOS

El sólo hecho de crear una aleación ya presenta ciertos problemas, puesto que no todas las composiciones son posibles. La aleación es estable sólo si existe un equilibrio termodinámico, es decir si al variar infinitesimalmente la concentración de uno de los compuestos la energía libre del sistema aumenta. Si hacemos una representación de las aleaciones posibles en función de la fracción molar de los compuestos binarios que la forman,

obtendremos dos zonas diferentes: la de las aleaciones estables, que llamaremos rango de miscibilidad; y la de las no estables, a la que llamamos gap de miscibilidad. Las dos zonas están separadas por una línea llamada curva de descomposición espinodal. Si intentamos crear una aleación cuya composición se encuentra en el gap de miscibilidad, se produce una separación de fases de los compuestos binarios, o descomposición espinodal, que hace la composición no sea constante a través del semiconductor. En la figura 3 se representa las curvas espinodales para el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ en función de la temperatura de crecimiento.

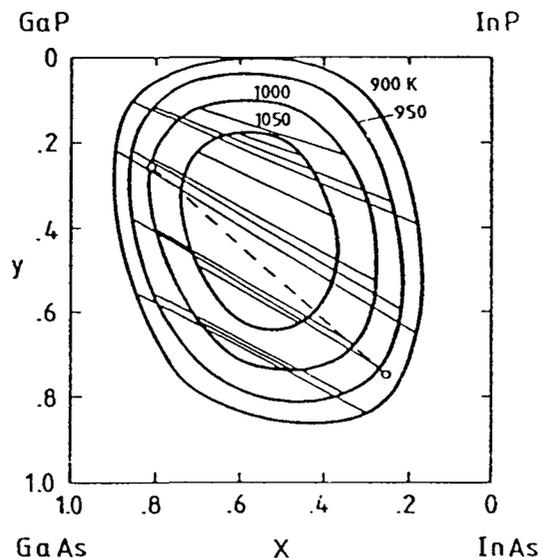


Figura 3. Curvas isotermas del gap de inmiscibilidad predichas por las teorías de De Crémoux, para combinaciones InGaAsP.

Cuando se crece una aleación en forma de capa epitaxial sobre un sustrato con distinto parámetro de malla, además de los términos de energía libre debidos a la mezcla de componentes, hay que añadir otro término debido a la energía elástica de deformación. La contribución de este término provoca una estabilización de la aleación en un rango de composiciones y temperaturas las cuales, en estado relajado, pertenecerían al gap de miscibilidad[24].

Por otra parte, según Stringfellow[25], se pueden conseguir aleaciones metaestables, que originalmente caerían dentro del gap de miscibilidad, mediante técnicas de crecimiento como la MBE en donde el proceso está más controlado por limitaciones cinéticas que por termodinámicas. Mientras que en técnicas como LPE o VPE que trabajan cerca del

equilibrio, esto no sucede.

Experimentalmente se han obtenido tanto capas epitaxiales de aleaciones metaestables [25], como capas epitaxiales en las que mediante una descomposición espinodal se produce una modulación de composición [26].

II.4-VARIACION DE LA DEFORMACION CON LA COMPOSICION

La deformación que se produce al crecer una capa epitaxial de un semiconductor de parámetro de malla a_2 , sobre un sustrato de parámetro a_1 , vienen dadas por la ecuación(5), y si el crecimiento es coherente la podemos aproximar a la expresión :

$$\epsilon_{m\acute{a}x} = \frac{a_2 - a_1}{a_1} \quad (8)$$

aunque en el caso general, cuando aparecen dislocaciones, habrá un cierto grado de relajación y la deformación la expresaremos como :

$$\epsilon^{\parallel} = \eta \epsilon_{m\acute{a}x} = \eta \frac{a_2 - a_1}{a_1} \quad (9)$$

donde η es la deformación remanente y toma valores entre 0 (correspondiente al caso de una capa totalmente relajada) y 1 (caso en que la capa esta totalmente deformada, es decir el crecimiento ha sido coherente).

Como en el caso de las muestras con las que hemos trabajado, la capa epitaxial es un semiconductor ternario, por tanto el parámetro de malla es función de la fracción molar x de la aleación. Vamos a calcular la evolución de $\epsilon_{m\acute{a}x}$ al variar x , en las dos estructuras con que hemos trabajado; el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ y el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. En el primer caso tendremos:

$$\epsilon_{m\acute{a}x} = \frac{a_{\text{InAs}}x + a_{\text{GaAs}}(1-x) - a_{\text{InP}}}{a_{\text{InP}}} \quad (10)$$

y tomando los valores de la tabla I obtenemos :

$$\epsilon_{m\acute{a}x} = 0.0690x - 0.0368 \quad (11)$$

Procediendo de la misma forma en el sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ obtenemos :

$$\epsilon_{m\acute{a}x}(x) = 0.07164x \quad (12)$$

En la figura 4 hemos representado estas dos funciones.

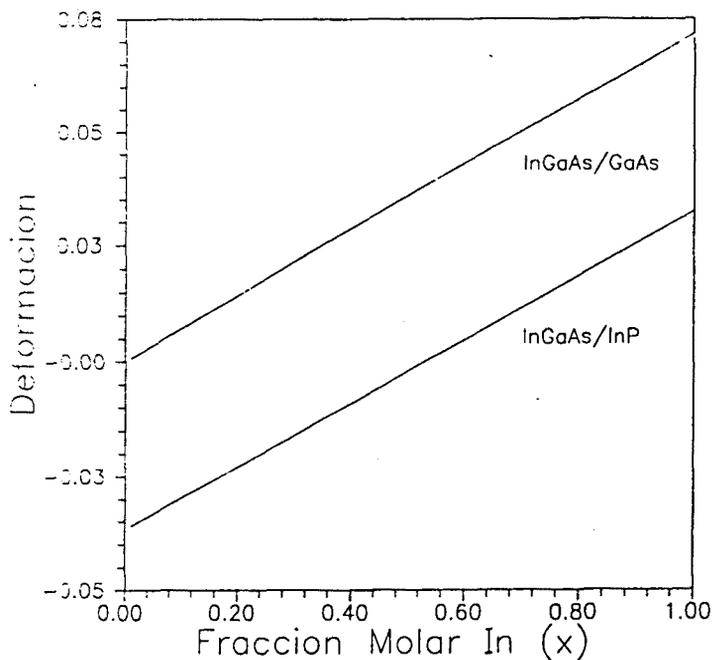


Figura 4. Evolución de la deformación en las capas epitaxiales de InGaAs sobre GaAs o InP en función de la fracción molar de In.

II.5-INFLUENCIA DE LA DEFORMACION EN LA ESTRUCTURA DE BANDAS

Ya hemos visto que las deformaciones originadas al crecer las capas epitaxiales pueden dar origen a diferentes configuraciones de éstas. Así, puede ocurrir que el crecimiento sea coherente y la capa mantenga íntegramente la de formación, o pueden aparecer dislocaciones que den lugar a una relajación, parcial o total de dichas deformaciones, pudiendo producirse una modulación de composición, etc. No hay que olvidar que el estado de la capa es esencial, porque es en ella donde se realizarán los dispositivos, por tanto resulta evidente que es sumamente importante el poder realizar una caracterización de las capas crecidas. Para poder realizar dicha caracterización mediante técnicas ópticas será necesario conocer la estructura de bandas del semiconductor y como afectarán a ésta las características de la capa, en particular las deformaciones.

El Hamiltoniano que tiene en cuenta las variaciones que inducen las deformaciones sobre las bandas del semiconductor fue descrito por Pikus and Bir[30,31], y tiene la forma siguiente:

$$H_{\epsilon} (i) = -a^i (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) - eb^i \left[\left(L_x^2 - \frac{1}{3} L^2 \right) \epsilon_{xx} + c.p. \right] - \frac{ed^i}{\sqrt{3}} \left[L_x L_y \epsilon_{xy} + c.p. \right] \quad (13)$$

donde las ϵ_{ij} son las componentes del tensor deformación, L el operador momento angular, $\{L_x L_y\} = (L_x L_y + L_y L_x)/2$, el índice i es para cada banda del semiconductor, y c.p. significa permutación cíclica. Los parámetros a, b y d son los potenciales de deformación, a es el correspondiente a la deformación hidrostática, b y c corresponden a la cizalladura. Así, los tres términos del hamiltoniano (12) tienen el origen siguiente :

- 1- Es la componente hidrostática de la deformación, es decir en la que varía el volumen del cubo formado por la célula cristalina básica, manteniendo los tres lados iguales $a=b=c$. Este término afecta tanto a la banda de conducción como a la de valencia, y su efecto es la variación del valor del gap.

2- Es la componente de cizalla que transforma el cubo en un prisma de lados diferentes $a \neq b \neq c$. Este término sólo afecta a la banda de valencia, rompiendo la degeneración de la subbanda correspondiente a $J=3/2$ en $K=0$, pero manteniendo el valor medio del gap. Como se puede comprobar este término se anula para $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = \epsilon_{zz}$.

3- Este último término es la componente de cizalla ortorómbica, que transforma el prisma en un romboedro. Su contribución sólo es distinta de cero si $\epsilon_{xx} \neq 0$, $\epsilon_{yy} \neq 0$, $\epsilon_{zz} \neq 0$.

Es importante hacer notar que este hamiltoniano, y por lo tanto los potenciales de deformación a^i , b^i y d^i son para cada banda, sin embargo puesto que sólo somos capaces de medir diferencias de energía entre bandas, únicamente se puede determinar los potenciales de deformación relativos entre bandas.

Apliquemos este proceso al caso específico de las deformaciones originadas en una capa epitaxial. En este caso se produce una deformación biaxial, lo cual quiere decir que $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \equiv -\epsilon^{\parallel}$, $\epsilon_{zz} = (2c_{12}/c_{11})\epsilon^{\parallel} \equiv \epsilon^{\perp}$, y $\epsilon_{xy} = \epsilon_{yz} = \epsilon_{zx} = 0$. De las apreciaciones anteriores podemos ver que sólo habrá componente hidrostática y de cizalla tetragonal, ya que se anula la de deformación ortorómbica. El hamiltoniano queda reducido a :

$$H_t = 2a \left(\frac{c_{11} - c_{12}}{c_{11}} \right) \epsilon^{\parallel} - 3b \left(\frac{c_{11} + 2c_{12}}{c_{11}} \right) \epsilon^{\parallel} \left(L_z^2 - \frac{1}{3} L^2 \right) \quad (14)$$

Aplicando este hamiltoniano sobre las funciones de onda correspondiente a la banda de conducción (BC) y la de valencia (BV), obtendremos los autovalores, que nos dan unas variaciones de energía entre BC y BV en $k=0$ igual a [32]:

$$\begin{aligned}
E_C - E_{V_{HH}} &= E_g - \left[2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} - b \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \right] \epsilon^{\parallel} \equiv E_g - \Delta_{HH} \epsilon^{\parallel} \\
E_C - E_{V_{LH}} &= E_g - \left[2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} + b \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \right] \epsilon^{\parallel} \equiv E_g - \Delta_{LH} \epsilon^{\parallel} \\
E_C - E_{SO} &= E_g - 2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} \epsilon^{\parallel} \equiv E_g - \Delta_{SO} \epsilon^{\parallel}
\end{aligned} \tag{15}$$

Estas expresiones, como veremos, son básicas para la caracterización de las capas epitaxiales. En primer lugar podemos ver que el comportamiento es distinto según tengamos una capa comprimida $\epsilon^{\parallel} < 0$, o tensada $\epsilon^{\parallel} > 0$. En el primer caso se cumple que $E_C - E_{HH} > E_C - E_{LH}$ y por lo tanto las transiciones de mínima energía, que determinan la energía del gap, se realizan entre la BC y la subbanda de valencia de huecos ligeros (BV_{LH}); mientras que en el segundo caso las transiciones son entre la BC y la subbanda de valencia de huecos pesados (BV_{HH}). En la figura 5 está representada la estructura de bandas entorno a $k=0$, para los dos tipos de deformaciones, así como para el caso en que no hay deformación.

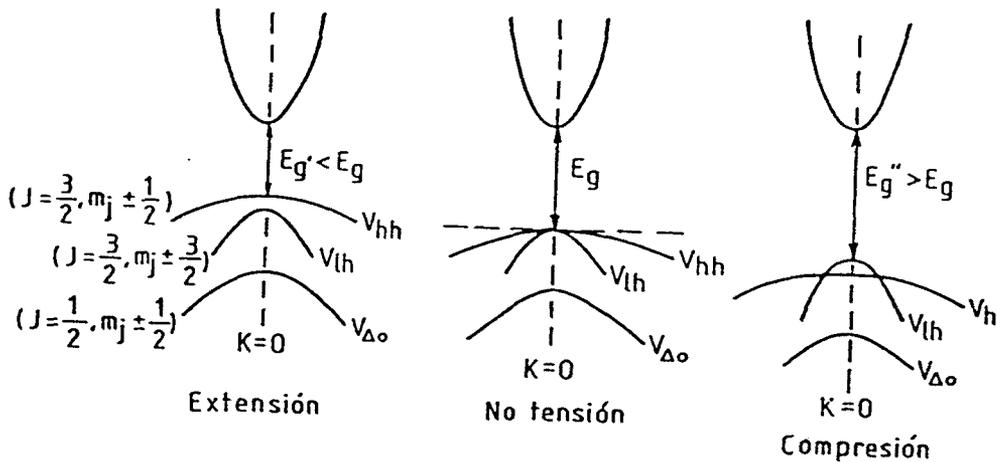


Figura 5. Desdoblamiento de E_v en $k=0$, en la banda de huecos ligeros $E_v(LH)$ y la banda de huecos pesados $E_v(HH)$ para un material deformado elásticamente.

Volvamos a las ec.(14), ellas nos dan los desplazamientos energéticos de las subbandas de valencia en función de la deformación ϵ^{\parallel} , respecto del sistema sin deformar. Ahora bien,

estas ecuaciones dependen de los potenciales de deformación a y b , y de los coeficientes de rigidez c_{11} y c_{12} , y éstos dependen de la fracción molar de los componentes de la aleación que forman el semiconductor ternario. Ya hemos dicho que generalmente se realiza una interpolación lineal para obtener los valores de estos coeficientes. Este es el procedimiento que hemos seguido para calcular los valores de los potenciales de deformación, pero para el caso de los coeficientes de rigidez se nos presenta un problema. El problema consiste en que es tan lícito suponer una variación lineal para las constantes de rigidez c_{ij} , como para las de deformación elástica s_{ij} , pero esto no puede ocurrir simultáneamente puesto que éstas están interrelacionadas, de una forma no lineal, por las ecuaciones(4). El procedimiento que hemos seguido consiste en calcular los factores Δ_{HH} y Δ_{LH} de las dos formas posibles (interpolando las c_{ij} y calculando las s_{ij} , y viceversa), para la aleación $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, con el objetivo de ver si hay diferencias sustanciales entre las dos aproximaciones. Hemos representado estos cálculos en la figura 6.

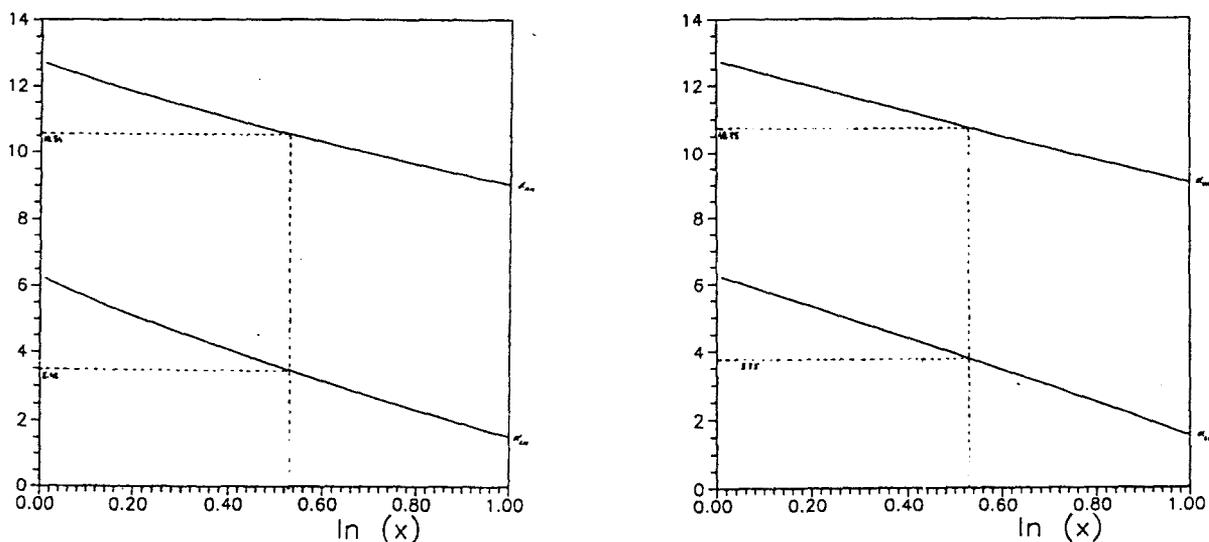


Figura 6. Cálculo de los coeficientes multiplicativos Δ_{HH} y Δ_{LH} bajo las dos suposiciones: variación lineal de c_{ij} (a) y variación lineal de s_{ij} (b).

Las diferencias que resultan de coger una aproximación u otra quedan dentro de los márgenes de error que obtendremos experimentalmente, sobre todo porque el dato que utilizaremos en la caracterización de las capas es la diferencia $\Delta_{HH}-\Delta_{LH}$, y en este caso la mayor diferencia entre los dos modelos no llega a un 0.5 por ciento. El resultado que nos da la diferencia anterior nos permite conocer la deformación que existe en la capa epitaxial, a partir de la distancia energética entre las dos subbandas de valencia puesto que si restamos las dos primeras ecuaciones del sistema (9) nos queda :

$$\Delta E_{HH} - \Delta E_{LH} = (\Delta_{HH} - \Delta_{LH}) \epsilon \parallel \quad (16)$$

II.6-VARIACION DE LA ENERGIA DEL GAP CON LA COMPOSICION

Hemos visto que una variación en las fracciones molares de los componentes de una aleación, que forma un semiconductor ternario, hace variar el parámetro de red y por lo tanto, si es una capa epitaxial, la energía del gap debido a efectos de deformación. Pero de hecho, la propia variación de composición provoca una variación global de la energía del gap, afectando por igual a todas las subbandas de valencia. La energía del gap del semiconductor ternario varía entre los valores de las energías de los dos semiconductores binarios que lo componen, la variación suele ajustarse a una ley cuadrática. Para el caso del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ es la siguiente [33] :

$$\begin{aligned} E_{g_0}(x) &= 1.519 - 1.108x - 0.50x(1-x) & a \ 4K \\ E_{g_0}(x) &= 1.51 - 1.10x - 0.53x(1-x) & a \ 77K \\ E_{g_0}(x) &= 1.42 - 1.07x - 0.46x(1-x) & a \ 300K \end{aligned} \quad (17)$$

Evidentemente, en este caso hemos supuesto que el semiconductor se encuentra libre de deformaciones. En el caso de que las hubiese tendríamos que añadir el término calculado en el apartado anterior que da la contribución debida a las deformaciones, quedando :

$$E_g(x) = E_{g_0}(x) + \Delta E(\epsilon) \quad (18)$$

En la figura 7 hemos representado la evolución de la energía del gap en el caso de que no haya deformaciones, junto con la de E_{HH} y E_{LH} en el caso de que sí las haya. Esta representación la hemos realizado para dos sistemas diferentes el de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$, figura (7a), y el de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, figura (7b); suponiendo en ambos casos que la capa ha crecido coherentemente con el sustrato. Hemos hecho variar la fracción molar x desde 0 (GaAs) hasta 1 (InAs).

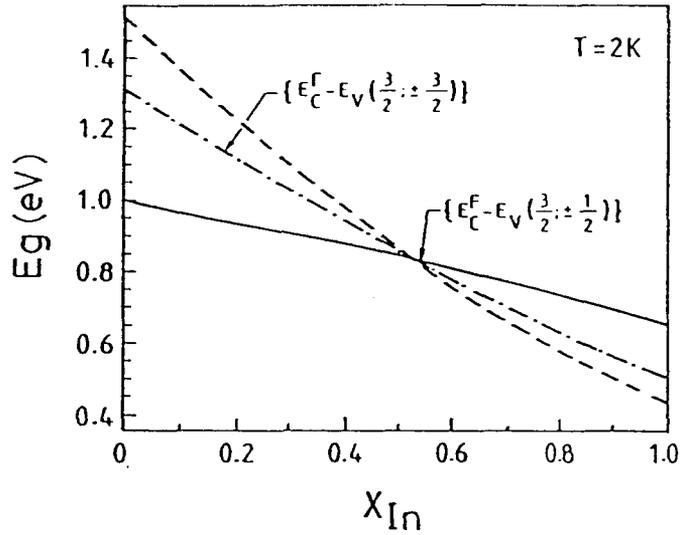


Figura 7. Valor de la banda prohibida de energía para el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crecido pseudomórficamente sobre $\text{InP}(001)$ en función de x_{In} . (---) E_g del compuesto ternario en estado relajado; (—) $E_g(\text{HH})$; (-·-) $E_g(\text{LH})$.

En el primer caso podemos ver que hay un cambio de comportamiento para $x=0.3$, composición para la cual hay acuerdo de parámetro de malla entre la capa y el sustrato. Para x menores vemos que la energía del gap es la diferencia entre BC y BV_{HH} , mientras que para x mayores es entre BC y BV_{LH} . En cambio en el sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ las transiciones de mínima energía las tenemos siempre entre BC y BV_{LH} .

A partir de las ecuaciones (16) podemos conocer el valor de la composición mediante el valor de la energía del gap. Una vez conocida la fracción molar x podemos calcular la deformación máxima y junto con la medida de la deformación que presenta la capa ϵ^{\parallel} , podemos calcular el tanto por ciento de relajación de dicha capa, es decir, el valor de η . Además, partiendo de la ecuación (12) podemos relacionar las dispersiones energéticas con las de composición. Si diferenciamos dicha ecuación nos queda :

$$dE_g = \left(\frac{dE_{g_0}}{dx} \right) dx + \left(\frac{d\Delta E(x)}{d\epsilon} \frac{d\epsilon}{dx} \right) dx \quad (19)$$

Supongamos la heteroestructura formada por $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$, en este caso la deformación viene dada por:

$$\varepsilon(x) = \eta \frac{a_{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}} - a_{\text{InP}}}{a_{\text{InP}}} = \eta (0.068x - 0.0368) \quad (20)$$

donde hemos supuesto que hay una cierta relajación de la deformación. Por otra parte sabemos que $\Delta E_{\text{HH}}(\varepsilon) = \Delta_{\text{HH}} \varepsilon^{\parallel}$ y $\Delta E_{\text{LH}}(\varepsilon) = \Delta_{\text{LH}} \varepsilon^{\parallel}$. Introduciendo estas expresiones, junto con (19), en la ecuación (18) obtenemos las siguientes relaciones entre dispersiones energéticas y de composición en el sistema $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ (a 4K) :

$$\begin{aligned} dE_{\text{HH}} &= [-1.608 + x + \eta \Delta_{\text{HH}} 0.068] dx && \text{para } BV_{\text{HH}} \\ dE_{\text{LH}} &= [-1.608 + x + \eta \Delta_{\text{LH}} 0.068] dx && \text{para } BV_{\text{LH}} \end{aligned} \quad (21)$$

Como veremos más adelante, estas relaciones son válidas en ciertas ocasiones, pero en otras el origen de las dispersiones energéticas no son las dispersiones de composición sino que hay otros fenómenos distintos que dan origen a las dispersiones de energía.

II.7-MUESTRAS

En los estudios realizados en el presente capítulo hemos utilizado muestras que consisten en capas epitaxiales de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crecidas sobre sustratos de $\text{InP}(100)$ o de $\text{GaAs}(100)$. En todos los casos las capas epitaxiales fueron crecidas en un reactor VG SEMICOM V80H de haz molecular (MBE), salvo para la muestra JLV001 que fue crecida mediante LVE. Se han crecido capas epitaxiales de distinto espesor, diferente composición (fracción molar de In, x), y a diferentes temperaturas. En la tabla II se presenta un resumen de las principales características que nos proporciona el tecnólogo sobre dichas muestras.

Muestra	Espesor (μm)	x (In)	T _g (°C)	Substrato
AL138	2.80	0.455	350	GaAs
AL157	2.80	0.548	350	GaAs
AL159	2.80	0.736	350	GaAs
AL217	2.80	0.191	350	GaAs
AL442	0.49	0.543	515	InP
AL444	1.96	0.543	515	InP
AL445	0.29	0.543	515	InP
AL446	0.74	0.543	515	InP
AL447	0.98	0.543	515	InP
AL670	1.60	0.504	515	InP
AL957	0.50	0.596	515	InP
AL958	0.50	0.625	515	InP
AL1049	1.80	0.54-0.55	475	InP
AL1051	1.80	0.54-0.55	500	InP
AL1052	1.80	0.54-0.55	450	InP
AL1053	1.80	0.54-0.55	525	InP
AL1104	1.80	0.54-0.55	525	InP
AL1105	1.80	0.54-0.55	550	InP
JLV001		0.514		InP

Tabla II Relación de muestras utilizadas en la caracterización de capas epitaxiales.

II.8-FORMA DE LOS ESPECTROS DE ABSORCION OPTICA

Uno de los tipos de medidas experimentales que hemos realizado para caracterizar las capas epitaxiales, mediante los parámetros analizados anteriormente, son las de absorción óptica (AO). En la figura 8 hemos representado un espectro típico de AO, de una capa epitaxial deformada, en el podemos ver, como característica principal, dos frentes de absorción debidos cada uno de ellos a las transiciones desde BV_{HH} hacia BC y desde BV_{LH} hacia BC. A partir del valor absoluto de la energía del primer frente obtendremos la energía del gap, y de la diferencia de las dos energías obtendremos la separación energética de las dos subbandas de valencia. Con estos resultados podremos calcular la composición, deformación y tanto por ciento de deformación remanente.

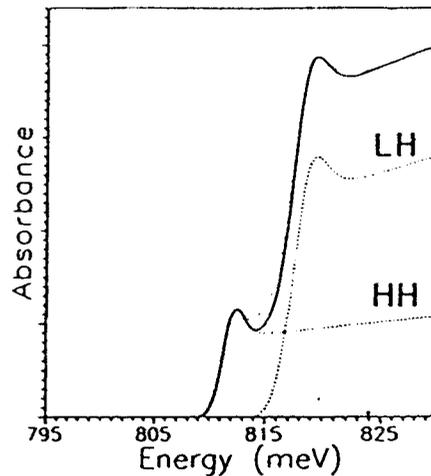


Figura 8. Ejemplo de ajuste de un espectro de absorción óptica (muestra JLV001) mediante la ecuación 21, teniendo en cuenta la contribución de las dos subbandas de valencia HH y LH.

El problema reside en que los frentes de absorción no son escalones, sino que tienen una subida que depende tanto de la propia forma del coeficiente de absorción, como de la dispersión energética. Esto hace que no podamos determinar las energías simplemente del espectro experimental, sino que tenemos que ajustar dicho espectro a la expresión analítica del coeficiente de absorción.

Según Elliot [34], la dependencia energética de la absorción óptica de un semiconductor, teniendo en cuenta la interacción excitónica, viene dada por :

$$\alpha(\hbar\omega) = A \frac{2\pi\sqrt{R}}{\hbar\omega} \left[\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2R}{n^3} \delta\left(\hbar\omega - E_g + \frac{R}{n^2}\right) + \frac{H(\hbar\omega - E_g)}{1 - \exp\left[-2\pi\sqrt{\frac{R}{\hbar\omega - E_g}}\right]} \right] \quad (22)$$

Donde H es la función escalón, R la energía del excitón, E_g la energía del gap, y la constante A :

$$A = \frac{32\pi N x^2 e^2}{c h e^4} \quad (23)$$

contiene el elemento de matriz x de la transición dipolar eléctrica.

Esta fórmula es exacta para el caso de BC y BV no degeneradas y parabólicas, y tiene en cuenta la interacción coulombiana entre electrones y huecos. El primer término entre paréntesis representa la absorción discreta del espectro, $\hbar\omega < E_g$, debida exclusivamente al excitón. Podemos ver que esta zona del espectro está representada por las energías que cumplen $\delta(\hbar\omega - E_g + (R/n^2))$, es decir las energías $E_g - R$, $E_g - (R/4)$, $E_g - (R/9)$, etc. que corresponden al estado fundamental y los primeros estados excitados. Además, podemos ver que su intensidad es proporcional a $R^{3/2}$ y disminuye rápidamente para los estados excitados, puesto que depende de $1/n^3$. El segundo término del paréntesis corresponde a la parte continua del del espectro, $\hbar\omega > E_g$, tanto la contribución excitónica, como la debida a la absorción fundamental banda-banda. De hecho, esta última podemos obtenerla haciendo el límite para R tendiendo a cero, tras lo cual nos queda :

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{A(\hbar\omega - E_g)^{1/2}}{\hbar\omega} \quad (24)$$

que es la expresión clásica de la absorción fundamental banda-banda, sin interacción coulombiana. La contribución excitónica en esta parte del espectro es continua y podemos

analizar cual será su contribución asintótica para $\hbar\omega \gg R$, en este límite la expresión de la absorción queda :

$$f(\hbar\omega) = \frac{1}{1 - \exp\left[-2\pi\sqrt{\frac{R}{\hbar\omega - E_g}}\right]} \quad (25)$$

podemos hacer un desarrollo en serie y nos queda :

$$f(x) = \frac{1}{2\pi x^{1/2} - \frac{1}{2}(2\pi x^{1/2})^2 + \dots} \quad (26)$$

siendo $x \equiv \frac{R}{\hbar\omega - E_g}$

Si nos quedamos solamente con el primer término $f_0 = 1/(2\pi x^{1/2})$, resulta que éste es el término correspondiente a la absorción fundamental. Veamos cuál es la modificación que introduce el excitón :

$$f_1(x) - f_0(x) = \frac{1}{2\pi x^{1/2} - \frac{1}{2}(2\pi x^{1/2})^2} - \frac{1}{2\pi x^{1/2}} = \frac{\frac{1}{2}(2\pi x^{1/2})^2}{(2\pi x^{1/2})^2 - O(x^{6/2})} \approx 0.5 \quad (26)$$

Por lo tanto el incremento introducido es aproximadamente constante y del orden de $0.5A2\pi\sqrt{R}/(\hbar\omega)$. En la figura 9 hemos representado algunas simulaciones de espectros de absorción en las dos situaciones, suponiendo que sólo hay absorción fundamental, y teniendo en cuenta la contribución del excitón. En ellos podemos ver los efectos excitónicos para energías inferiores y superiores al gap. Además podemos ver la variación de la intensidad de absorción con la energía de ligadura R del excitón para estados discretos, así como el número de estados perceptibles en función de dicha energía.

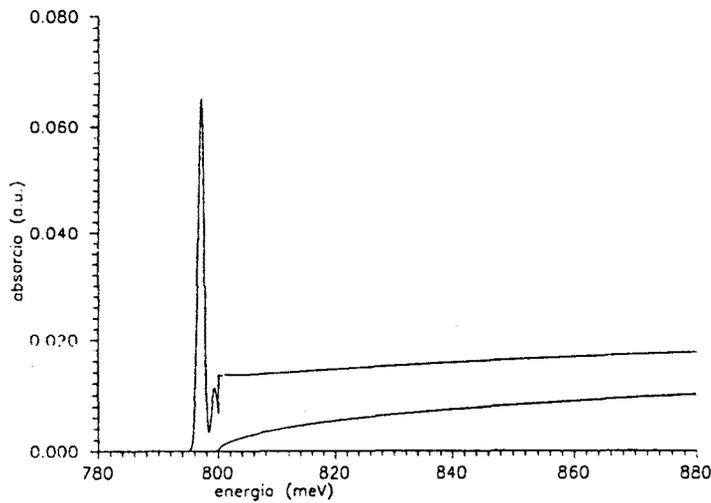
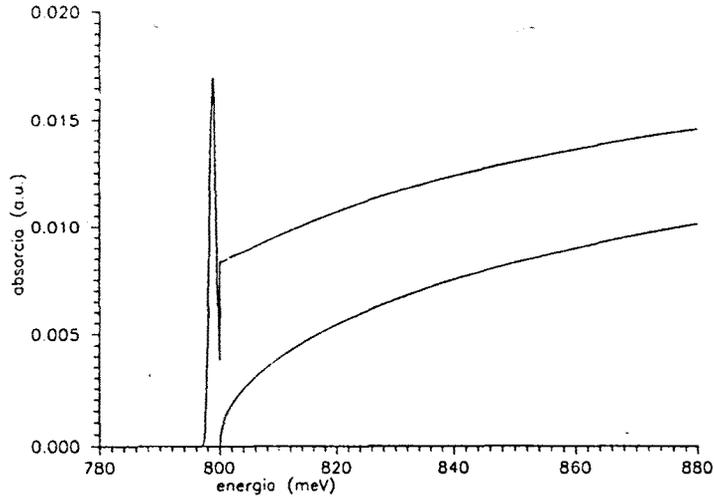


Figura 9. Espectros de absorción simulados, teniendo en cuenta (a) sólo absorción fundamental, (b) contribución del excitón.

La ecuación (21) describe la forma del coeficiente de absorción en función de la energía debido a las transiciones entre BV y BC. Sin embargo, para ajustar los espectros obtenidos de las capas epitaxiales, hemos de tener en cuenta que, debido a las deformaciones, se rompe la degeneración de la BV en $k=0$ entre huecos ligeros y pesados, por lo que hay dos subbandas que contribuyen a la absorción de la muestra, una a una distancia energética E_g de la BC y otra a $E_g + \Delta E$, siendo ΔE la distancia energética entre las dos subbandas. Para incluir este efecto en el ajuste calculamos por separado los dos tipos de transiciones, cada una con una contribución dada por (21) y con intensidades A_{HH} y A_{LH} para los huecos pesados y ligeros respectivamente. Además, convolucionamos cada una de estas dos

absorciones con unas gaussianas caracterizadas por las desviaciones estandar por σ_{HH} y σ_{LH} , cuya misión es incluir las dispersiones energéticas originadas por inhomogeneidades microscópicas, tales como variaciones estadísticas de composición, modulaciones de composición, variaciones de las deformaciones, etc.

Los parámetros de ajuste que necesitamos para describir los espectros de absorción son los siguientes :

- 1- La intensidad relativa entre las dos subbandas de valencia A_{HH}/A_{LH} .
- 2- La energía del gap E_g .
- 3- El desdoblamiento energético entre las dos subbandas de valencia $\Delta E = E_{HH} - E_{LH}$.
- 4- La energía de ligadura del excitón R.
- 5- Las dispersiones energéticas σ_{HH} y σ_{LH} .

Con la selección apropiada de estos parámetros conseguimos ajustes muy buenos de los espectros experimentales, y la suficiente información para poder hacer una caracterización de las muestras. Veamos un ejemplo típico de ajuste de un espectro, y como utilizamos los parámetros obtenidos para realizar la caracterización.

En la figura (10) representamos el espectro de absorción correspondiente a la muestra AL157 (véase tabla II), junto con el ajuste realizado mediante la expresión(21).

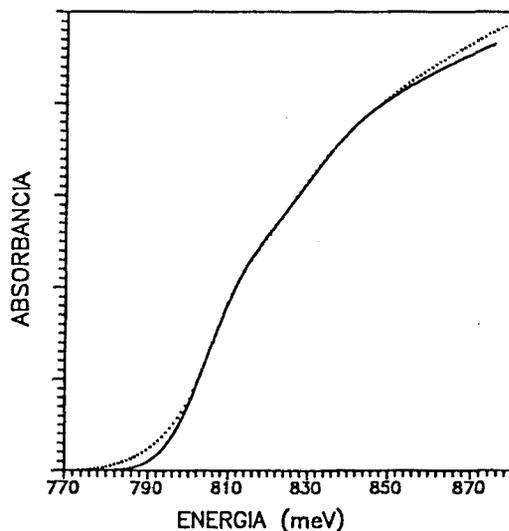


Figura 10.

Los parámetros utilizados en el ajuste son los siguientes :

$$\begin{aligned}A_{HH}/A_{LH} &= 0.35 \\ E_g &= 805.0 \text{ meV} \\ \Delta E &= \Delta E_{HH} - \Delta E_{LH} = 27.0 \text{ meV} \\ R &= 0.8 \text{ meV} \\ \sigma_{LH} &= 8.0 \text{ meV y } \sigma_{HH}/\sigma_{LH} = 1.0\end{aligned}$$

En primer lugar diremos que en general la relación de intensidades nos ayuda a averiguar la naturaleza de las deformaciones que existen en la capa, puesto que cálculos teóricos [35] dan como resultado del elemento de matriz óptica una intensidad superior en el caso de las transiciones desde BV_{LH} a BC, que en el caso de las transiciones desde BV_{HH} a BC. Este resultado ha sido confirmado experimentalmente por otros autores [36] los cuales, al igual que ocurre en la mayoría de nuestras muestras, obtienen una relación de intensidades A_{HH}/A_{LH} del orden de 1/3. De esta forma, únicamente con el espectro de absorción podemos saber la posición relativa de cada subbanda, y de aquí averiguar si está comprimida o tensada. Veámoslo con un caso concreto, por ejemplo una capa de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crecida sobre un substrato de GaAs, en esta situación ya sabemos que para toda $x > 0$ la capa está comprimida (salvo que la capa esté totalmente relajada $\eta = 0$), por lo tanto el frente correspondiente a los huecos ligeros tiene que estar energéticamente por debajo del de los huecos pesados, y si las apreciaciones sobre la relación de intensidades son correctas el primer frente ha de ser más intenso que el segundo, cosa que ocurre en este espectro.

Vamos a calcular la composición (fracción molar x de In) de la capa. En principio, el tecnólogo nos indica que el valor de x es de 0.548, sin embargo este dato tiene una fiabilidad relativa, puesto que la deduce a partir de los flujos de los elementos con que trabaja en el reactor, y éstas no siempre son las composiciones finales de las muestras. De todas formas utilizaremos este dato como hipótesis de partida para realizar los cálculos.

Si restamos las dos primeras ecuaciones del sistema (14), que nos relacionan los desplazamientos entre las dos subbandas de valencia con la deformación de la capa,

obtenemos :

$$\Delta E = \Delta E_{HH} - \Delta E_{LH} = (\Delta_{HH} - \Delta_{LH})\epsilon^I \quad (27)$$

para una x del orden de 0.55 tenemos que $\Delta_{HH}=10.66$ y $\Delta_{LH}=3.68$. Sustituyendo en (27) junto con el valor de $\Delta E=27.0\text{meV}$, obtenemos :

$$\epsilon^{\parallel} = 3.8682 \cdot 10^{-3}$$

A partir de este valor podemos calcular la energía del gap que tendría este material en ausencia de deformaciones:

$$E_g' = E_g - \Delta E_{LH} = E_g - \Delta_{LH}\epsilon^{\parallel} = (805.0 - 14.2) \text{ meV} = 790.8 \text{ meV}$$

Puesto que la medida del espectro se realizó a una temperatura de unos 10K, se puede ajustar a la primera ecuación (16), que expresaba la evolución del gap con la composición x en el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ a bajas temperaturas. O, puesto que conocemos dicha energía, podemos calcular el valor de x mediante:

$$E_g' = 790.8 \text{ meV} = 1.519 - 1.608x + 0.50x^2 \rightarrow x = 0.545$$

El siguiente paso consiste en calcular cuál es la deformación remanente que hay en la capa, puesto que si conocemos x podemos saber cuál es el parámetro de malla del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en la aproximación del cristal virtual, y por lo tanto la deformación máxima que puede tener la capa al crecerla sobre el sustrato de GaAs. De la ecuación (11) obtenemos :

$$\epsilon_{\text{máx}} = 0.07164x = 3.9069 \cdot 10^{-2}$$

entonces la deformación remanente será igual a : $\eta = \epsilon^{\parallel} / \epsilon_{\text{máx}} = 0.1$. Es decir, que la capa epitaxial se ha relajado hasta quedar sólo un 10% de la deformación que obtendríamos si el crecimiento hubiese sido coherente.

Como podemos ver este método de caracterización funciona correctamente. En este caso la composición dada por el tecnólogo y la obtenida por nosotros coinciden gruesamente bien, lo cual no ocurrirá siempre, pero en cualquier caso, siempre será más fiable el resultado obtenido mediante el ajuste que el dado por el tecnólogo. Sorprendentemente, como veremos, la energía del excitón varía de una muestra a otra, en este caso es de 0.8meV pero ya veremos que en otras muestras toma valores próximos a 1.5meV. En cualquier caso, nunca llega a valer los 2.0meV que predice el modelo hidrogenoide para esta energía, y que ha sido corroborado mediante medidas de fotoluminiscencia y absorción óptica realizadas por Goetz et al. [37] para una x del orden de 0.5. Aunque otros autores, como en nuestro caso, también ajustan los espectros de absorción con valores de la energía del excitón menor que la predicha por el modelo anterior. La explicación puede provenir de que el modelo que hemos utilizado para realizar los ajustes supone una estructura de bandas parabólicas, y en realidad no es así (como veremos en el capítulo siguiente), sobre todo para la BV la cual tiene una estructura verdaderamente compleja.

A partir de ahora aplicaremos de una forma sistemática el proceso de ajuste a todas las muestras de capas epitaxiales observadas por AO. No obstante, se han realizado medidas suplementarias con otras técnicas, como fotoluminiscencia, microscopía electrónica, etc., tanto para confirmar los resultados obtenidos por AO, como para intentar averiguar más características de las muestras. Sin embargo, como veremos, la AO ha resultado ser una de las técnicas más fiables y potentes, puesto que no sólo nos permite realizar medidas cuantitativas sobre la estructura de las muestras, sino que también nos permite averiguar el origen microscópico de estas cantidades, que en muchas ocasiones podemos medir con otras técnicas, pero sin posibilidad de averiguar el origen.

A continuación vamos a ver como podemos utilizar la fotoluminiscencia (PL) para caracterizar las muestras. Posteriormente haremos un estudio sistemático de las muestras para ver las propiedades de las capas epitaxiales de aleaciones ternarias crecidas sobre sustratos de InP y GaAs.

II.9-CARACTERIZACION MEDIANTE FOTOLUMINISCENCIA

La fotoluminiscencia (PL) aparece en principio como una técnica sencilla de caracterización, que incluso puede tener algunas ventajas sobre la AO. Una de las principales ventajas es que es una técnica muy sensible, de forma que se pueden realizar medidas de capas muy delgadas, que en AO podrían dar problemas de falta de señal. Por otra parte la excitación y la recogida de señal se realiza por la misma cara de la muestra, por lo que no hay problemas de pérdida de señal por absorción en el substrato, este si puede ser un problema en la AO puesto que medimos la luz transmitida a través de toda la muestra, capa y substrato, y si el gap de este último es menor que el de la capa la absorción debida al substrato enmascarará la de la capa, esto es lo que ocurre en el caso del $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ sobre InP . Otra ventaja de la PL sobre la AO es que generalmente la primera no necesita de un tratamiento previo de la muestra para su observación, mientras que la segunda puede requerir, en algunas ocasiones, un pulido de la muestra.

De hecho se han realizado multitud de trabajos basados en medidas de PL para caracterizar capas epitaxiales tales como el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ [39], en el que se determina la energía del gap para $x=0.53$ (matched), en otros trabajos se estudia la variación de esta energía con la deformación [40], o la dependencia con la temperatura [41,42], o en $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{P}/\text{GaAs}$ [43], $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}/\text{GaAs}$ [44], $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ [41], etc. lo cual demuestra la popularidad de esta técnica. Sin embargo, hay que tener ciertas precauciones al analizar los resultados, en primer lugar, al igual que en AO, los picos medidos tienen un cierto ancho debido a las dispersiones energéticas originadas por las inhomogeneidades microscópicas [45], lo cual no nos permite deducir las energías de las transiciones directamente de los espectros, sino que tendremos que realizar un ajuste a un modelo teórico. Otro efecto que hay que tener en cuenta es el corrimiento de Stokes [46], que hace que haya un corrimiento del pico de emisión hacia energías menores.

En general la forma del espectro de emisión para las transiciones banda-banda viene dada por [46] :

$$I(\hbar\omega) = \sqrt{\hbar\omega - E_g} e^{-\frac{E_g - \hbar\omega}{kT}} \quad (28)$$

Antes de intentar ajustar los espectros mediante cualquier expresión analítica, hay que hacerles una corrección debida a la autoabsorción de la propia muestra. Esta corrección se debe a que la luminiscencia generada en el interior de la muestra, sufre un proceso de absorción debido a ella misma en el camino de salida, figura 11.

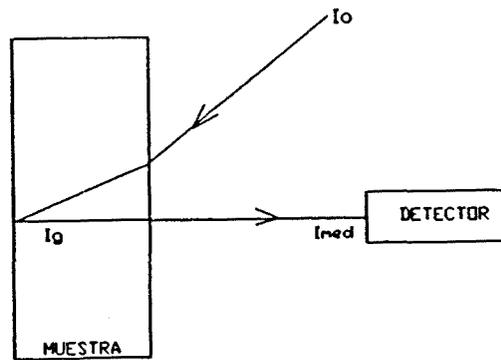


Figura 11.

Así, si con una intensidad de excitación I_0 se genera una intensidad I_g por PL en la muestra, la intensidad que mediremos con el detector será :

$$I_{med} = \int_0^d I_g e^{-\alpha x} dx = \frac{I_g}{\alpha} (1 - e^{-\alpha d}) \quad (28)$$

Por lo que el verdadero espectro de emisión de la muestra vendrá dado por :

$$I_{emi}(\hbar\omega) = \frac{\alpha(\hbar\omega)I_{med}(\hbar\omega)}{(1 - e^{-\alpha(\hbar\omega)d})} \quad (30)$$

donde d es el espesor de la muestra y $\alpha(\hbar\omega)$ el coeficiente de absorción. Es decir que si queremos tener un espectro de PL verdaderamente fidedigno necesitamos conocer también el espectro de AO. En la figura 12 tenemos un ejemplo de corrección de la autoabsorción de un espectro de PL, en él podemos ver que este efecto no es despreciable, puesto que modifica considerablemente la forma del espectro. En este ejemplo, donde se ven los picos correspondientes a las transiciones a las dos subbandas de valencia, si realizamos un ajuste sin considerar la autoabsorción obtendríamos una energía del desdoblamiento errónea, y por lo tanto el error se nos propagaría en el cálculo de la deformación, composición, etc.

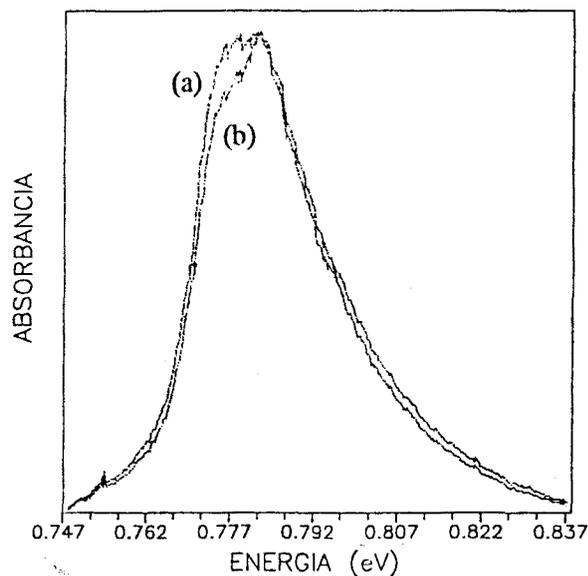


Figura 12. Espectros PL (a) medido; (b) corregido por autoabsorción

Una vez realizada esta corrección podemos atacar el problema del ajuste mediante la expresión (28), teniendo en cuenta además las dos subbandas y las dispersiones energéticas de éstas, que al igual que en la AO las incluiremos en el ajuste convolucionando la ecuación (28) con una gaussiana para cada subbanda. En definitiva, los parámetros que utilizaremos en el ajuste son :

- 1- La intensidad relativa de emisión de las dos subbandas A_{HH}/A_{LH} , puesto que, como

- ya dijimos, el elemento de matriz de transición óptica es distinto para cada subbanda.
- 2- La energía del gap E_g .
 - 3- El desdoblamiento energético entre las dos subbandas $\Delta E = E_{HH} - E_{LH}$.
 - 4- La dispersión energética de las dos subbandas σ_{HH} , σ_{LH} .

En la figura 13 presentamos ejemplos de ajustes de este tipo.

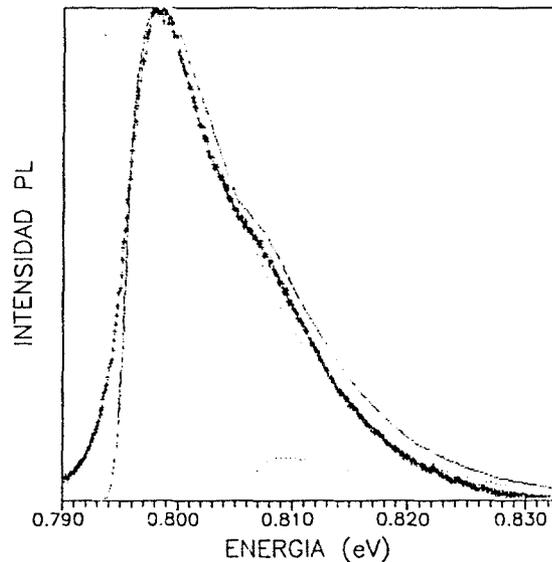


Figura 13.

Como podemos ver estos ajustes no son lo suficientemente buenos como para utilizarlos en la caracterización de las capas epitaxiales, ya que prácticamente nunca se ajusta la bajada del pico; además el pico teórico es siempre más ancho que el experimental, incluso asignándole una dispersión igual a cero, y esto es prácticamente imposible que ocurra. La causa principal de este comportamiento es que no se han considerado los efectos del excitón, y aunque experimentalmente en la PL parece que no tengan importancia, sobre todo al aumentar la temperatura, esto no es así. Por lo tanto, para trabajar correctamente tendríamos que sustituir la ecuación (28) por otra en la que se incluyeran los efectos excitónicos y el corrimiento de Stokes. Sin embargo, puesto que esto complica mucho los cálculos y en principio la información que obtenemos de la PL es la misma que la de AO, hemos optado por relacionar directamente los espectros de PL y AO para ver si existe un buen acuerdo entre las dos y confirmar así las conclusiones obtenidas por AO.

II.10-RELACION ENTRE PL Y AO

Para poder relacionar la intensidad de la luminiscencia con el coeficiente de absorción utilizaremos la relación general entre la probabilidad de transición por emisión por emisión o absorción de un fotón [46] :

$$R_{sp}(\hbar\omega) = cte \alpha(\hbar\omega) \left[e^{\frac{\hbar\omega - \Delta F}{KT}} - 1 \right] \quad (31)$$

donde $R_{sp}(\hbar\omega)$ es el número de fotones emitidos por segundo. Para pasar a intensidad luminosa hemos de multiplicar esta cantidad por $\hbar\omega$, con lo que obtenemos :

$$I(\hbar\omega) = R_{sp} \hbar\omega = cte \frac{(\hbar\omega)^3 \alpha(\hbar\omega)}{e^{\frac{\hbar\omega - \Delta F}{KT}} - 1} \quad (32)$$

De hecho, esta relación sólo es aplicable si los portadores no están degenerados. En este caso se cumple que $\hbar\omega - \Delta F \gg KT$ y la ecuación (32) se reduce a [48] :

$$I(\hbar\omega) = cte (\hbar\omega)^3 \alpha(\hbar\omega) e^{-\frac{\hbar\omega}{KT}} \quad (33)$$

Como se ve en esta expresión, podemos obtener el espectro de PL a partir del de AO multiplicándolo por una exponencial que depende de la temperatura y por el factor $(\Omega\omega)^3$, aunque el término que determinará la forma del espectro es la exponencial. Esta exponencial determina la bajada del pico de luminiscencia, así como el corrimiento de Stokes. En la figura 14 [47], se representa un ejemplo comparando un espectro de AO y el correspondiente de PL, en ella podemos ver claramente los dos efectos anteriores.

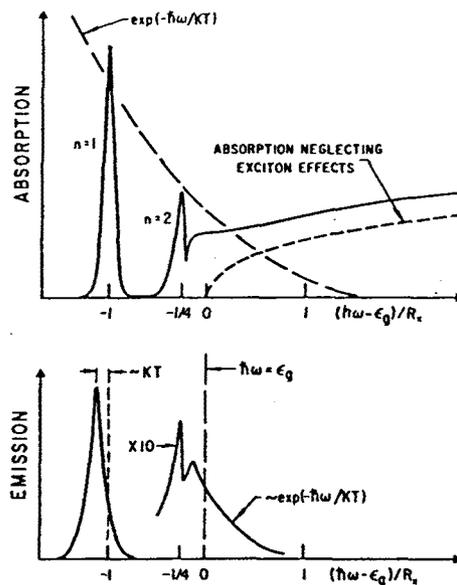


Figura 14. Comparación esquemática de espectros de absorción y emisión de excitones libres en los que se pueden discernir el primer y segundo estado excitónico. Debido a la continuidad de estados discretos no resueltos y estados continuos, la energía del gap no está bien definida ni en el espectro de emisión ni en el de absorción.

Además se puede ver como en los dos casos es muy difícil discernir el valor de la energía del gap directamente de los espectros, a menos que no los ajustamos mediante expresiones analíticas.

En principio esta relación entre la AO y la PL será válida siempre y cuando se cumplan ciertas condiciones; la primera ya la hemos mencionado y es la no degeneración de los portadores; la segunda es que éstos estén termalizados antes de recombinarse; y la tercera es que es aplicable a parejas electrón-hueco libres o entre las que haya interacción coulumbiana, siempre y cuando ésta no modifique la densidad de estados o de ocupación, es decir, que sólo modifique el elemento de matriz de transición óptica.

Si falla alguna de estas condiciones se verá modificada la relación entre absorción y emisión. Afortunadamente los efectos de cada de las condiciones son independientes de las otras y afectan de manera distinta en la forma de los espectros. Así, si los portadores no están termalizados (en la PL) el efecto originado nos obliga a introducir una temperatura T , diferente a la medida, para obtener un buen acuerdo entre $\alpha(\hbar\omega)$ e $I(\hbar\omega)$. A este fenómeno

se le llama efecto de portadores calientes y en nuestro caso, en que tenemos dos subbandas de valencia, puede hacer que la intensidad relativa entre las transiciones de las dos subbandas sea distinta en la AO que en la PL.

Por otro lado si el problema es la degeneración de los portadores, el efecto que notaremos es que el espectro de emisión dependerá de las condiciones de excitación. Para excitaciones fuertes los estados correspondientes a energías bajas estarán saturados, y por lo tanto la intensidad emitida para estas energías será menor que la que esperaríamos en condiciones normales.

En cualquier caso si no se cumplen estas condiciones lo podremos detectar, bien sea durante las experiencias de PL, o bien al convertirlas a AO y compararlas con los espectros de AO medidos.

Veamos un ejemplo práctico de este proceso, en la figura 15 presentamos el espectro de PL medido y corregido por la autoabsorción (fig.15a), de una muestra de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$, y su comparación (fig.15b), tras la conversión, con el espectro de AO de la misma muestra, medido en las mismas condiciones de temperatura.

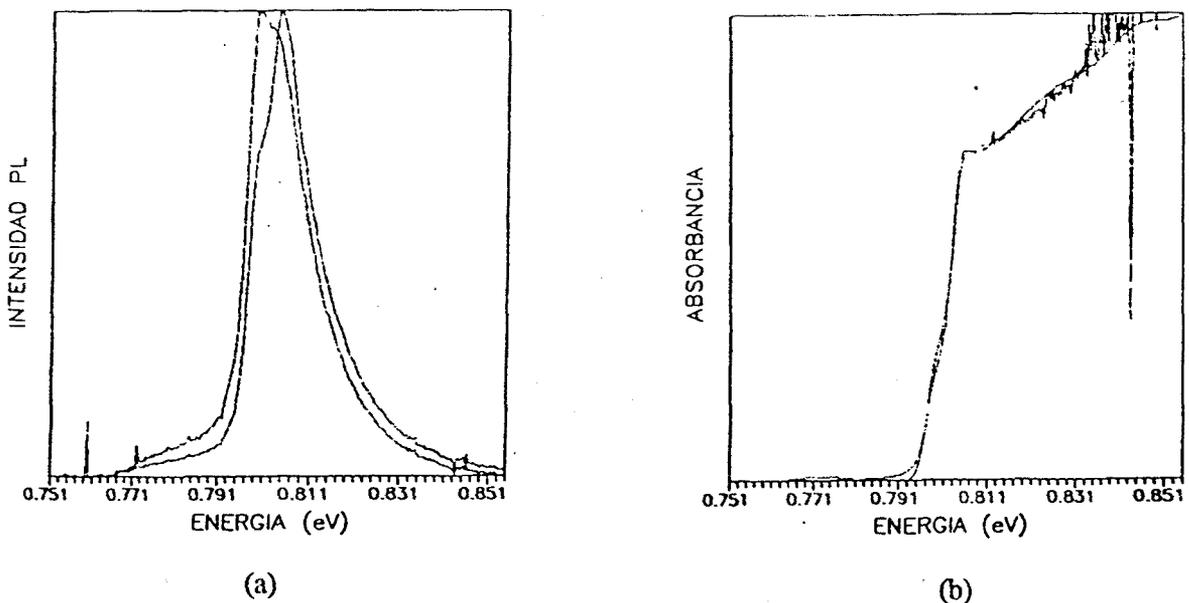


Figura 15.

Como podemos ver, la correspondencia es francamente buena, incluso recuperamos la contribución del pico del excitón. El mayor problema de esta técnica reside en que al pasar de intensidad de PL a AO dividimos por la exponencial de $(\hbar\omega/KT)$, y este término disminuye muy rápidamente, cosa que hace que se amplifique el ruido cuando aumenta $\hbar\omega$. Este efecto será más importante cuanto menor sea la temperatura a la que se realizan las medidas. Afortunadamente, este problema suele ser importante para energías superiores a las de los frentes de absorción, que en realidad es la zona del espectro que nos proveerá de la mayor parte de la información. Por lo general se obtienen medidas de AO un poco más finas o de un nivel similar a las de PL tratadas y convertidas a absorción, pero en algunos casos ha resultado que las medidas de PL han remarcado más los efectos de la estructura de bandas de la capa epitaxial, este es el caso de la muestra AL958 de la cual comparamos los espectros obtenidos mediante las dos técnicas en la figura 16, en la que podemos ver como los flancos de subida de las dos subbandas están más marcados.

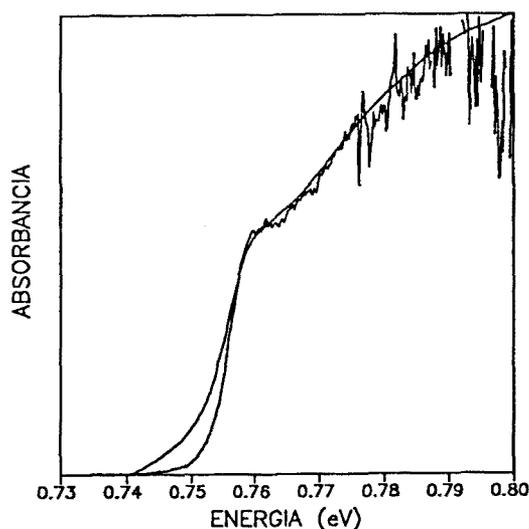


Figura 16. Espectros de absorción obtenidos por PL y AO. Se observan unos flancos de subida de las dos subbandas más marcados para el espectro PL.

Formalmente podemos utilizar cualquiera de las dos técnicas para obtener los parámetros necesarios en la caracterización de las capas epitaxiales, tal como hicimos en el ejemplo de AO. El hecho de que el acuerdo entre las dos técnicas sea tan bueno nos induce a pensar que estamos trabajando bien en los dos casos, es decir que la medida de la temperatura de las

muestras en los criostatos son correctas, y que las funciones de transferencia del sistema utilizadas para corregir los espectros de PL son correctas, etc. Incluso nos permite pensar que si obtenemos diferencias entre los espectros obtenidos mediante las dos técnicas, son debidas a fenómenos físicos relevantes, y no a deficiencias del método de análisis. Este es el caso de los espectros obtenidos para la muestra AL670, figura 17, en que para la PL parece ser que la contribución de los huecos pesados es el doble de lo esperado, quizás porque los portadores no están termalizados.

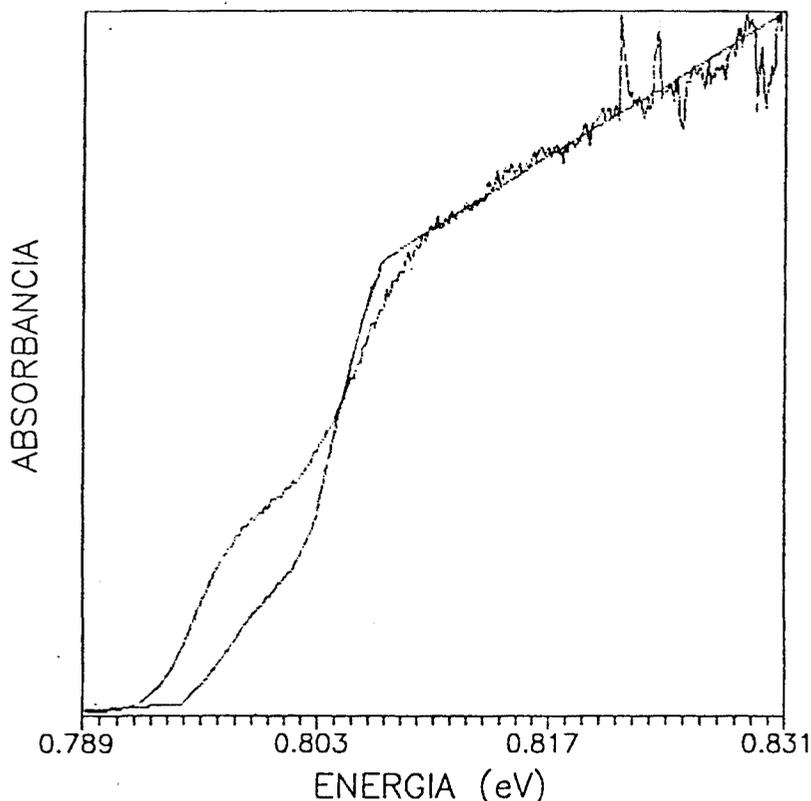


Figura 17. Espectros de absorción obtenidos por PL y AO correspondientes a la muestra AL670. La diferencia en la contribución de los huecos pesados se debe probablemente a un fenómeno de no-termalización de los portadores.

Este modo de análisis ha sido utilizado por otros autores, llegando a resultados similares, tal es el caso de Henry et al [49]. En adelante, siempre haremos referencia a las medidas de AO, teniendo en mente que para la mayoría de muestras hemos realizado los dos tipos de medidas, haciendo mención de las medidas de PL solamente cuando aporten información adicional sobre las características de la muestra.

II.11-DISPERSIONES ENERGETICAS DEL VALOR DEL GAP^[50]

Como ya dijimos, al realizar los ajustes de AO obtenemos parámetros como la relación A_{HH}/A_{LH} , la energía del gap, y el desdoblamiento de las subbandas de valencia; parámetros que hemos utilizado para averiguar características de las capas epitaxiales. Además, obteníamos las dispersiones energéticas σ_{HH} y σ_{LH} de las dos subbandas, veamos que información nos aportan estos dos parámetros.

La inclusión de estas dispersiones en el análisis la realizamos convolucionando las expresiones teóricas de $\alpha_{HH}(\hbar\omega)$ y $\alpha_{LH}(\hbar\omega)$ con dos distribuciones gaussianas, caracterizadas por las desviaciones estándar σ_{HH} y σ_{LH} . Dicha inclusión la realizamos para tener en cuenta las inhomogeneidades microscópicas, con la intención de poder averiguar el origen físico de dichas inhomogeneidades. Supongamos en primer lugar que las dispersiones energéticas son debidas exclusivamente a fluctuaciones de la composición, que caracterizaremos por σ_x . En este caso la relación entre dispersión energética y dispersión composicional, en el $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, viene dada por las ecuaciones (20), que volvemos a escribir en forma de dispersiones :

$$\begin{aligned}\sigma_{HH} &= [-1.608 + x + \eta \Delta_{HH} 0.068] \sigma_x \\ \sigma_{LH} &= [-1.608 + x + \eta \Delta_{LH} 0.068] \sigma_x \\ \sigma_E &= [-1.608 + x] \sigma_x \text{ si no hay deformaciones}\end{aligned}\tag{34}$$

Si las capas son perfectamente homogéneas las fluctuaciones de composición son sólo estadísticas y el excitón verá un valor medio de la composición, las fluctuaciones del cual vienen dadas por [51] :

$$\sigma_x = \left[\frac{x(1-x)}{KV_{exc}} \right]^{1/2}\tag{35}$$

donde :

$$V_{exc} \approx \frac{4}{3} \pi \left[\frac{\epsilon_r}{m_r/m_0} a_B \right]^3 \quad (36)$$

es el volumen del excitón, a_B el radio de Bohr, m_r la masa reducida, y $K \equiv 4/a^3$, siendo a el parámetro de malla.

Si aplicamos esta expresión al caso en que x es del orden de 0.5 y que no haya deformaciones, obtenemos un valor de $\sigma_E = 0.66 \text{ meV}$, donde hemos utilizado los siguientes parámetros:

$$m_r = 0.038 m_0$$

$$K = 2.05 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3} \text{ (n}^\circ \text{ de cationes por unidad de volumen)}$$

$$a_B = 0.53 \text{ \AA}$$

$$\epsilon_r = 13.7$$

Este valor puede disminuir si en la capa hay deformaciones. En cualquier caso el cociente σ_{HH}/σ_{LH} siempre da valores inferiores a la unidad sean cuales sean las deformaciones, salvo en el caso en que $\eta = 0$ que da exactamente igual a uno, y sea cual sea el valor de σ_x y su origen físico, debido a fluctuaciones estadísticas, modulación de composición, etc.

Supongamos ahora que la composición es homogénea, pero que por alguna razón desconocida las deformaciones cambian de un punto a otro de la muestra. Es decir, supondremos una dispersión de deformaciones que estará caracterizado por σ_c , en este caso habrán asociadas unas dispersiones energéticas σ_{HH} y σ_{LH} , las cuales están relacionadas con σ_c a través de las ecuaciones (14), resultando :

$$\sigma_{HH} = \Delta_{HH} \sigma_z \quad (37)$$

$$\sigma_{LH} = \Delta_{LH} \sigma_z$$

Si ahora lo aplicamos al caso del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ para todo el rango de deformaciones que puede tomar (ver valores de Δ_{HH} y Δ_{LH} en la figura 5), obtenemos que la relación de dispersiones energéticas es prácticamente constante e igual a : $\sigma_{HH}/\sigma_{LH} \approx 2.8$.

Veamos pues, que la relación entre las dispersiones energéticas de las dos subbandas de valencia σ_{HH}/σ_{LH} nos puede dar información de cuál es el origen de las inhomogeneidades microscópicas; si dicho cociente es menor o igual a uno, se debe a la dispersión de composición; mientras que si toma valores del orden de 2.8, el fenómeno predominante es un campo de deformaciones. Para ilustrar estos dos comportamientos, presentamos en la figura 18 los espectros y ajustes de dos muestras cuyas relaciones de dispersión energética son menor de uno (muestras J1 y AL670), figura 18a, y otras dos muestras en que las que dicha relación es del orden de 2.8 (muestras AL957 y AL958), figura 18b.

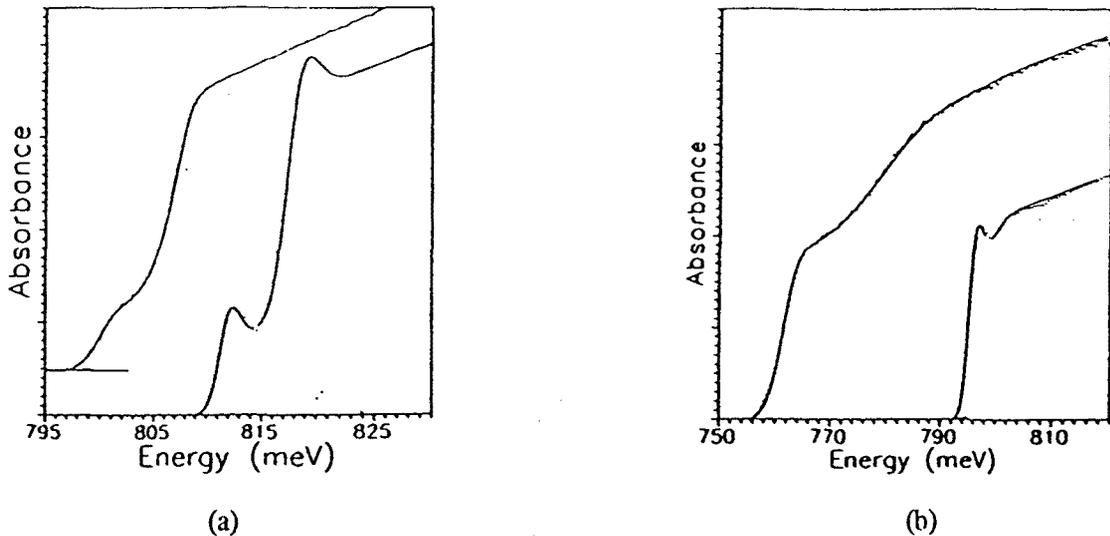


Figura 18.

En la tabla III hemos resumido los resultados obtenidos para estas muestras. En ellas podemos ver, además de los resultados comentados sobre la relación de dispersiones energéticas, que la relación de intensidades de las dos subbandas A_{HH}/A_{LH} es del orden que habíamos mencionado. Además, observando la posición relativa de los dos frentes vemos que las dos primeras muestras son tensadas, mientras que las dos segundas son comprimidas.

Muestra	t (μm)	E_g (meV)	ΔE (meV)	$A_{\text{HH}} / A_{\text{LH}}$	σ_{LH} (meV)
JLM001	2.9	807.2	-6.3	0.35	0.9
AL670	1.6	802.0	-6.6	0.37	1.7
AL958	0.5	733.9	44.1	0.40	2.3
AL957	0.5	797.7	4.5	0.35	1.2

Muestra	$\sigma_{\text{HH}} / \sigma_{\text{LH}}$	R (meV)	σ_x	η	σ_c
JLM001	0.67	1.2	$0.9 \cdot 10^{-3}$	0.65	
AL670	0.93	0.9	$1.6 \cdot 10^{-3}$	0.16	
AL958	2.50	0.9			$5.5 \cdot 10^{-4}$
AL957	2.40	1.4			$2.7 \cdot 10^{-4}$

Tabla III Resultados obtenidos en el ajuste de las muestras utilizadas en el estudio del origen de las dispersiones energeticas.

Justificar estos dos tipos de comportamientos es un hecho claramente desigual. Por una parte la presencia de una modulación de composición ha sido demostrada teóricamente, incluso cuando las condiciones de crecimiento son perfectamente homogéneas [52]. En cambio, justificar la presencia de un campo de deformaciones es mucho más difícil. En un principio pensamos en la posibilidad de la creación de dominios de deformación, que podrían estar más o menos relajados debido a la aparición de dislocaciones. Sin embargo las observaciones mediante microscopía electrónica TEM no muestran la existencia de ninguna red de dislocaciones en la muestra AL958.

Con otras técnicas como la difracción de rayos X (DCRXD) podemos medir la dispersión de deformaciones que hay en el material, pero no hay modo de saber si esta dispersión es debida a un campo de deformaciones (de origen desconocido), o a fluctuaciones de la composición,

puesto que no debemos olvidar que las variaciones de composición inducen variaciones en la deformación al crecerse las capas sobre un sustrato de parámetro de malla constante. Lo verdaderamente interesante en la medida de las dispersiones mediante los ajustes de espectros de AO, es que nos permiten conocer el origen de las inhomogeneidades microscópicas que dan lugar a dichas dispersiones energéticas, aunque nosotros no conozcamos el proceso que da lugar a los campos de deformaciones.

II.12-EVOLUCION DEL GAP CON LA TEMPERATURA EN EL InGaAs.

Puesto que tenemos un buen método para determinar la energía del gap, y disponemos de una amplia gama de muestras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (ver tabla II) crecidas con diferentes características de composición, de espesor, etc.; realizamos un estudio de la evolución de E_g con T, y determinamos unos valores para α y β que ajusten dicha evolución a la expresión dada por la ley de Vegard:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (38)$$

Otros autores han realizado ajustes similares para el caso del $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (matched con el InP, es decir, no deformado) obteniendo diversos valores de estas dos constantes. Por ejemplo, Gaskill et al. [53] obtienen $\alpha=4.0 \cdot 10^4 \text{eV/K}$ y $\beta=226\text{K}$; mientras que P.W. Yu et al. [54] obtienen $\alpha=4.9 \cdot 10^4 \text{eV/K}$ y $\beta=301\text{K}$. La falta de coincidencia entre los resultados hasta ahora obtenidos, así como nuestro desacuerdo con los métodos de análisis por ellos utilizados, nos han inducido a realizar nuestros propios ajustes.

En principio, las medidas realizadas han sido sobre capas de distinta composición y distintas deformaciones. Las muestras utilizadas son, ordenadas según su grado de deformación: MBE1879, AL1104, AL1105 y AL159; las características principales de todas ellas aparecen en la tabla II. En la tabla IV presentamos los datos que hemos obtenido de su caracterización.

Muestra	x	ϵ^{\parallel}	η	E_g (4 K)	$\sigma_{HH} / \sigma_{LH}$
MBE1879	0.473	$-4.269 \cdot 10^{-3}$	1.00	823.8 meV	1.1
AL1104	0.535	0	0	800.8 meV	1.0
AL1105	0.543	$5.874 \cdot 10^{-4}$	0.90	795.7 meV	2.7
AL159	0.752	$2.075 \cdot 10^{-3}$	0.04	623.8 meV	1.2

Tabla IV Parámetros obtenidos en los ajustes de las muestras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

De la tabla anterior se deduce que, la primera es una muestra tensada; la segunda no tiene deformaciones, por tanto, es matched con el sustrato (InP); y las dos últimas son muestras comprimidas. La cuarta columna nos muestra el grado de deformación remanente en las capas epitaxiales, que, junto con la composición de dichas capas y el tipo de sustrato sobre el que se crecen, nos indican que el grado de relajación también depende del desacuerdo de parámetros de malla (además del espesor). Las tres primeras muestras son de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ y las diferencias entre sus composiciones y la del matched no son muy grandes, la segunda de hecho ya lo es. Sin embargo, la última es de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ con una $x=0.752$, por lo que f es muy grande en este caso (del orden del 5.4%), el resultado es que en la capa enseguida se producen dislocaciones que provocan el relajamiento de las deformaciones. En esta capa el valor de η es de 0.04, es decir que casi esta relajada, no obstante, y también debido a la gran diferencia de parámetros de malla que hay entre capa y sustrato, la deformación sigue siendo grande. Si nos fijamos ahora en la última columna, también podemos ver que hay muestras en las que predominan las dispersiones de composición (relación de dispersiones energéticas entorno a 1), y una en la que existe un campo de deformaciones (muestra AL1105, en la que la relación de dispersiones energéticas es igual a 2.7). En la figura 19 hemos representado los espectros y ajustes de las cuatro muestras a 10K.

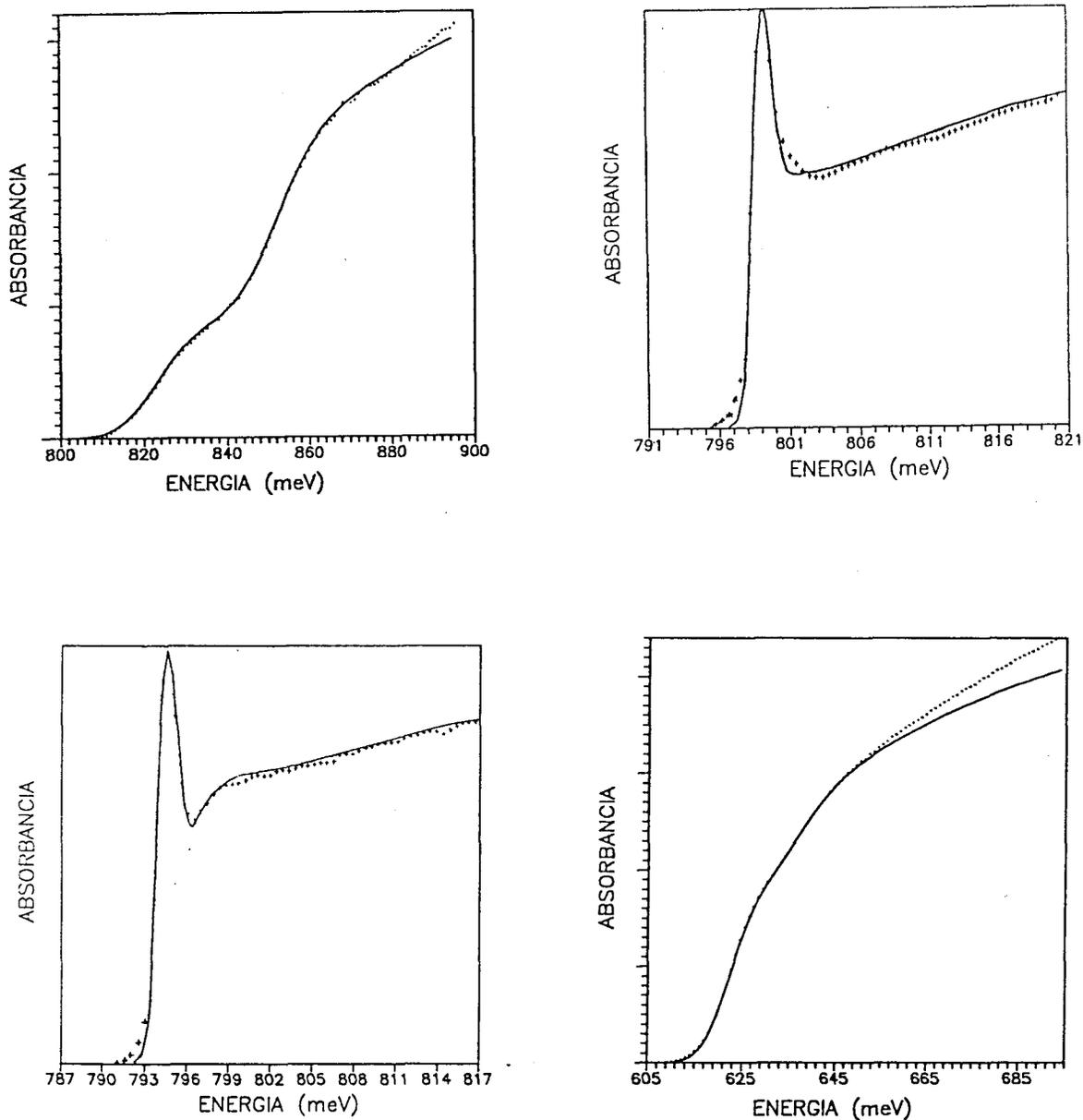


Figura 19. Espectros de absorción (trazo continuo) y ajustes (línea punteada) de las muestras MBE1879, Al1104, AL1105, y AL159.

En la figura 20 se muestra la evolución de la energía del gap con la temperatura para las cuatro muestras, y en la tabla V se presentan los valores numéricos representados en dicha figura.

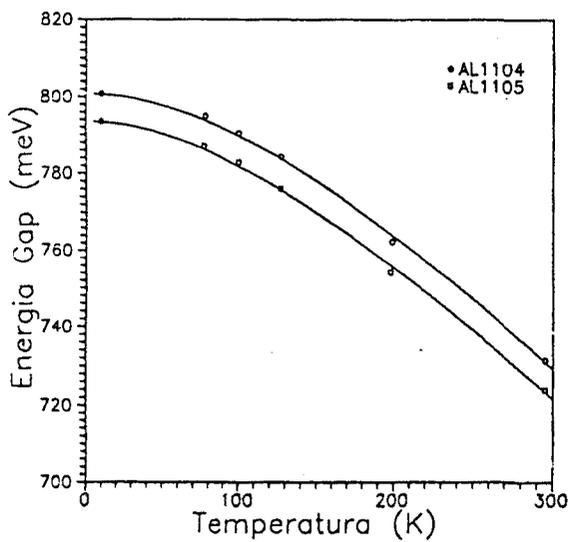
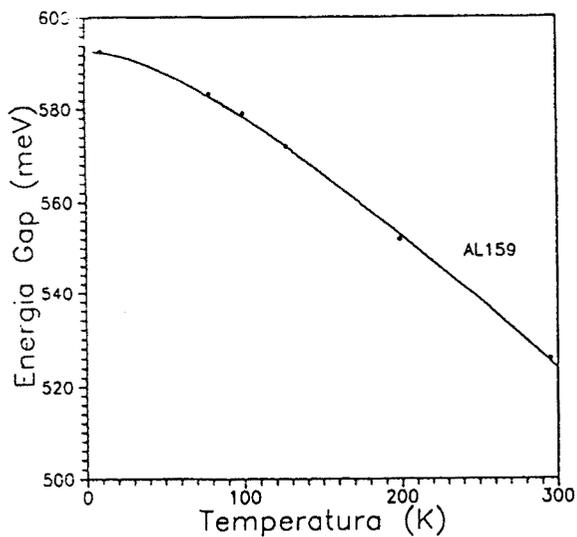
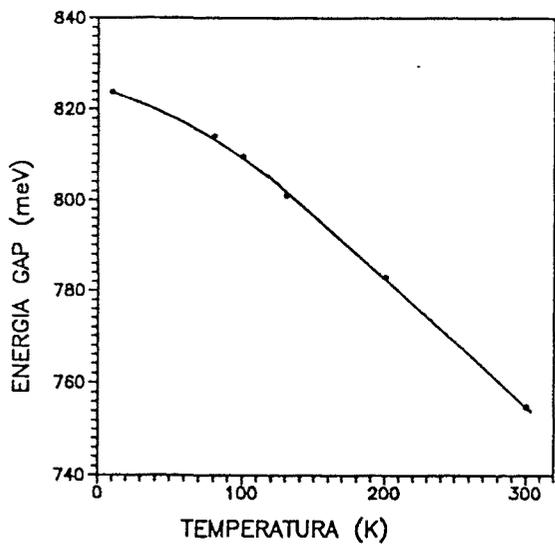


Figura 20. Evolución de la energía del gap con la temperatura para las cuatro muestras anteriores.

Muestra	T (K)	E_g (meV)	Muestra	T (K)	E_g (meV)
MBE1879	10	823.8	AL1104	10	800.8
	80	814.0		80	794.9
	100	809.5		100	790.4
	130	801.0		130	784.2
	200	783.0		200	762.4
	300	755.0		300	731.5
AL1105	10	795.7	AL159	10	623.8
	80	789.2		80	614.5
	100	785.0		100	610.0
	130	778.2		130	603.0
	200	756.5		200	583.0
	300	726.0		300	557.0

Tabla V Evolución del gap con la temperatura, para cuatro muestras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con distinto valor de x .

Estos datos los hemos ajustado, mediante mínimos cuadrados, a la ecuación (38) para obtener los valores de α y β que presentamos en la tabla VI.

Muestra	α	β
MBE1879	$3.28 \cdot 10^{-4}$	118
AL1104	$5.59 \cdot 10^{-4}$	403
AL1105	$5.06 \cdot 10^{-4}$	332
AL159	$3.25 \cdot 10^{-4}$	125

Tabla VI Valores obtenidos en el ajuste de la dependencia $E_g(T)$

Observando estos datos junto con los de la tabla IV parece haber una correlación entre los parámetros, α y β , y el valor absoluto de la deformación, disminuyendo el valor de dichos parámetros al aumentar $|\epsilon^{\parallel}|$, pero esta tendencia no podemos asegurarla con sólo estas medidas. Lo que sí podemos hacer es comparar los resultados obtenidos para el $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, con los existentes en la literatura que hemos mencionado anteriormente. Vemos que tanto α como β discrepan de los obtenidos por los dos autores, en la figura 21 hemos representado los puntos experimentales obtenidos para la muestra AL1104, junto con las curvas de evolución de $E_g(T)$ descritas por la ecuación (38) para las tres parejas de valores de α y β que tenemos.

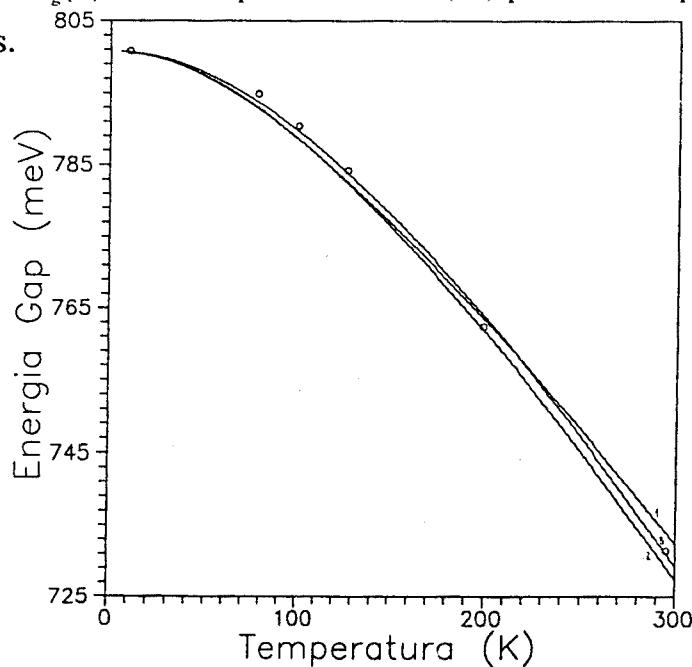


Figura 21. Curvas de evolución de la energía del gap en función de la temperatura (ecuación 38) para las dos parejas de valores α, β reportados en la literatura, (1) y (2), y la obtenida en este trabajo, correspondientes a $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.

En esta figura podemos ver que la curva que mejor se ajusta es la que nosotros hemos obtenido, cosa gruesante lógica, puesto que los parámetros los hemos obtenido a partir de estos puntos, y lo único que nos está indicando esta gráfica es que el ajuste lo hemos realizado correctamente. Lo realmente importante es saber de donde provienen las diferencias entre estos ajustes, lo que nos permitirá elegir los parámetros más fiables.

Las medias realizadas por Gaskill et al. [52] están realizadas mediante fotoreflectancia (PR), las cuales dan una medida directa del valor de la energía del gap, el problema al realizar el ajuste está en el rango de temperaturas en el que ha realizado medidas. Estas se han realizado entre 77K y 300K, es decir que no se tiene en cuenta la zona correspondiente a las temperaturas más bajas y, como podemos ver en las figuras 20 y 21, esta zona tiene un peso específico muy importante. En el caso del ajuste realizado por P.W. Yu et al. [53] el problema no reside en el rango de temperaturas, sino en las propias medidas. Los valores de la energía del gap son deducidos directamente de los picos de PL restando $1/2$ de KT a la posición energética del máximo de intensidad. Los valores que obtienen son menores que los nuestros y esto es debido a que el procedimiento anterior no es válido para temperaturas bajas, a menos que la dispersión energética sea muy grande, puesto que los efectos del excitón hacen variar la pendiente de subida del pico de PL, haciendo que se infravalore la energía del gap si se utiliza el procedimiento anterior.

Así pues, como los valores de la energía del gap que nosotros obtenemos son el producto de un ajuste de los espectros de AO a la expresión analítica del coeficiente de AO, y el rango de temperaturas en el que hemos trabajado va desde 10K hasta 300K, pensamos que los valores que hemos obtenido para α y β , son los más apropiados para describir la evolución de la energía del gap con la temperatura en el $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$.

II.13-CUANTIFICACION DE LA DISPERSION DE COMPOSICION Gruesa

Como ya mencionamos en la introducción del presente capítulo, cuando crecemos una capa epitaxial de un aleación de un semiconductor ternario sobre un sustrato, además de las variaciones de composición intencionadas, que introducimos nosotros, aparecen inhomogeneidades de composición en el plano de crecimiento, aunque las condiciones de crecimiento sean constantes con el tiempo [55,58]. Las observaciones mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) en el conjunto de muestras (AL444, AL447, AL446, AL445 y AL442) muestran la presencia de dichas inhomogeneidades, que en este caso están caracterizadas por dos tipos de modulación de contraste: una estructura gruesa cuasiperiódica, de periodo Λ del orden de varios centenares de nanómetros; y una modulación fina cuya periodicidad es del orden de 150Å [58].

En este apartado nos ocuparemos de la modulación gruesa que, como veremos, será atribuible a una modulación de composición. Para entender el origen de dicha modulación de composición tenemos que tener en cuenta dos factores: el primero es el gap de miscibilidad de las aleaciones ternarias; y el segundo es la energía elástica inducida en la capa al crecer la aleación sobre un sustrato. Así, composiciones que pueden ser inestables bajo consideraciones puramente termodinámicas, son estables al considerar esta energía elástica. Además, Glas [59] demuestra analíticamente que una capa epitaxial con modulación de composición en las direcciones paralelas al sustrato, tiene menor energía que la misma aleación en su forma volúmica. Esta modulación de composición tendrá un efecto sobre el parámetro de malla de la capa, resultando éste también modulado [59] :

$$a_2 = a_1 \cos(\alpha x) \cos(\alpha y) \quad (39)$$

siendo a_2 el parámetro de malla de la capa y a_1 el del sustrato.

Así, la modulación depende del desacuerdo de parámetros de malla, f , y del espesor, t , de la capa, figura 22.

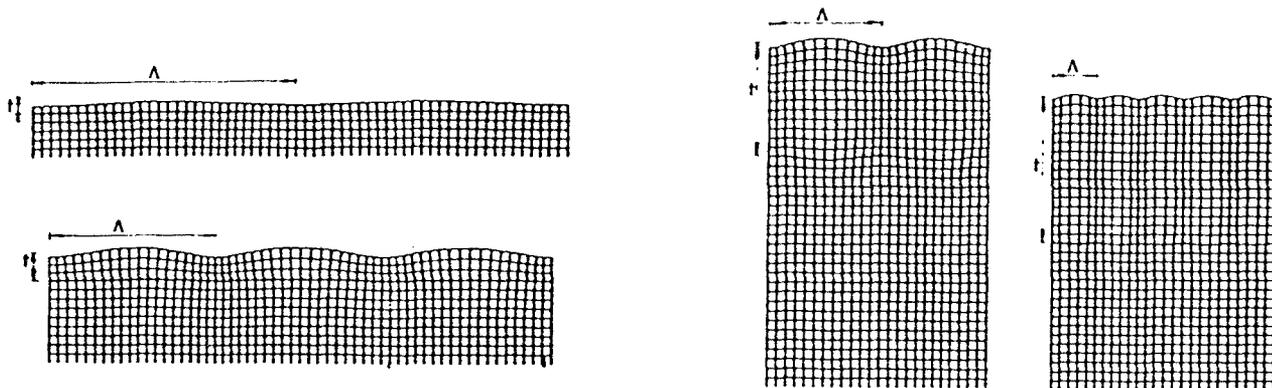


Figura 22. Deformación de los planos, respectivamente, ortogonal y paralelo a la interfaz substrato/capa, en la capa y en el substrato, para varios valores del espesor t .

Y el periodo de la modulación viene dado por :

$$\Lambda = \frac{2\pi}{\alpha} \quad (40)$$

En las medidas de TEM realizadas sobre estas muestras hemos podido comprobar esta variación de Λ con el espesor, en la tabla VII tenemos estos resultados.

Muestra	Espesor (μm)	Λ (nm)	$2\pi t / \Lambda$
AL444	1.96	235	49.3
AL447	0.98	240	26.7
AL446	0.74	320	14.5
AL442	0.49	365	8.6
AL445	0.29	405	4.4

Tabla VII Evolución de la modulación de composición con el espesor de las capas. Obtenida por microscopía TEM.

Además de la variación de Λ con el espesor de la capa, sabemos que la energía elástica de ésta aumenta con este parámetro hasta llegar al espesor límite, momento en el que aparecen nuevos sistemas de relajación de dicha energía tales como las dislocaciones, stacking faults, etc. Este comportamiento lo podemos ver en las fotografías realizadas mediante TEM de la sección transversal de las muestras, en la figura 23 tenemos un ejemplo.

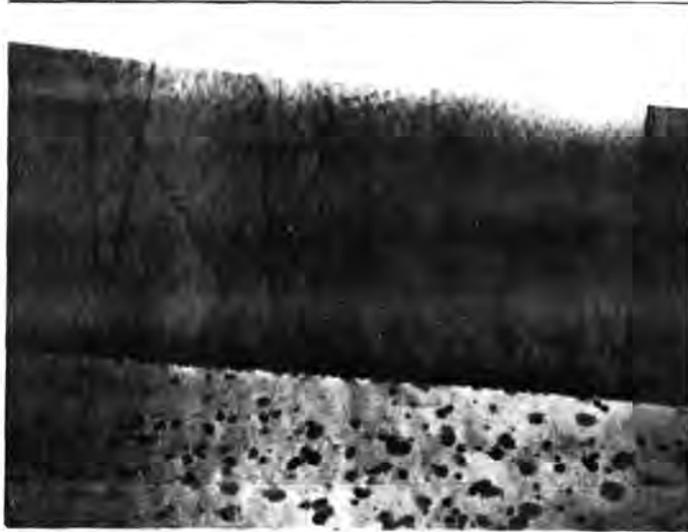


Figura 23.

En todas las muestras cuyo espesor es superior a $0.5\mu\text{m}$, se observa que la primera media micra después del sustrato presenta una modulación de contraste, atribuible a una modulación de composición, y a partir de aquí la capa presenta dislocaciones y desaparece la modulación de contraste anterior.

Veamos como influirán todas estos fenómenos en el aspecto de los espectros de absorción óptica. En primer lugar hemos de decir que, debido a la gran dispersión energética que presentan estas muestras, es muy difícil deducir la separación energética entre las dos subbandas y por lo tanto, el cálculo de la deformación ϵ^{\parallel} . Por lo que hemos obtenido estos parámetros a partir de difracción de rayos X (DCXRD), de igual forma que para la deformación remanente η . En la tabla VIII presentamos los resultados de dichas medidas.

Muestra	Ancho (μm)	ϵ	η	$E_{\text{HH}} - E_{\text{LH}}$ (meV)
AL444	1.96	$8.30 \cdot 10^{-5}$	0.10	0.6
AL447	0.98	$8.30 \cdot 10^{-5}$	0.10	0.6
AL446	0.74	$5.09 \cdot 10^{-4}$	0.60	3.5
AL442	0.49	$8.00 \cdot 10^{-4}$	0.98	5.6
AL445	0.29	$8.00 \cdot 10^{-4}$	1.00	5.7

Tabla VIII Variación de la deformación con el espesor de las capas epitaxiales con modulación de composición. Mediante difracción de rayos X.

A partir de aquí, nos quedan como parámetros libres, para realizar los ajustes de los espectros representados en la figura 24, la energía del gap E_{LH} (puesto que son muestras comprimidas), las dispersiones energéticas σ_{LH} y σ_{HH} , y la absorbancia en $E_{\text{LH}}+20\text{meV}$.

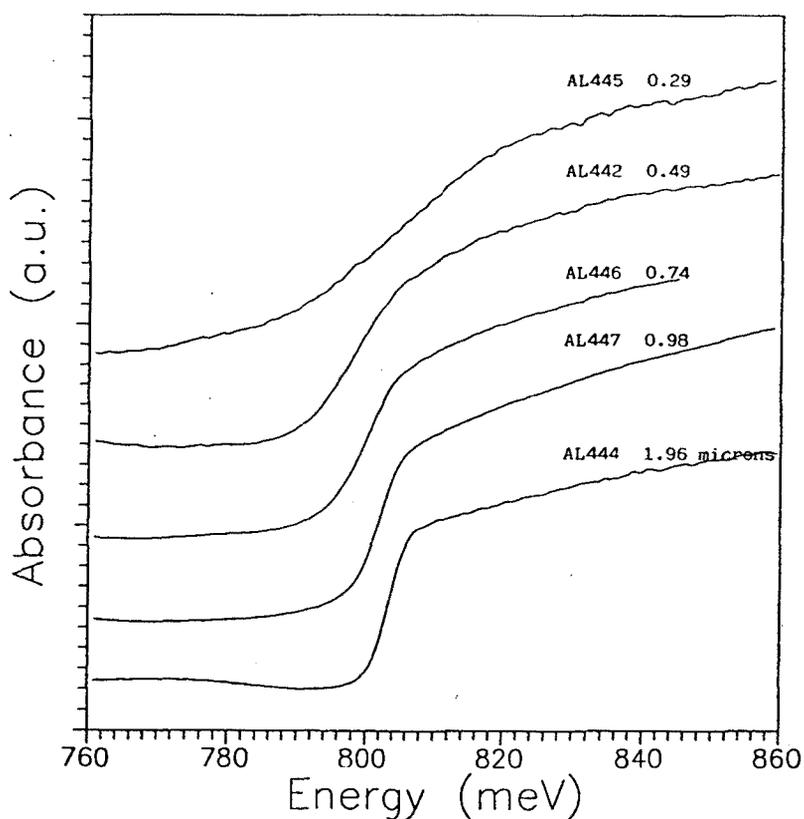


Figura 24. Espectros de absorción óptica correspondientes a muestras comprimidas con espesores variables de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre InP ($x=0.543$).

En la tabla IX tenemos resumidos los resultados obtenidos de dichos ajustes, junto con las dispersiones de composición que de ellos obtenemos mediante la ecuación (20).

Muestra	Absorbancia	E_{LH} (meV)	σ_{LH} (meV)	$\sigma_{HH} / \sigma_{LH}$	σ_x
AL444	1.10	804.8	2.4	0.96	$2.4 \cdot 10^{-3}$
AL447	0.74	803.2	3.0	0.96	$3.0 \cdot 10^{-3}$
AL446	0.56	800.1	4.2	0.72	$5.3 \cdot 10^{-3}$
AL442	0.49	797.5	5.4	0.44	$9.3 \cdot 10^{-3}$
AL445	0.29	798.0	20.0	0.42	$34.3 \cdot 10^{-3}$

Tabla IX Parámetros obtenidos en los ajustes de AO de las muestras con modulación de composición.

Puesto que todas estas muestras tienen la misma composición, en un principio todas tendrán el mismo desacuerdo de parámetro de malla y por lo tanto las diferencias que se encuentran en las deformaciones son debidas a fenómenos de relajación. Efectivamente, tal como predice la teoría, observando la tabla VIII vemos que existe una clara correlación entre el espesor de la capa y el grado de deformación remanente η , o lo que es lo mismo en este caso la deformación ϵ^{\parallel} . Así, en las dos muestras más delgadas parece que no se ha alcanzado el espesor crítica, y por lo tanto permanecen totalmente deformadas, mientras que al aumentar el espesor aparecen dislocaciones que hacen aumentar la relajación. Esto parece estar relacionado con el comportamiento de la dispersión energética, o de composición, de las medidas de absorción, puesto que van disminuyendo a medida que la capa es más gruesa y esta más relajada, o tiene un periodo de la modulación de composición menor.

Ahora bien, nuestra idea es medir la contribución de las diferentes capas a la AO. Para ver esto hemos atacado químicamente las tres capas más gruesas mediante una disolución de Br:CH₃OH en una relación 1:200, con el fin de eliminar parte de la capa epitaxial que hay por encima de las 0.5 μ m que presentan modulación de composición. Para luego volver a medir el espectro de AO y poder analizar la contribución de cada parte de la capa. En la tabla X hemos presentado los valores obtenidos tras los ajustes de AO, realizados en los espectros medidos antes y después del ataque químico, así como en la diferencia de estos dos espectros. Estos espectros corresponderán, respectivamente, a la capa total, a la parte que queda una vez atacada y a la parte de la capa que hemos removido durante el ataque. En la figura 25 hemos representado estos tres ajustes, para una de las tres muestras.

Muestra	Etapas	E_g (meV)	σ_E (meV)	$\alpha \Delta t$	Δt (μ m)
AL444	sin atacar	805.2	2.2	1.35	1.96
	atacada	806.2	3.3	0.59	0.86
	diferencia	805.0	1.8	0.82	1.19
AL447	sin atacar	809.2	3.0	0.60	0.98
	atacada	807.0	3.7	0.36	0.60
	diferencia	810.5	2.0	0.27	0.44
AL446	sin atacar	801.8	3.7	0.45	0.74
	atacada	800.8	5.2	0.32	0.53
	diferencia	802.2	2.6	0.16	0.44

Tabla X. Variación de la dispersión energética en las muestras atacadas químicamente

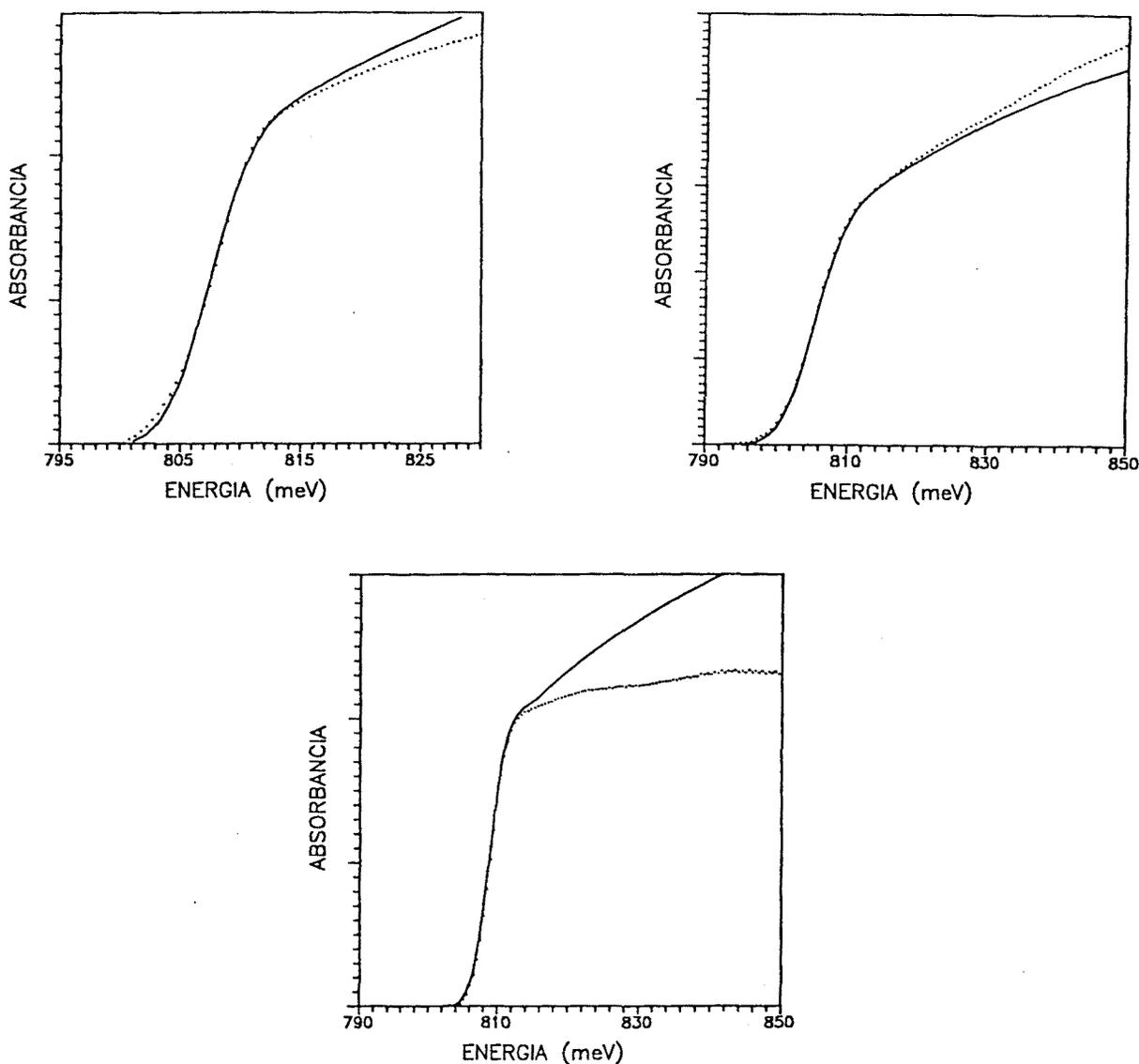


Figura 25. Espectros de absorción y sus ajustes para la muestra AL447 sin atacar, atacada y la correspondiente a la capa eliminada.

El control de la profundidad de los ataques los hemos realizado mediante el control del tiempo que permanece la muestra en la disolución, habiendo calibrado previamente la velocidad de ataque dando como resultado una velocidad de ataque de $2\mu\text{m}$ por minuto. En cuanto al espesor de la capa, t , lo hemos realizado mediante la absorbancia de la capa medida en los espectros de AO, puesto que a partir de las tablas VIII y IX hemos representado la absorbancia en función del espesor, figura 26, y vemos que es lineal.

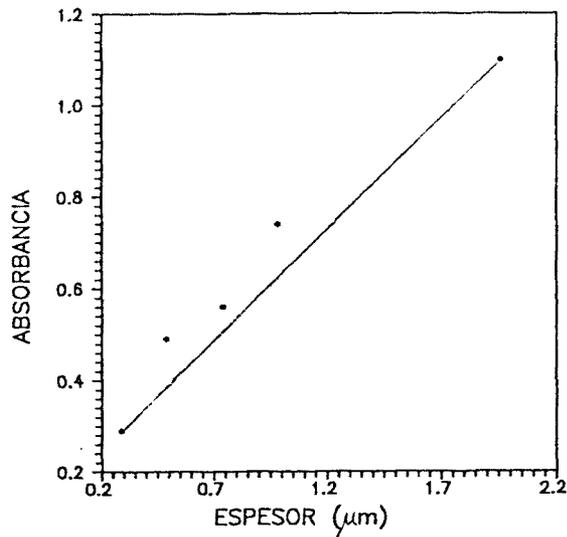


Figura 26. Absorbancia en función del espesor de la muestra con su correspondiente ajuste.

En la tabla X cada muestra tiene 3 filas; la fila correspondiente a la capa sin atacar presenta los valores del ajuste de la capa completa; la segunda fila que corresponde a la capa atacada presenta los valores correspondientes al ajuste de la capa remanente después de realizado el ataque químico; y la fila que hemos nombrado diferencia, resulta de ajustar el espectro obtenido al restar los dos anteriores, por lo que los datos corresponden a la capa superior, que ha sido eliminada de la muestra.

La primera conclusión que podemos extraer de dichos datos es que no se puede realizar el estudio de AO suponiendo que la capa es uniforme. Sólomente las dos capas más delgadas, que no alcanzan el espesor crítico, pueden analizarse directamente. Respecto a las tres capas más gruesas, a partir de los valores obtenidos en los ajustes realizados tras el ataque, podemos comprobar que la capa superior no está modulada y tiene una dispersión energética menor que la parte modulada, el valor de esta dispersión es del orden de $2.0 \pm 0.4 \text{ meV}$, que corresponde a una variación composicional de $\sigma_x = \pm 2 \cdot 10^{-3}$. Así, parece ser que la capa superior tiene un grado de inhomogeneidad prácticamente constante para las tres muestra. El hecho de que en la muestra AL446 la dispersión medida en la capa superior sea ligeramente mayor, de unos 2.6 meV , puede ser debido a que durante el ataque hayamos eliminado parte de la capa inferior en la que dispersión es mucho mayor, ya que si restamos el espesor eliminado del espesor inicial nos queda : $(0.74 - 0.26) \mu\text{m} = 0.49 \mu\text{m}$, que es un valor muy cercano al de la capa modulada.

En cuanto a la parte de la capa que tiene la modulación de composición, vemos que la dispersión energética, y por lo tanto de composición, aumenta al disminuir el espesor, t , de la capa epitaxial. Esto puede ser debido a que el periodo de la modulación aumenta cuando disminuye el espesor. En la figura 27 hemos representado la evolución de la dispersión energética de esta capa con el espesor.

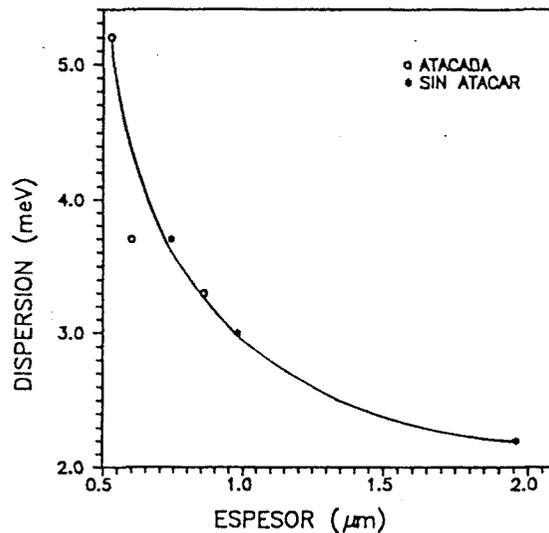


Figura 27.

II.14-CUANTIFICACION DE LA DISPERSION DE COMPOSICION EN $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Otro grupo interesante de muestras, del conjunto que hemos analizado, son las de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, puesto que presentan un rango de variación de composición muy grande, desde $x=0.15$ hasta $x=0.8$. Esto nos permitirá hacer un estudio de la evolución de las características de estas capas con x , y por lo tanto con el desacuerdo de parámetro de malla entre capa y sustrato. El valor de este parámetro toma valores entre 0, para $x=0$, y un 7% para $x=1$.

Se han realizado muchos trabajos sobre este tipo de sistemas, aunque en la mayoría de ellos se trabaja con muestras en las que la fracción molar de In sólo llega a valores entorno a 0.5 [60,62]. En los que se ha trabajado con x superiores, como por ejemplo en el trabajo realizado por Westwood et al. [63], se muestran efectos muy interesantes, tales como el que

muestras con x elevadas (del orden de 1) tengan una calidad cristalina de igual calidad que las de fracciones molares bajas (del orden de 0.1) cuando tienen el mismo espesor. Por otro lado, estos trabajos están realizados, en su mayor parte, mediante medidas de microscopía TEM y difracción de rayos X (DCRXX). Vamos a aplicar aquí la espectroscopía de AO, para ver si podemos corroborar estas características, e intentar obtener más información sobre la estructura de las capas.

En primer lugar diremos que sobre nuestras muestras también hemos realizado medidas de microscopía TEM y de difracción de rayos X. Las muestras analizadas por AO son la AL217, AL138, AL157, AL159. Los espectros ajustados se muestran en la figura 28, y los resultados obtenidos tras el ajuste se presentan en la tabla XI.

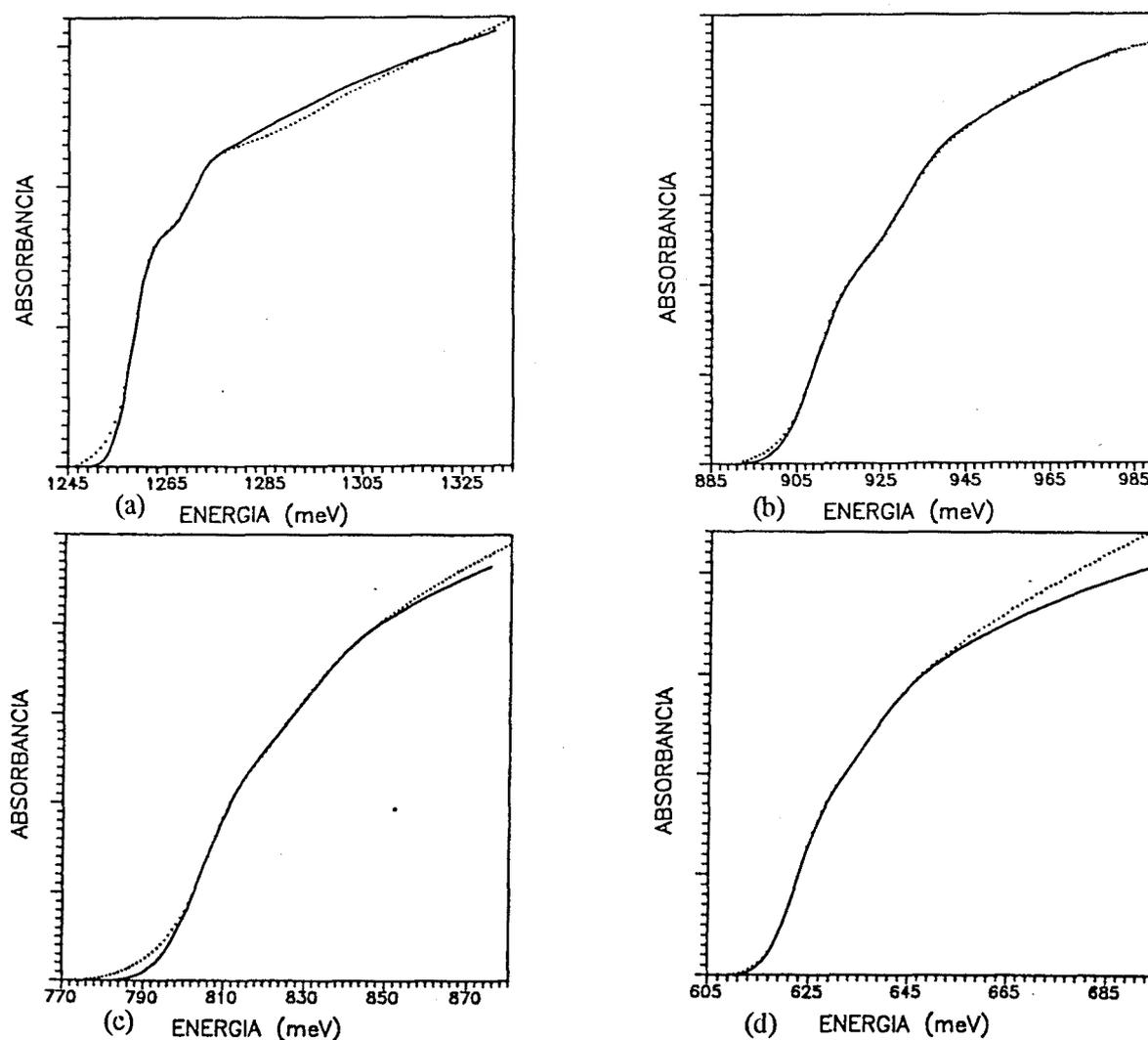


Figura 28. (a) AL217, (b) AL138, (c) AL157, (d) AL159.

Muestra	x	ϵ_{med}	η	σ_E	σ_x	$\sigma_{\text{III}} / \sigma_{\text{LI}}$
AL217	0.176	$1.7744 \cdot 10^{-3}$	0.140	$3.2 \cdot 10^{-3}$	$2.429 \cdot 10^{-3}$	1.0
AL138	0.448	$3.1205 \cdot 10^{-3}$	0.097	$6.2 \cdot 10^{-3}$	$5.703 \cdot 10^{-3}$	1.0
AL157	0.545	$3.8682 \cdot 10^{-3}$	0.099	$8.0 \cdot 10^{-3}$	$8.071 \cdot 10^{-3}$	1.0
AL159	0.736	$2.0747 \cdot 10^{-3}$	0.040	$4.5 \cdot 10^{-3}$	$5.428 \cdot 10^{-3}$	1.4

Tabla XI Parámetros obtenidos en los ajustes de AO de las muestras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$

Observando los valores mostrados en esta tabla podemos ver las características principales de las capas epitaxiales crecidas en estas muestras. En primer lugar, de la última columna comprobamos que las dispersiones energéticas no son debidas a campos de deformaciones, sino exclusivamente a dispersiones de composición. Además, el comportamiento de esta dispersión es curioso puesto que no es una función monótona con la composición, sino que al principio aumenta con ésta para luego bajar a partir de un cierto valor de x. Lo mismo ocurre para la deformación (ϵ^{\parallel}), y sólo la deformación remanente (η) disminuye monótonamente con el aumento de la fracción molar x. Estos resultados son coherentes con los obtenidos en [62], y de hecho las medidas DCRXR y TEM realizadas en estas muestras los confirman.

En la figura 29 hemos representado la anchura a media altura (FWHM) de los picos de DCRXR, correspondientes a las capas epitaxiales, en función de la fracción molar de dichas capas.

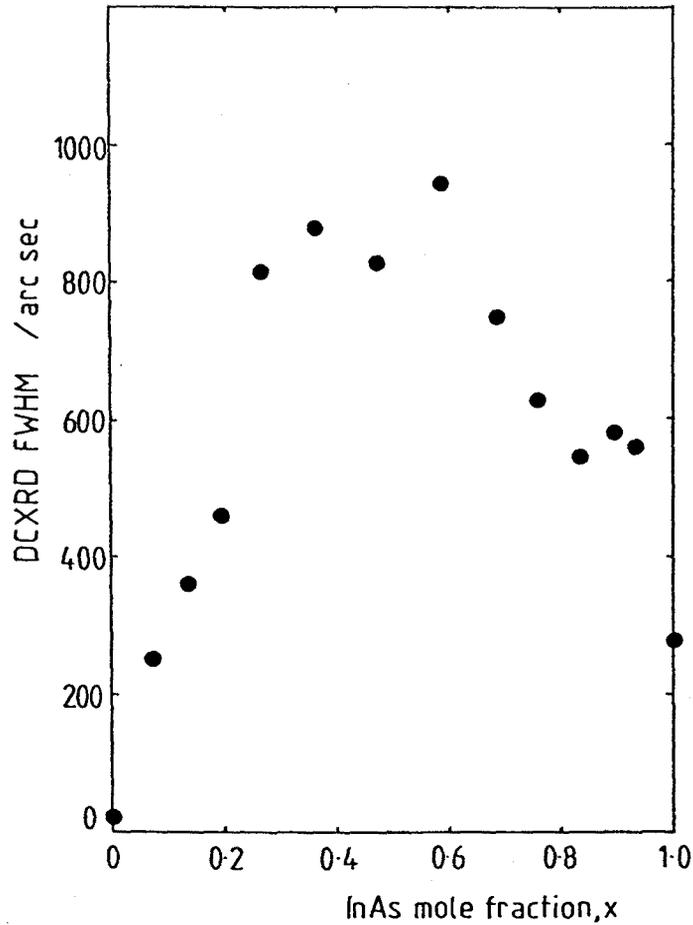


Figura 29.

Estas medidas en realidad nos muestran la dispersión de valores del parámetro de malla perpendicular a la superficie de crecimiento, pero a partir de ellos no es posible conocer el origen de esta dispersión. Contrariamente, mediante los ajustes de los espectros de AO hemos podido averiguar que en estas muestras las dispersiones son debidas a variaciones de composición. Para comparar los dos tipos de medidas, vamos a intentar reproducir la gráfica de la figura 29 a partir de los resultados de AO. Para ello veamos que relación existe entre los parámetros obtenidos mediante las dos técnicas.

La difracción de rayos X nos propociona cantidades que representan variaciones relativas del parámetro de malla, las cuales llamaremos señal DCXRD :

$$DCXRD \equiv \frac{\Delta a^\perp}{a_1} = \cot(\Theta_B) \Delta \Theta \quad (41)$$

mientras que en AO medimos la deformación paralela a la superficie de crecimiento, ϵ^\parallel .

Utilizando las ecuaciones de la teoría de la elasticidad que relacionan la deformación perpendicular, ϵ^\perp , con la paralela, ϵ^\parallel , se llega a la siguiente relación entre las magnitudes medibles:

$$DCRXR = -\frac{2c_{12}}{c_{11}} \epsilon^\parallel \frac{a_2}{a_1} + f = -\frac{2c_{12}}{c_{11}} \frac{a_2}{a_1} \eta \epsilon_{máx} + f \quad (42)$$

siendo c_{11} y c_{12} los coeficientes de rigidez, a_1 y a_2 los parámetros de malla del substrato y la aleación que forma la capa epitaxial, respectivamente, y f el desacuerdo de parámetros de malla.

Diferenciando la ecuación (42) respecto de x obtenemos la relación entre la dispersión de medidas de DCRXR, es decir la FWHM, y la dispersión de composición, que medimos mediante AO:

$$d(DCRXR) = \frac{a_{InAs} - a_{GaAs}}{a_{GaAs}} \left[1 + 2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \eta \right] dx \quad (43)$$

donde hemos tenido en cuenta la variación de a_2 con x , y hemos considerado c_{11} y c_{12} constantes con x , puesto que la variación que induce esta dependencia en el resultado final es muy pequeña.

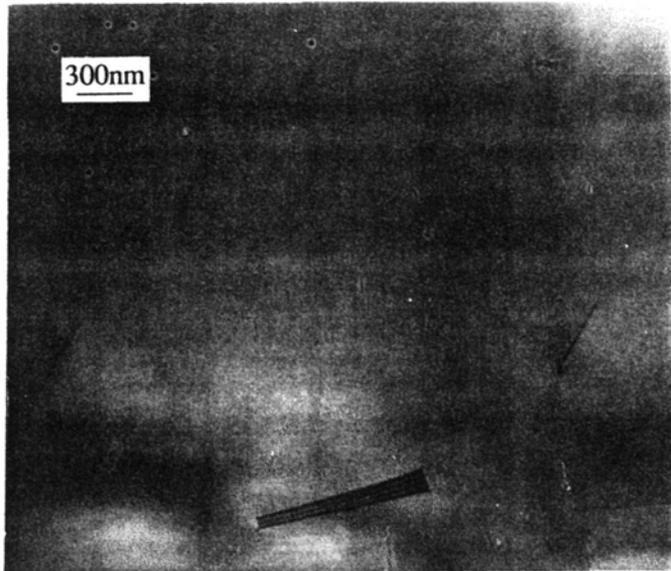
Así pues, hemos calculado las FWHM, a las que hemos nombrado por $\Delta \Theta$, a partir de las dispersiones σ_x medidas por AO, y los resultados son los siguientes :

Muestra	$\Delta\theta$ (arcsec)
AL217	52.7
AL138	119.9
AL157	170.2
AL159	108.6

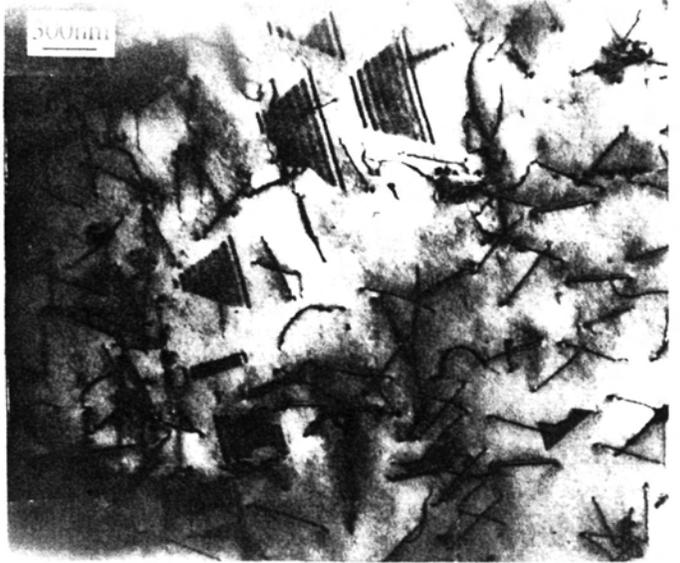
Tabla XII Valores de FWHM del pico de DCXRD del parámetro de red de la capa, simulado a partir de los ajustes de AO.

Estos resultados tienen exactamente el mismo comportamiento que los obtenidos en la figura 43 mediante DCRXR, la única diferencia estriba en que son unas cinco veces menores. Esto puede ser debido a la diferencia de resolución de las dos técnicas, pero el resultado relevante es que la evolución es idéntica en los dos casos. Con estos cálculos hemos conseguido dos cosas; por una parte hemos comprobado los resultados obtenidos por DCRXR para las capas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$; y por otra parte hemos visto la gran potencia de la técnica de ajustes de espectros de AO en el estudio de estas muestras, puesto que no sólo somos capaces de reproducir los resultados obtenidos por otras técnicas, sino que además podemos ir un poco más lejos y ver el origen microscópico de los datos obtenidos.

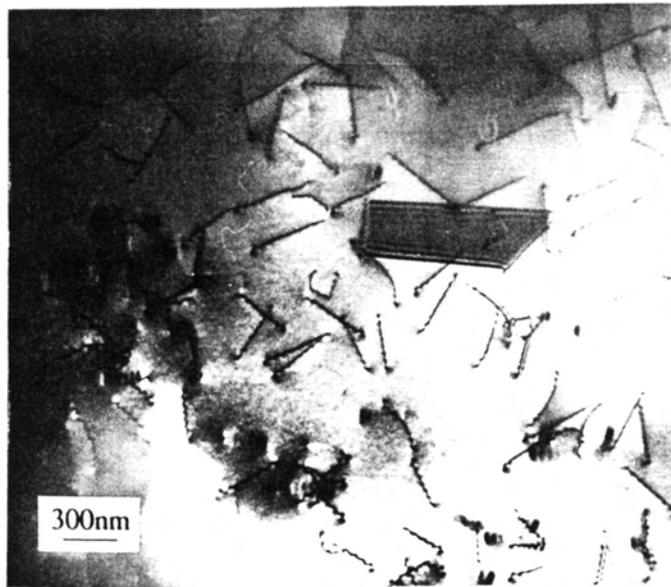
Volviendo a las capas epitaxiales de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sobre GaAs, parece ser que la calidad de éstas empeora al aumentar la fracción molar x , hasta llegar a una composición del orden de 0.5, para luego volver a mejorar. Las fotografías obtenidas mediante microscopía TEM también confirman estos resultados. En la figura 30 se presentan las fotografías de cuatro muestras de esta serie, vistas en el plano de la superficie de crecimiento, para cuatro valores de x . Se puede observar que para $x=0.04$ y $x=1.0$ hay muy pocas dislocaciones en la capa epitaxial, mientras que para $x=0.93$ la densidad de dislocaciones aumenta y para $x=0.45$ es mucho mayor.



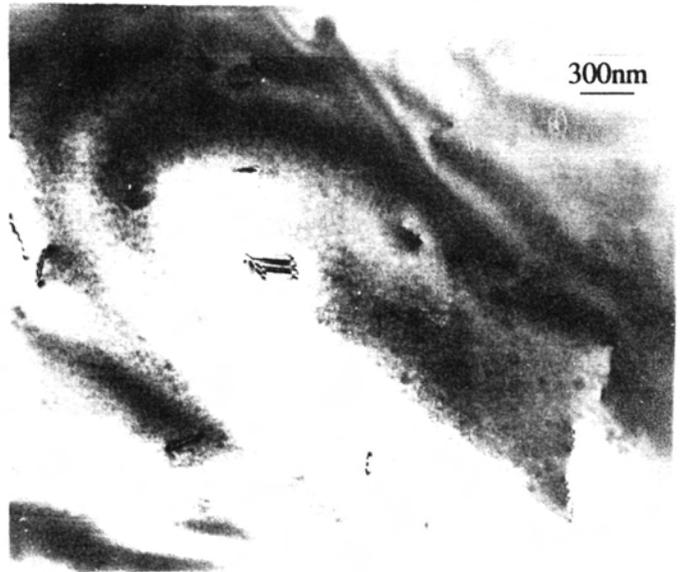
$x=0.04$



$x=0.45$



$x=0.93$



$x=1.00$

Figura 30.

En la figura 31 representamos la densidad de dislocaciones en función de la fracción molar x de IN. Podemos ver que estos resultados están de acuerdo con los obtenidos, mediante DCRXR y AO.

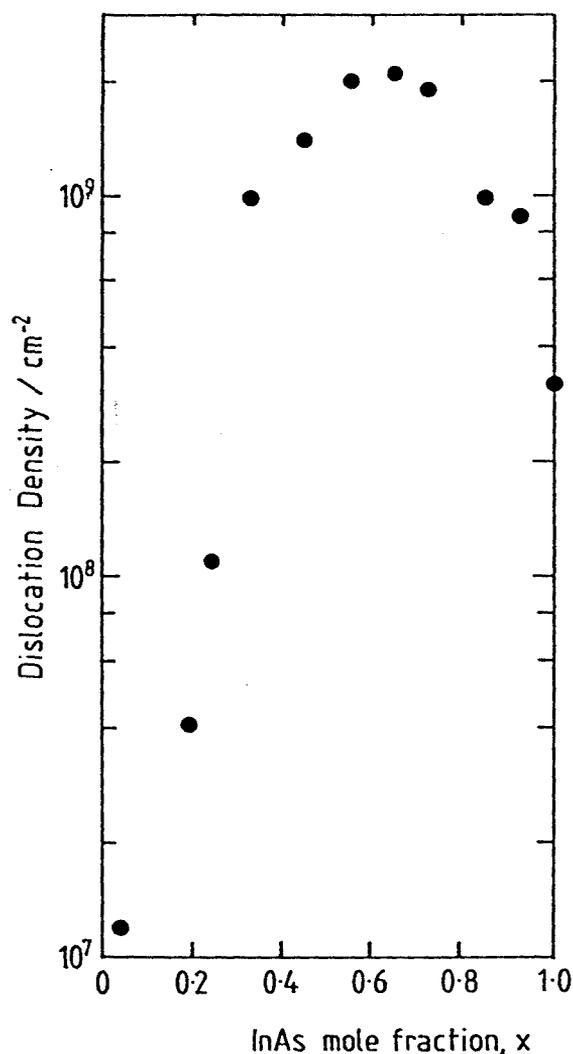


Figura 31.

El problema es entender porqué a partir de cierto valor de x disminuye la densidad de dislocaciones y la dispersión de composición, a pesar de aumentar el desacuerdo de parámetros de malla entre capa y sustrato. El hecho de que en un principio aumente la inhomogeneidad de la capa al aumentar la x parece gruesante lógico, puesto que esto supone un aumento de f y por lo tanto un aumento de la energía elástica almacenada en la capa al crecer. Por lo que para poder relajarla será necesario mayor densidad de dislocaciones.

Además, aproximadamente a partir de $x=0.45$ comienza a producirse un crecimiento tridimensional de la capa, en vez de monocapa a monocapa, lo cual puede dar origen a nuevas dislocaciones.

Una posible explicación para comprender porqué baja la dispersión de composición y la densidad de dislocaciones para x grandes, puede ser el hecho de que para estas composiciones aparecen redes de dislocaciones que permanecen en la interficie entre capa y sustrato, sin penetrar en la capa epitaxial. Este tipo de dislocaciones es el que es capaz de acomodar mayor energía elástica, por lo que representan dos ventajas sobre las que se extienden a través de la capa; por una parte se necesitan menos dislocaciones para relajar la misma energía elástica; y por otra parte al no penetrar en la capa epitaxial no provocan inhomogeneidades en esta. En la figura 32 presentamos una fotografía realizada mediante microscopía TEM de la interficie capa/sustrato de una muestra cuya x es de 0.93, en ella se puede ver la red de dislocaciones de dicha interficie :

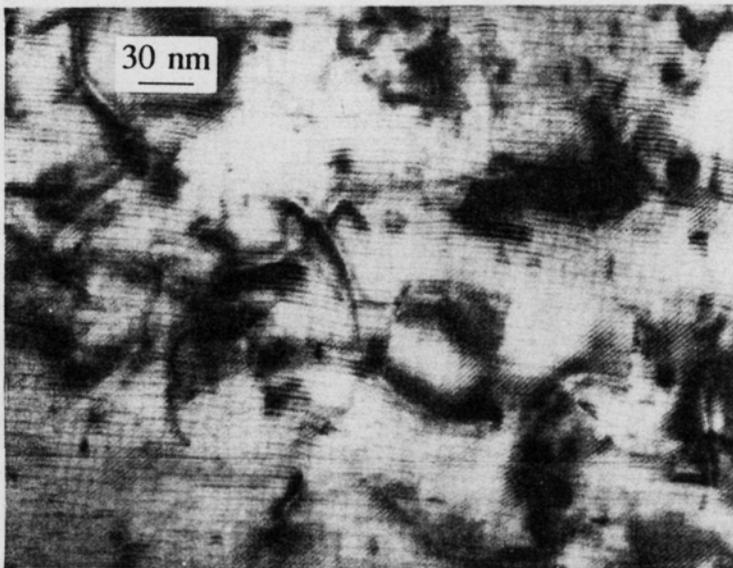


Figura 32.

En cualquier caso, al igual que en otros sistemas tales como el formado por $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ [64], las características de estos sistemas no se pueden explicar sólo a partir del desacuerdo de parámetro de malla y de las condiciones de crecimiento, sino que hay que otros efectos, como podrían ser los relacionados con las propiedades de la relación.

II.15-CUANTIFICACION DE LA MODULACION FINA

Cuando realizamos el análisis de las muestras en las que aparecía modulación de composición en las fotografías de microscopía TEM, además de las variaciones de contraste debidas a la modulación de composición, cuyas periodicidades son del orden de centenas de nanómetros, aparece una modulación fina de contraste cuya periodicidad es del orden de cientos de amstrons, y es totalmente independiente de la primera. Este comportamiento ha sido observado, en aleaciones III-V crecidas por diferentes técnicas, mediante mimicroscopía TEM por muchos autores [55,57][65], así como en muestras de las estudiadas en este trabajo [67]. Y mientras que la modulación gruesa sólo se encuentra en ciertas muestras, en las que hay modulación de composición, la fina es mucho más generalizada y aparece en la mayoría de muestras analizadas.

Las medidas de microscopía electrónica TEM han mostrado una correlación entre la periodicidad, λ , de la modulación fina y tres parámetros, que son ; el espesor de la capa epitaxial, t ; el desacuerdo de parámetros de malla entre capa y substrato, f ; y la temperatura de crecimiento, T_g . Estas medidas se han realizado sobre tres grupos de muestras que son las siguientes :

- 1- AL44X, en las cuales la x y la T_g son constantes y sólo varía el espesor, t .
- 2- AL95X, donde t y T_g son constantes y varía la composición, x .
- 3- AL1XXX, donde x y t son constantes y varía la temperatura de crecimiento, T_g .

Las dependencias encontradas se muestran en la figura 33, en donde podemos ver que la longitud de onda, λ , de la modulación fina disminuye: al aumentar el espesor de la capa; al aumentar la fracción molar x de In, o lo que es lo mismo al aumentar el desacuerdo de parámetros de malla; y al aumentar la temperatura de crecimiento.

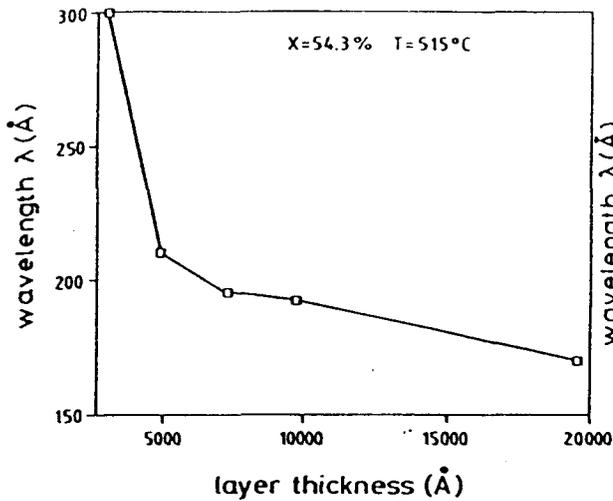


Figura 33(a). Evolución de la longitud de onda de la modulación fina λ en función del espesor t de la capa de InGaAs.

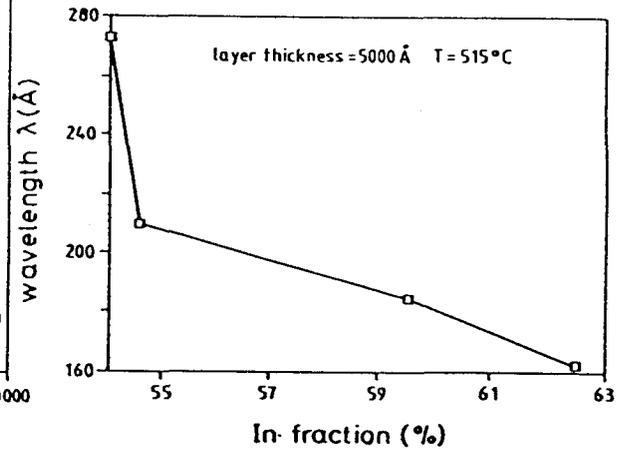


Figura 33(b). Dependencia de la longitud de onda de la modulación fina en función de la fracción molar de In.

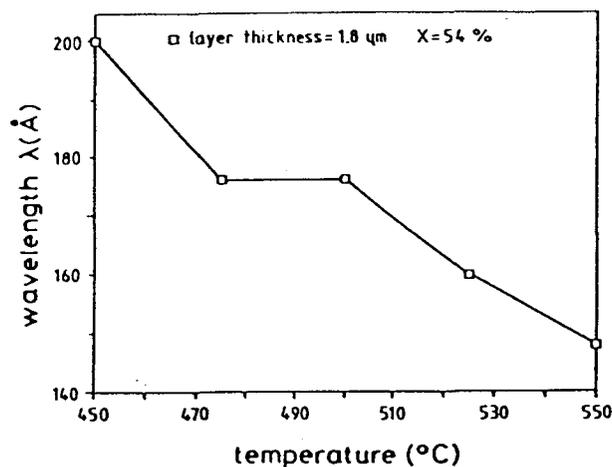


Figura 33(c). Evolución de la longitud de onda λ en función de la temperatura de crecimiento.

Nuestro propósito a continuación es ver si podemos reproducir estos resultados mediante los parámetros obtenidos por AO, y ver si esta técnica aporta algo nuevo.

En principio las modulaciones de composición se presentan en los espectros de AO como dispersiones energéticas, y lo que tenemos que tener en cuenta es que si hay varios efectos que contribuyan a la dispersión energética, nosotros sólo veremos el que domine. Por ejemplo, en todas las muestras siempre habrá una dispersión de composición debida a las fluctuaciones estadísticas, que darán lugar a una dispersión energética σ_{E1} , ahora bien, si

tenemos una modulación de composición que origine fluctuaciones de composición mayores a las estadísticas, éstas darán lugar a una dispersión energética σ_{E2} que enmascarará a la anterior. También podríamos tener un campo de deformaciones que predomine sobre los dos anteriores.

Este último es el caso de las muestras AL95X donde, como veremos en el siguiente apartado, las dispersiones energéticas más importantes son las debidas a un campo de deformaciones, por lo cual no podemos utilizar estas muestras para estudiar la modulación fina, puesto que su contribución a la dispersión energética es menor. Esto no quiere decir que la AO sea una técnica menos potente que la microscopía TEM, sino que son técnicas complementarias, cada una de ellas aporta cierta información de la capa epitaxial. Mediante microscopía hemos visto que existe una modulación fina, y mediante AO hemos descubierto que existe un campo de deformaciones que origina la dispersión energética.

Por otro lado en las muestras donde varía el espesor de la capa epitaxial, AL44X, vimos que existía una modulación de composición en las primeras $0.5\mu\text{m}$ de dicha capa, la cual da lugar a una modulación de contraste de Λ del orden de cientos de nanómetros en microscopía TEM, y a una dispersión energética, en los espectros de AO, superior a 3meV . Además vimos que había una evolución de σ_E (σ_x) con el espesor de la capa, disminuyendo cuando aumenta el espesor. Resulta evidente que esta modulación gruesa enmascarará las dispersiones originadas por la modulación fina, que siempre serán menores. Sin embargo, a diferencia de la modulación gruesa, la fina está presente en todo el espesor de la capa, por lo que se pueden utilizar los resultados de las capas que atacamos químicamente, donde se pudo caracterizar la capa superior de las muestras, donde sólo hay modulación fina. Observando estos resultados, ver tabla X, podemos ver como la dispersión energética, y por lo tanto la dispersión de composición, correspondiente a esta parte de la capa epitaxial, es prácticamente constante alrededor de 2.0meV . De hecho se aprecia un cierto incremento de la dispersión, de 1.8meV a 2.6meV , al disminuir el espesor de la capa, pero esta variación es muy pequeña y, como dijimos, quizás sea debida a que durante el ataque químico eliminásemos parte de la capa donde hay modulación de composición.

Por último hemos ajustado los espectros de AO correspondientes a las muestras crecidas a

diferentes temperaturas. Los resultados de las cuales hemos resumido en la tabla XIII, y los ajustes aparecen en la figura 34.

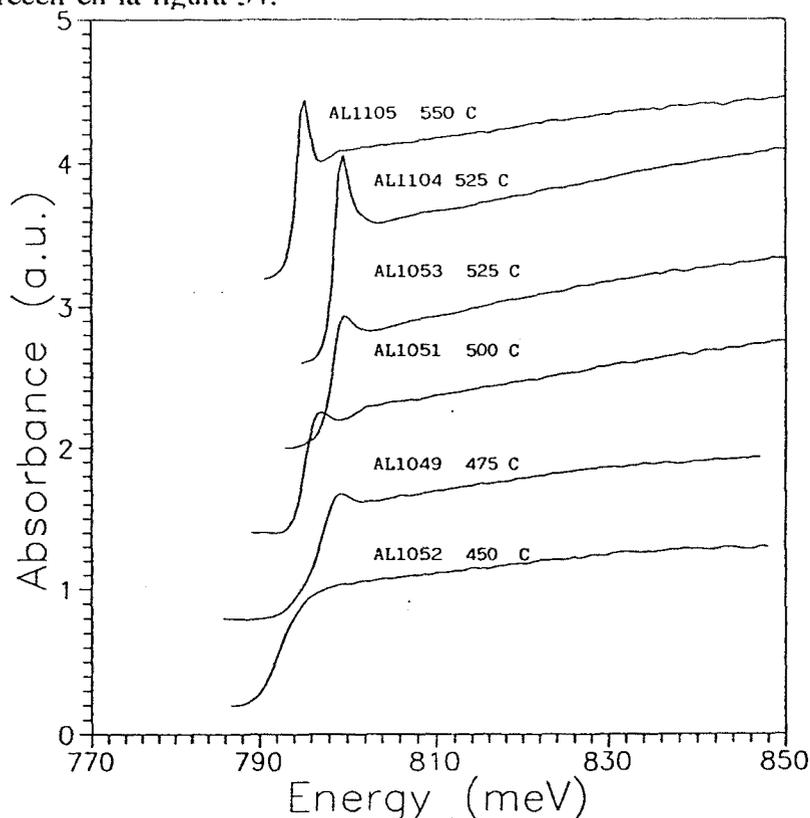


Figura 34. Espectros de absorción óptica correspondientes a muestras compresivas crecidas a diferentes temperaturas. ($x=0.54-0.55$).

En primer lugar diremos que los espesores los hemos calculado mediante las franjas de interferencia que aparecen en la zona de bajas energías de los espectros. Los espesores medidos son inferiores a los proyectados por el tecnólogo, que eran de $3\mu\text{m}$, sin embargo son lo suficientemente grandes como para pensar que las muestras se han relajado completamente. Esto ocurre en varias de las muestras, en las que hemos realizado los ajustes teniendo en cuenta sólo una banda de valencia (caso de capa sin deformaciones). No obstante, tanto la muestra AL1051 como la 1105 presentan claramente el desdoblamiento de la subbanda de valencia, lo que implica que aún subsiste cierta deformación remanente, y por lo tanto hemos ajustado con las dos subbandas.

Muestra	T_g (C)	Grosor (μm)	Absorbancia	R (meV)	E_g (meV)	σ_{LH} (meV)	$E_{HH} - E_{LH}$	$\sigma_{HH} / \sigma_{LH}$	I_{HH} / I_{LH}
AL1052	450	1.85	1.03	0.8	794.5	2.2			
AL1049	475	2.00	0.98	1.2	794.4	1.4			
AL1051	500	2.05	0.98	1.4	797.7	1.2	4.5	2.4	0.35
AL1053	525	1.85	1.05	1.0	800.2	1.0			
AL1104	525	2.05	1.20	1.4	800.8	0.8			
AL1105	550	2.05	1.03	1.7	796.9	0.8	3.4	3.3	0.35

Tabla XIII Parámetros obtenidos en los ajustes de AO de la muestras de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ crecidas a diferentes temperaturas.

Como podemos ver en la tabla XIII el único parámetro que está correlacionado con la temperatura de crecimiento, T_g , es la dispersión energética. En la figura 35 hemos representado esta dependencia, en ella podemos apreciar que la dispersión energética disminuye al aumentar T_g , tendiendo hacia el límite de 0.66 correspondiente a una dispersión debida puramente a fluctuaciones estadísticas de la composición.

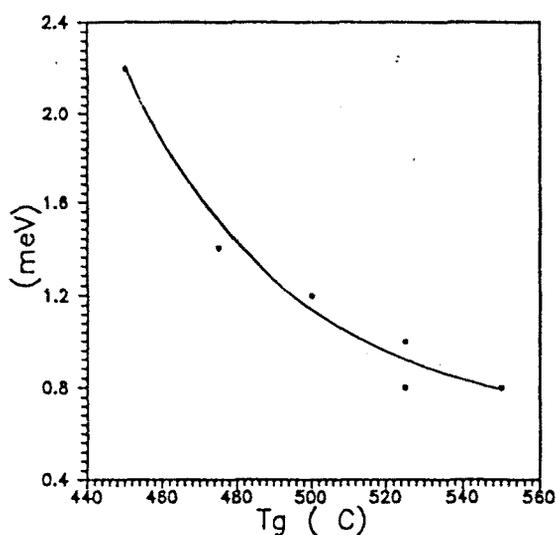


Figura 35.

Así pues, parece ser que podríamos correlacionar estas dispersiones energéticas con la modulación de contraste fina, puesto que tienen el mismo comportamiento respecto a la temperatura de crecimiento, sin embargo esto sería irreal. En primer lugar hemos de tener en cuenta que en las dos muestras donde hay desdoblamiento de las bandas, las dispersiones energéticas son debidas a campos de deformación, puesto que la relación de dispersiones energéticas entre las dos subbandas es del orden de 3. En segundo lugar, y esta la razón más importante, las medidas de microscopía nos dan una λ entre 150Å y 300Å y la resolución de nuestra técnica no es capaz de diferenciar en estas dimensiones. Este es el orden de las dimensiones del excitón y, como vimos antes, no podemos pretender ver detalles de la muestra del mismo tamaño que el del excitón. De todo esto podemos concluir que mediante los ajustes de espectros de AO no es posible estudiar las características ni el origen de la modulación fina, observada en microscopía electrónica.

II.16- DINAMICA DE RECOMBINACION EN MUESTRAS DEFORMADAS CON RELAJACION PARCIAL MEDIANTE DISLOCACIONES

En el apartado anterior, y en el que estudiamos los posibles orígenes de la dispersión energética (apartado II-11), trabajamos con dos muestras, AL957 y AL958, que presentan características muy interesantes. En el apartado II-10 vimos los ajustes efectuados sobre los espectros de AO, y en la tabla III presentamos los parámetros que obtuvimos de dichos ajustes. La característica más relevante de este estudio es el hecho de que la dispersión energética se debe a un campo de deformaciones, hecho que puede verse a partir de la relación entre las dispersiones energéticas de las dos subbandas. Además, a partir de los ajustes realizados hemos podido averiguar otras características destacables de estas muestras, una de ellas es la gran diferencia que existe entre la composición real de las capas epitaxiales, $x=0.57$ para la AL957 y $x=0.59$ para la AL958, y la composición que se había previsto al crecerlas en el reactor, que era de $x=0.596$ y $x=0.625$ respectivamente. Este resultado nos demuestra lo importante que es realizar el cálculo de la composición de la capa puesto que su variación puede ser muy significativa, sobre todo cuando se aleja de la composición para la cual los parámetros de malla de la capa y el sustrato son iguales. De todas formas el fenómeno más interesante, que podemos observar en estas muestras, tiene lugar al comparar los espectros de AO con los que se obtienen al transformar los espectros de PL a AO mediante la expresión (33). En la figura 36 presentamos la comparación de estos dos tipos de espectros para las dos muestras, AL957 y AL958.

Fijémonos primero en los espectros de la muestra AL958 donde, debido a que la dispersión energética del espectro de AO es mayor, resaltan más las diferencias entre las dos tipos de medidas. A primera vista, parece que el espectro obtenido mediante PL presente una dispersión energética menor que el de AO, este fenómeno se observa en los dos frentes de absorción, correspondientes a las dos subbandas de valencia. Ahora bien, físicamente esto es imposible puesto que la AO nos muestra siempre la densidad de estados y no se ve afectada por problemas de degeneración o termalización de los portadores, como puede ocurrir en la PL, que hacen variar la forma de los espectros. Su forma sólo se puede ver corregida por las dispersiones energéticas originadas por inhomogeneidades microscópicas, tales como modulaciones o dispersiones de composición o, como sucede en estas muestras,

por campos de deformaciones. Resulta evidente que estas inhomogeneidades afectarán de igual forma en los espectros de PL, dando lugar a una dispersión energética igual magnitud.

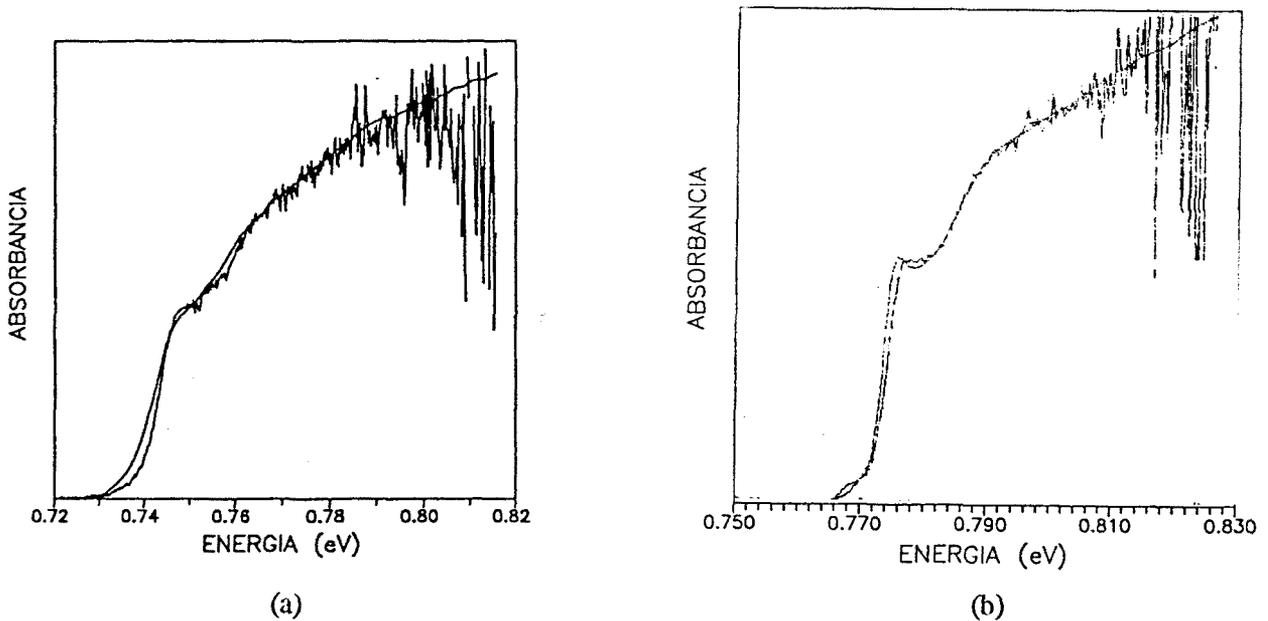


Figura 36. Espectros AO medido y AO a partir de PL para las muestras (a) AL958 y (b) AL957

Para poder encontrar una explicación del fenómeno observado en estos espectros, tenemos que analizar con más detalle la estructura que confieren las inhomogeneidades microscópicas a la muestra, veámoslo. Hemos mencionado que, en este caso, dichas inhomogeneidades son debidas a un campo de deformaciones, y nosotros sabemos que la energía del gap depende del estado de deformación del semiconductor, por lo tanto si en la capa epitaxial varían las deformaciones de un punto a otro de la muestra, significa que el gap también variará de un punto a otro de la muestra. Supongamos la situación representada en la figura 37.

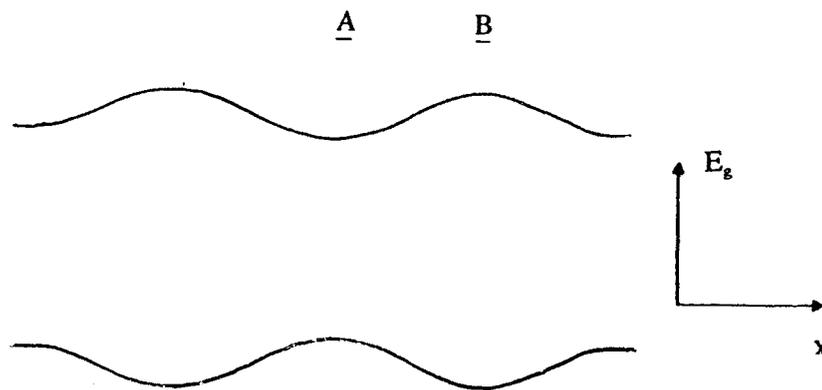


Figura 37. Variación de la energía del gap debido a la presencia de un campo de tensiones, a lo largo de la muestra.

¿Como afectará esta configuración a la forma de los espectros?

En los espectros de AO tendremos una dispersión energética debida a las variaciones globales de E_g , puesto que se sumará la contribución de cada punto al espectro global. En cuanto a los espectros de PL esta situación puede afectar de dos formas distintas:

1- Si el gas de electrones está termalizado, todos los puntos de la muestra que están a igual energía tienen la misma probabilidad de ocupación, y por lo tanto el espectro de AO que calculamos a partir de las medidas de PL coincidirá perfectamente con el medido directamente mediante AO.

2- Si el gas de electrones no está termalizado, la probabilidad de ocupación no sólo depende de la energía, sino que también depende de la posición. De esta forma la probabilidad de transición no radiativa, P_{nr} , depende de la posición, por lo que en el estado estacionario la ocupación del punto A es menor que la del punto B (ver figura 37), puesto que $P_{nr}(A) > P_{nr}(B)$. Veamos como afectaría este proceso a la forma de los espectros de PL; como el factor de ocupación en los puntos de menos energía es menor, la contribución al espectro de PL en esta región energética ha de ser menor, hecho que no sucederá para energías superiores puesto que el factor de ocupación no se ve modificado. Si nos fijamos en el espectro de la muestra AL958 vemos que esta es la situación que se presenta aquí, además, podemos ver que el efecto de menor contribución de las energías bajas se produce de igual forma para las dos subbandas de valencia, lo cual es coherente con la hipótesis realizada puesto que espacialmente coinciden las dos zonas energéticas de cada subbanda. Otro factor que refuerza esta hipótesis es que el efecto es más acusado cuanto mayor es la temperatura, puesto que los procesos de recombinación no radiativa dependen fuertemente de ésta, aumentando rápidamente P_{nr} al aumentar la temperatura. Esta evolución la hemos representado en la figura 38, en la que se encuentra la comparación de los dos tipos de medidas para distintas temperaturas, en el caso de la muestra AL958.

Ahora bien, la pregunta que surge a continuación es obvia, ¿cual es el fenómeno físico que hace que varíe la probabilidad de recombinación no radiativa de un punto a otro de la muestra?. La respuesta a esta pregunta está en la estructura de la capa epitaxial. En primer lugar hemos de tener en cuenta que, debido a la composición de la capa $x \approx 0.59$, el estado de deformación de ésta es de compresión y, remitiendonos a las consideraciones realizadas al principio de este capítulo, por lo tanto estas deformaciones provocan un aumento de la energía del gap. Mediante microscopía electrónica observamos la presencia de dislocaciones en esta capa, ahora bien, en los puntos donde el número de dislocaciones es mayor la capa epitaxial está más relajada, puesto que las dislocaciones son capaces de absorber parte de la energía elástica de la deformación, en estos puntos donde la capa está más relajada la energía del gap es menor, ya que está menos comprimida. Es decir, que espacialmente coinciden los puntos de menor energía del gap y aquellos en que hay mayor número de dislocaciones. Ahora bien, el efecto de las dislocaciones no se limita a un relajamiento de la capa sino que, como cualquier tipo de defectos, favorece los procesos de recombinación no radiativa, por

lo que en estos puntos será mayor P_{nr} .

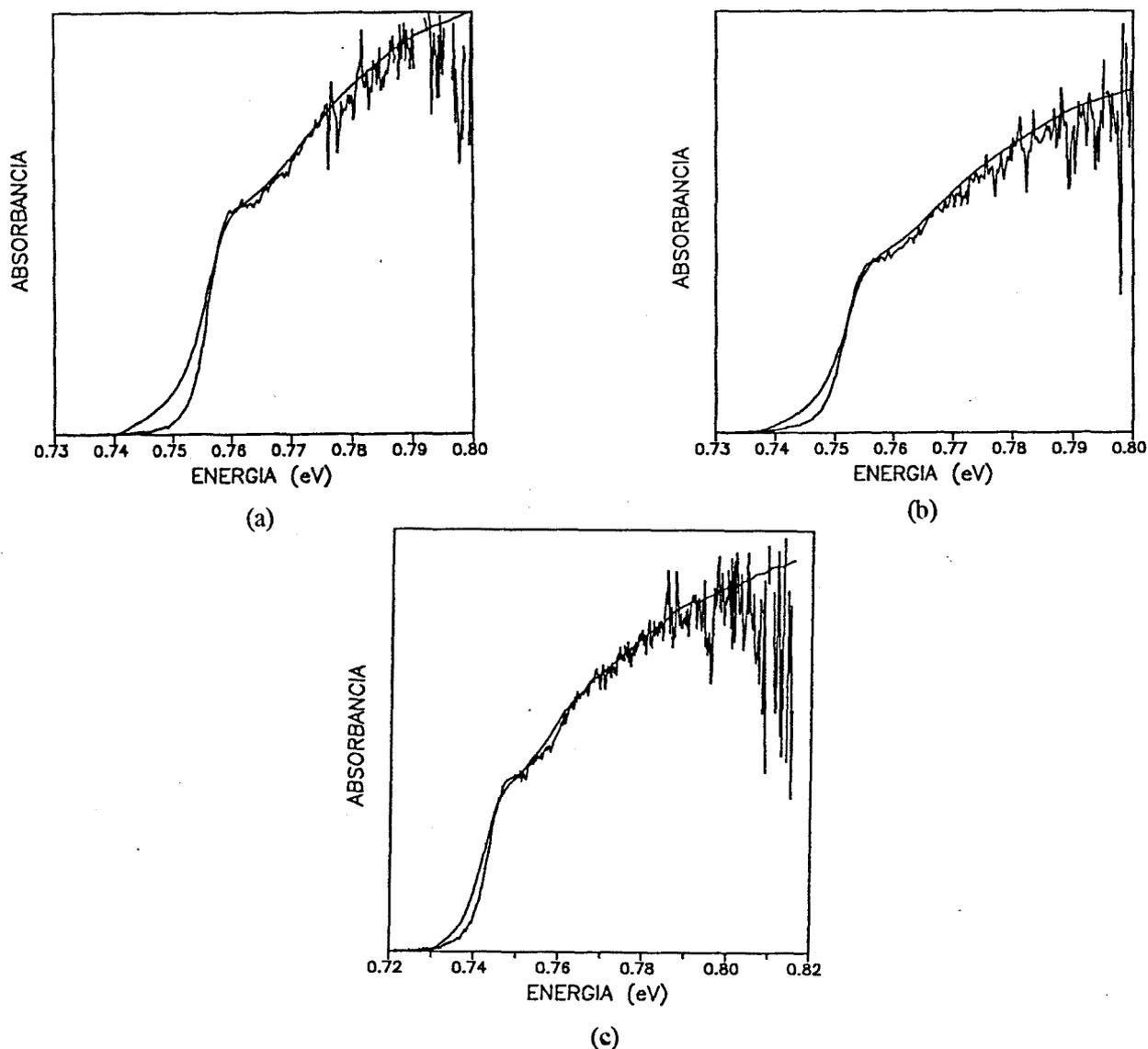


Figura 38. Evolución con la temperatura de los espectros AO medido y AO a partir de PL para la muestra AL958.

Si ahora realizamos la comparación de los espectros obtenidos por las dos técnicas para la muestra AL957, parece que el efecto sea totalmente el contrario, pero un análisis detallado nos muestra que esto no es así.

Efectivamente, a partir de la comparación del primer frente, parece que la contribución sea menor para la zona de energías grandes, pero esto no es así puesto que el efecto debería suceder en los dos frentes t, como podemos ver, el segundo frente coincide perfectamente

en los dos casos. Lo que ocurre en esta muestra es que la dispersión energética es mucho menor, gracias a que en este caso el deasuerdo de parámetro de malla es menor, de forma que es imposible observar el fenómeno anterior para energías bajas. En cuanto al problema de las energías altas del primer frente, reside en el excitón, parece ser que para las condiciones de excitación utilizadas en la medición de los espectros de PL los excitones libres tienen una población menor que la esperada, y por esta razón no aparece el pico debido al excitón. Posiblemente este efecto sea debido a que la presencia de dislocaciones hace que los excitones se disocien antes de recombinarse.

- [1] A.E.H. Love. *The Mathematical Theory of Elasticity*. Cambridge University Press. (4^a edición, 1927).
- [2] J.F. Nye. *Physical Properties of Crystals*. Oxford University Press. (1976)
- [3] S. Marco Colás. "Optimización de Sensores de Presión Piezoresistivos de Silicio para Instrumentación Biomédica y Aplicaciones a Alta Temperatura". Trabajo de Tesis Doctoral. Universitat de Barcelona, Julio 1993.
- [4] F.C. Frank and J.D. Van der Merwe. *Proc. Roy. Soc. (London)*, A **198**, (1949) 216.
- [5] JH. Van der Merwe. *J. Appl. Phys.* **34**, 117 (1962) .
- [6] J.H. Van der Merwe. *J. Appl. Phys.* **34**, 123 (1962).
- [7] J.W. Matthews and A.E.Blakeslee. *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).
- [8] H. Temkin. *Appl. Phys. Lett.* **55**, 1668 (1989).
- [9] T.G. Andersson, Z.G. Chen, V.D. Kulakovskii, A. Uddin and J.T. Vallin. *Appl. Phys. Lett.* **51**, 752 (1978).
- [10] P. Franzosi, G. Salviati, F. Genova, A. Satano and F. Taiariol. *J. Cryst. Growth* **75**, 521 (1986).
- [11] B.R. Bennet and J.A. del Alamo. *Proc. 4th Int. Conf. on InP*, 650 (1992).
- [12] M. Tacano, Y. Sugiyama and Y. Takeuchi. *Appl. Phys. Lett.* **58**, 2420 (1991).
- [13] R. People and J.C. Bean. *Appl. Phys. Lett.* **47**, 322 (1985).
- [14] B.W. Dodson and J.Y. Tsao. *Appl. Phys. Lett.* **51**, 1325 (1987).
- [15] R. Hull, J.C. Bean, D.J. Werder and R.E. Leibenguth. *Phys. Rev. B* **40**, 1681 (1989).
- [16] G.J. Whaley and P.I. Cohen. *Appl. Phys. Lett.* **57**, 144 (1990).
- [17] J.W. Matthews and A.E. Blakeslee. *J. Cryst. Growth* **27**, 118 (1974).
- [18] F. Peiró Martínez. "Caracterización por Microscopía Electrónica de Transmisión de Heteroestructuras InGaAs/InAlAs Crecidas por Epitaxia de Haces Moleculares Sobre Substratos de InP". Tesis Doctoral. Universitat de Barcelona. Julio 1993.
- [19] J.Y. Yao, T.G. Andersson and G.L. Dunlop. *J. Appl. Phys.* **69**, 2224 (1991).
- [20] A.M. Ceschin and J. Massies. *J. Cryst. Growth* **114**, 693 (1991).
- [21] L. Goldstein, F. Glas, J.Y. Marzin, M.N. Charasse and G. Le Roux. *Appl. Phys. Lett.* **47**, 1099 (1985).
- [22] F. Glas, C. Guille, P. Henoc and F. Houzay. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **87**, 71 (1987).

- [23] M.H. Grabow and G.H. Gilmer. *Surf. Sci.* **194**, 333 (1988).
- [24] B. De Crémoux. *J. Phys.* **43**, C5-19 (1982).
- [25] G.B. Stringfellow. *J. Cryst. Growth* **65**, 454 (1983).
- [26] S.N.G. Chu, S. Nakahara, K.E. Strege and W.D. Johnston, Jr. *J. Appl. Phys.* **57**, 4610 (1985).
- [27] T.H. Chiu, W.T. Tsang, S.N.G. Chu, J. Shah and J.A. Ditzenberger. *Appl. Phys. Lett.* **46**, 409 (1985).
- [28] A.G. Norman and G.R. Booker. *J. Appl. Phys.* **57**, 4715 (1985).
- [29] S. Mahajan, M.A. Sahid and D.E. Laughlin. *Ins. Phys. Conf. Ser.* **100**, 143 (1989).
- [30] G.E. Pikus and G.L. Bir. *Phys. Solid State* **1**, 136 (1959).
- [31] G.E. Pikus and G.L. Bir. *Phys. Solid State* **1**, 1502 (1960).
- [32] A. Gavini and M. Cardona. *Phys. Rev. B* **1**, 672 (1970).
- [33] D.R. Gaskill and N. Bottka. *Appl. Phys. Lett.* **56** (13), 1269 (1990).
- [34] R.J. Elliot. *Phys. Rev.* **108** (6), 1384 (1957).
- [35] T.C. Chang and C.G. Fonstad. *J. Quantun Electron* **25**, 171 (1989).
- [36] E.H. Reihlen, D. Birkedal T.Y. Wang and G.B. Stringfellow. *J. Appl. Phys.* **68**, 1750 (1990).
- [37] K.H. Goetz, D. Bimberg, H. Jurgensen, J. Selders, A.V. Solomov, G.F. Glinskii and M. Razeghi. *J. Appl. Phys.* **54**, 4543 (1983).
- [38] M.D. Sturge. *Phys. Rev.* **127**, 768 (1962).
- [39] Pallab, K. Bhattacharya, Mulpuri and V. Rao. *J. Appl. Phys.* **54** (9), 5096 (1983).
- [40] Bassignana, C.J. Miner and N. Puetz. *J. Appl. Phys.* **65** (11), 4299 (1989).
- [41] D.K. Gaskill and N. Bottka. *Appl. Phys. Lett.* **56** (13), 1269 (1990).
- [42] P.W. Yu and E. Kuphal. *Sol. State Comm.* **49**, 907 (1984).
- [43] Hirumitsu Asai and Kunishige Oe. *J. Appl. Phys.* **54** (4), 2052 (1983).
- [44] Seiji Mukai. *J. Appl. Phys.* **54** (5), 2635 (1983).
- [45] C. Charreux, G. Guillot and A. Nouilhast. *J. Appl. Phys.* **60** (2), 768 (1986).
- [46] H. Barry Bebb and E.W. Williams. *Semiconductors and Semimetals*, vol. **8**, Academic Press (1972).
- [47] H. Barry Bebb and E.W. Williams. *Semiconductors and Semimetals*, vol. **8**, pag. 298, Academic Press (1972).



- [48] C.H. Henry, R.A. Logan and F.R. Merritt. *J. Appl. Phys.* **51**, 3042 (1980).
- [49] C.H. Henry, R.A. Logan, H. Tenkin and F.R. Merritt. *IEEE J. Quantum Electron*, **QE-19**, 941 (1983).
- [50] P. Roura, J. Bosch and J.R. Morante. *Phys. Rev. B* **46** (16), 10453 (1992).
- [51] E.F. Schubert et al. *Phys. Rev. B* **30**, 813 (1984).
- [52] F. Glas. *J. Appl. Phys.* **62**, 1957 (1991).
- [53] D.K. Gastill, N. Bottka, L. Aina and Mattingly. *Appl. Phys. Lett.* **56** (13), 1269 (1990).
- [54] P.W. Yu and E. Kuphal. *Sol. State Comm.* **49** (9), 907 (1984).
- [55] P. Henoe, A. Izrael, M. Quillec and H. Launois. *Appl. Phys. Lett.* **40**, 963 (1982).
- [56] S. Mahajan, B.V. Dutt, H. Tenkin, R.J. Cava and W.A. Bonner. *J. Cryst. Growth* **68**, 589 (1984).
- [57] A.G. Norman and G.R. Booker. *J. Appl. Phys.* **57**, 4517 (1985).
- [58] F. Peiró, A. Cornet, J.R. Morante, S. Clark and R.H. Williams. *Appl. Phys. Lett.* **59** (16), 1957 (1991).
- [59] F. Glas. *J. Appl. Phys.* **62** (8), 3201 (1987).
- [60] J.Y. Yao, T.G. Anderson and G.L. Dunlop. *J. Appl. Phys.* **69**, 2224 (1991).
- [61] K.H. Chang, P.K. Bhattacharya and R. Givala. *J. Appl. Phys.* **66**, 2993 (1989).
- [62] S. Guha, A. Madhukar and K.C. Raykunar. *Appl. Phys. Lett.* **57**, 2110 (1990).
- [63] D.I. Westwood, D.A. Woolf and R.H. Williams. *J. Cryst. Growth* **98**, 782 (1989).
- [64] J.M. Barbeau, T.E. Jackman, D.C. Houghtan, P. Maigné and M.W. Denhoff. *J. Appl. Phys.* **63**, 7538 (1980).
- [65] A.J. Bons, Y.S. Oei and F.W. Schapink. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **100**, 161 (1989).
- [66] T.L. Mc Devitti, F.S. Turco, M.C. Tamargo, S. Mahajan, D.E. Langhlin, V.G. Keramidas and W.A. Bonner. *Inst. Phys. Conf. Ser.* **100**, 173 (1989).
- [67] F. Peiró, A. Cornet, A. Herms, J.R. Morante, S.A. Clark and R.H. Williams. *J. Appl. Phys.* **73** (9), 4319 (1993).

CARACTERIZACION DE POZOS CUANTICOS

III.1-INTRODUCCION

Cuando creamos una unión entre dos semiconductores distintos A y B, es decir una heterounión, se produce una discontinuidad en la estructura de bandas debido a la diferencia energética en el gap de los semiconductores. En general esta diferencia se repartirá entre las dos bandas de conducción, dando lugar a lo que llamaremos band-offset de conducción ΔE_c (fig.1a), y las dos bandas de valencia, band_offset de valencia ΔE_v . Si disponemos los semiconductores en la forma B-A-B, obtendremos dos uniones simétricas con los mismos parámetros que la anterior, pero si reducimos el espesor de A lo suficiente se producirán efectos propios de estructuras 2-dimensionales que modificarán las propiedades de los semiconductores que la componen. Así variarán parámetros como la densidad de estados, la movilidad de los portadores, etc. Factores que determinarán las propiedades de los dispositivos que con este tipo de estructuras construyamos. La configuración básica es la forma B-A-B donde el gap de A es menor que el de B y las bandas se disponen de forma que se crea un pozo de potencial para los electrones de A, y otro para los huecos de A, se dice que tenemos un pozo cuántico de tipo I (figura 1b). Este es el caso de heteroestructuras formadas con GaAs-Al_xGa_{1-x}As, In_xGa_{1-x}As-InP, GaAs-AlSb, In_xGa_{1-x}As-Al_xGa_{1-x}As [1,2], etc. La otra disposición típica de bandas es aquella en que se crea un pozo de potencial para un tipo de partículas y una barrera para las otras, diremos que tenemos un pozo cuántico de tipo II (figura 1c), un ejemplo de este tipo es la formada por InAs-GaSb [1,2]. A cualquiera de estos dos tipos de pozos se les llama pozos simples y los designaremos por SQW. A partir de estos dos tipos básicos se pueden construir pozos múltiples (MQW) simplemente apilando varios SQW (figura 1d), o bien superredes si el apilamiento es tal que la anchura de la barrera que separa los diferentes pozos es lo suficientemente delgada para que los estados creados en pozos contiguos puedan interactuar entre ellos (figura 1e).

Este tipo de estructuras permiten realizar dispositivos que aprovechan las propiedades de la 2-dimensionalidad, tales como transistores de efecto campo de alta velocidad (HEMT), láseres de pozos cuánticos, etc [3,8]. Uno de los parámetros básicos para conocer las propiedades opto-electrónicas de dichas heteroestructuras es el band-offset o discontinuidad de la banda de conducción (el band-offset de la banda de valencia queda determinado por la energía del gap, una vez conocido el de conducción), puesto que determinará la posición

energética de los estados creados en la heteroestructura. Así una de las primeras tareas que se realiza al fabricar una estructura de este tipo es diseñar un experimento para determinar el band_offset. Como detallaremos después, se han realizado muchos estudios en este sentido y se han utilizado muchas técnicas para medirlo.

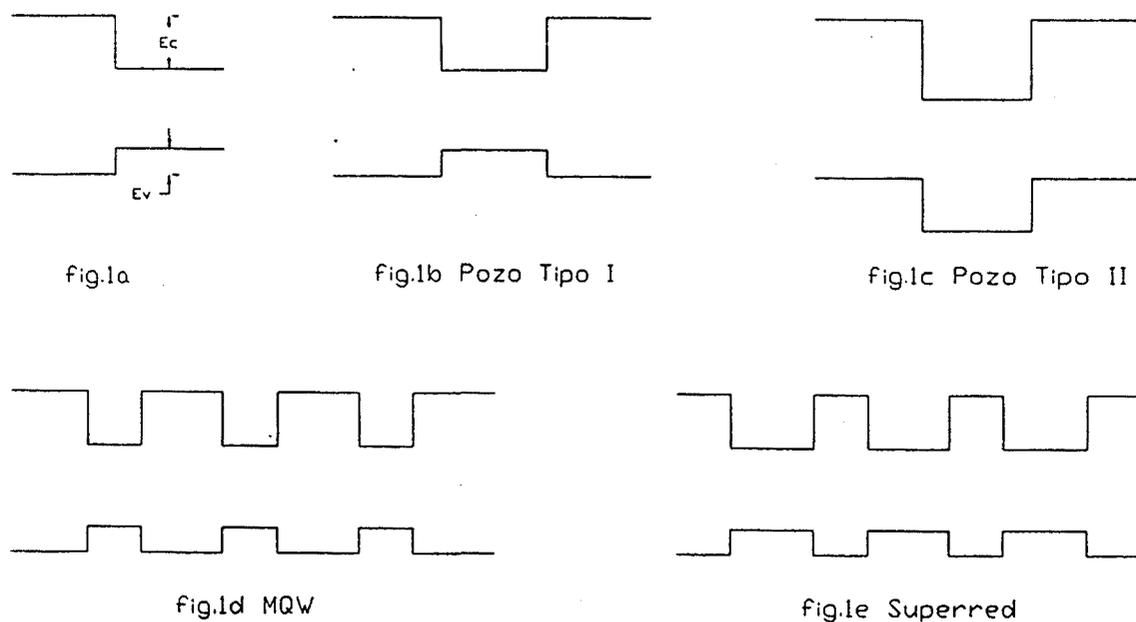


Figura 1. Distintos tipos de heteroestructuras.

En el presente capítulo nos hemos dedicado a hacer un estudio del cálculo de niveles en estas estructuras y posterior medición del band-offset en pozos cuánticos de InGaAs-InP. Para ello hemos utilizado dos tipos de técnicas:

- 1.-Medidas Eléctricas de Admitancia.
- 2.-Medidas Ópticas:
 - 2a.-Luminiscencia.
 - 2b.-Absorción.

Primero vamos a realizar una introducción teórica al cálculo de niveles energéticos en pozos cuánticos, puesto que lo necesitaremos para poder interpretar los resultados obtenidos en las mediciones.

III.2- NIVELES ENERGETICOS EN POZOS CUANTICOS SEMICONDUCTORES

Para comenzar a abordar el problema, podríamos decir que la situación es similar al problema básico de la mecánica cuántica de una partícula sometida al potencial de un pozo cuántico finito, donde en nuestro caso el potencial se debería al band-offset que existe entre las capas que componen el pozo. Sin embargo no debemos olvidar que en el caso de los semiconductores, las partículas, además de estar sometidas al potencial del pozo, se encuentran en el seno de un sólido, lo cual hará que los cálculos sean más complejos. De cualquier forma describiremos la solución de este problema básico puesto que nos facilitará la comprensión de otros modelos más complejos.

III.2a- POZO DE POTENCIAL FINITO

Supongamos el perfil de potencial definido por la ec.1 y dibujado en la (figura 2) :

$$\begin{aligned} V(z) &= 0 \quad \text{para } |z| > \frac{L}{2} \\ V(z) &= -V_0 \quad \text{para } |z| < \frac{L}{2} \end{aligned} \tag{1}$$

siendo L la anchura del pozo.

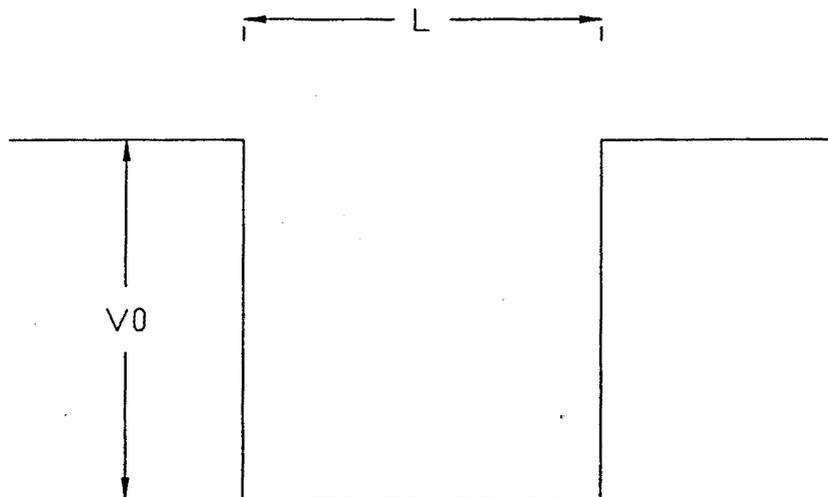


Figura 2. Pozo de potencial finito.

La ecuación de onda, independiente del tiempo, que describe la partícula dentro del pozo será solución de la ecuación de Schrödinger:

$$H(z, P_z) X(z) = EX(z) \quad (2)$$

es decir

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] X(z) = EX(z) \quad (3)$$

que ha de cumplir las condiciones de contorno siguientes :

- 1) $X(z)$ es continua para toda z .
- 2) dX/dz es continua para toda z .
- 3) $X(z)$ es finita para toda z .

Las soluciones $X(z)$, dentro y fuera del pozo, son la suma de dos ondas planas con vectores de onda opuestos. Dentro del pozo la onda se propaga y los vectores de onda son $\pm k_p$:

$$k_p = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)} \quad (4)$$

mientras que en la barrera las ondas son evanescentes y su vector de onda es :

$$\kappa_b = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (5)$$

Además como la función $V(z)$ es par respecto a z tendremos que $X(z)$ puede ser par o impar en z , con lo que la función de onda queda de la siguiente forma :

$$X(z) = A \cos(k_p z) \quad ; \quad E = \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m} - V_0 \quad \text{para estados pares} \quad (6a)$$

$$X(z) = A \sin(k_p z) \quad ; \quad E = \frac{\hbar^2 k_p^2}{2m} - V_0 \quad \text{para estados impares}$$

en el pozo, y :

$$X(z) = B \exp\left[-\kappa_B \left(z - \frac{L}{2}\right)\right] \quad \text{para } |z| > \frac{L}{2} \quad (6b)$$

$$X(z) = B \exp\left[\kappa_B \left(z + \frac{L}{2}\right)\right] \quad \text{para } |z| < -\frac{L}{2}$$

dentro de la barrera.

Aplicando las condiciones de contorno en $z = \pm L/2$, se deduce que la energía satisface las siguientes ecuaciones transcendentales:

$$\begin{aligned} \epsilon_n \operatorname{tg}(\epsilon_n) &= \left(\frac{mV_0 L^2}{2\hbar^2} - \epsilon_n^2\right)^{\frac{1}{2}} \quad \forall n \text{ par} \\ \epsilon_n \operatorname{cotg}(\epsilon_n) &= \left(\frac{mV_0 L^2}{2\hbar^2} - \epsilon_n^2\right)^{\frac{1}{2}} \quad \forall n \text{ impar} \end{aligned} \quad (7)$$

$$\text{donde } \epsilon_n = \left(\frac{mE_n L^2}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}$$

siendo E_n la energía del nivel.

A partir de estas ecuaciones podemos calcular numérica o gráficamente las energías de los distintos niveles creados en el pozo, conociendo su anchura L y V_0 , o bien calcular V_0 si conocemos la energía de uno cualquiera de los niveles, puesto que despejando de (7) obtenemos :

$$V_0 = E_n + E_n \operatorname{tg}^2 \left(\frac{mE_n L^2}{2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \forall n \text{ par} \quad (8)$$

$$V_0 = E_n - E_n \operatorname{cotg}^2 \left(\frac{mE_n L^2}{2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad \forall n \text{ impar}$$

III.2b- SOLUCION EN SEMICONDUCTORES (FUNCION ENVOLVENTE)

Evidentemente, como ya hemos mencionado con anterioridad, nuestro sistema no es tan sencillo puesto que nuestras partículas no sólo están sometidas al potencial V_0 del pozo, sino que se encuentran en una estructura formada por dos semiconductores distintos. En adelante supondremos que las uniones son abruptas, tal como representamos en la (fig.3). Además, supondremos que para $z > 0$ un electrón experimentará el potencial que experimentaría en un semiconductor volúmico de tipo A, mientras que para $z < 0$ es como si estuviese en un semiconductor volúmico de tipo B. Esta suposición es sólo verdadera aproximadamente, puesto que por una parte estamos despreciando los efectos originados por los estados electrónicos creados por los átomos de la interficie, y por otra parte suponemos que tecnológicamente somos capaces de crecer la estructura monocapa a monocapa, y en realidad durante el crecimiento se crean islas que hacen que la localización de la interficie en z varíe según el plano (x,y) [9,11].

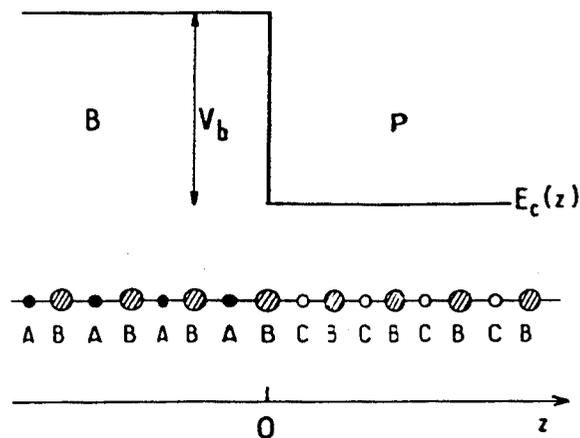


Figura 3. Heterounión abrupta.

Sería mejor considerar una anchura finita para la interficie para tener en cuenta los efectos que hemos mencionado, sin embargo esto complicaría demasiado la teoría. Afortunadamente, los estados de los portadores en el pozo no se ven muy afectados por los fenomenos de interficie, puesto que la probabilidad de que estos se encuentren en esta región es muy pequeña respecto al resto de la estructura.

La idea del modelo de la función envolvente es intentar modelizar la heteroestructura de una forma similar al problema del pozo finito. En este modelo se hacen dos hipótesis básicas :

1) Dentro de cada capa (barrera (B) y pozo (P)), la función de onda la construimos como una expansión de las funciones de Bloch correspondientes a las bandas que consideremos en nuestro sistema :

$$\begin{aligned} \Psi (r) &= \sum_I f_I^{(P)} (r) u_{I, k_0}^{(P)} (r) && \text{en el pozo} \\ \Psi (r) &= \sum_I f_I^{(B)} (r) u_{I, k_0}^{(B)} (r) && \text{en la barrera} \end{aligned} \quad (9)$$

donde las f_i son las funciones envolvente, k_0 es el punto de la zona de Brillouin entorno al cual construimos los estados de la heteroestructura, y "I" recorre todas las bandas que consideramos en el estudio.

2) Las partes periódicas de las funciones de Bloch se asume que son identicas para los dos semiconductores que componen la heteroestructura :

$$u_{I, k_0}^{(P)} (r) \equiv u_{I, k_0}^{(B)} (r) \quad (10)$$

a partir de estas dos hipótesis (9) y (10) podemos escribir :

$$\Psi (r) = \sum_I f_I^{(P, B)} (r) u_{I, k_0} (r) \quad (11)$$

e imponiendo la condición de continuidad de la función de onda en la interficie(z_0) de B y

P obtenemos :

$$f_I^{(P)}(r_1, z_0) = f_I^{(B)}(r_1, z_0) \quad (12)$$

siendo r_1 el vector de posición bidimensional (x,y). Suponiendo que el parámetro de red de los dos semiconductores es el mismo, la estructura será invariante en cuanto a traslaciones en el plano (x,y), por lo que f_I se puede factorizar en :

$$f_I^{(P,B)}(r_1, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(ik_1 r_1) X_I^{(P,B)}(z) \quad (13)$$

donde S es el área de la estructura y $k_1 = (k_x, k_y)$ el vector de onda bidimensional. Además, asumiremos que para toda "I" la función $X_I^{(P,B)}(z)$ varía lentamente en la escala de la célula unitaria. Así, la función de onda global es la suma de productos entre funciones que varían rápidamente, (las funciones $u_{k_0}(r)$ que son periódicas con la periodicidad de la célula unitaria) por funciones de variación lenta a esa escala. Estas hipótesis nos permiten simplificar el problema hasta un punto en que podemos abordarlo, pero como veremos luego darán lugar a ciertas limitaciones sobre la validez de los resultados que obtengamos.

Otra condición sobre las funciones de este modelo es que los puntos extremales entorno a los cuales se construyen los estados de la heteroestructura, han de ser los mismos en los dos semiconductores, en el caso de estados relacionados con los extremos Γ este método se ha implementado en heteroestructuras como el GaAs-AlAs, $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As-InP}$, GaAs-InAs, etc., y para estados relacionados con el extremo L se ha realizado en $\text{PbTe-Pb}_x\text{Sn}_{1-x}\text{Te}$ [12]. Cuando hay mezcla de tipos de puntos extremales se ha de recurrir a métodos más precisos como son los cálculos de tight-binding [13,14], o métodos de pseudo-potenciales [15,16].

Tras estas consideraciones cualitativas sobre las funciones de onda escribir el Hamiltoniano que actuará sobre estas funciiones :

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V_P(r) Y_P + V_B(r) Y_B \quad (14)$$

donde Y_p (Y_B) es la función escalón, que toma el valor 1 cuando r corresponde al pozo P (barrera B), y V_B (V_P) es el potencial medio a que estaría sometida una partícula que se encontrase en el semiconductor que forma la barrera (pozo). Haciendo actuar H sobre las funciones de onda $\Psi(r)$, multiplicando por

$$u_{m0}^* \exp(-iK_1 r_1) X_m^{*(P,B)}(z)$$

e integrando sobre todo el espacio, se obtiene que las funciones envolvente son las soluciones del siguiente sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden [17] :

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^8 \left(\left[\epsilon_{m0}^{(P)} + V_m(z) + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \delta_{lm} - \left[\frac{i\hbar}{m_0} \langle l | p_z | m \rangle \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar k \langle l | p_x | m \rangle}{m_0} \right] \right) \\ & - \sum_{m=1}^8 \left(\left[\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{M_{1m}^{zz}} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{i\hbar^2}{2} \sum_{\alpha=x,y} \left(k_\alpha \frac{1}{M_{1m}^{\alpha z}} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{M_{1m}^{z\alpha}} k_\alpha \right) + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha,\beta=x,y} k_\alpha \frac{1}{M_{1m}^{\alpha,\beta}} k_\beta \right] \right) X_m \\ & = \epsilon X_l; \quad 1 \leq l \leq 8 \end{aligned} \tag{15}$$

Donde se ha restringido el tratamiento exacto a las bandas que tienen por puntos extremales a $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$, puesto que en la mayoría de semiconductores III-V con los que se suele trabajar en este tipo de estructuras, estas bandas son las que se encuentran más juntas y crean los niveles de interés, las posibles contribuciones de bandas superiores como mucho prodrán tenerse en cuenta como una perturbación de segundo orden. En la ec.(15) $\epsilon_{m0}^{(P)}$ es la energía de la banda m , para $k=0$, en el pozo y $V_m(z)$ es igual a cero para z pertenecientes a la barrera, e igual al band-offset para valores de z pertenecientes al pozo. Los términos en el segundo paréntesis corresponden a la contribución lineal de la interacción $k \cdot p$ entre bandas, mientras los del tercer paréntesis son la contribución cuadrática, cada una de ellos tienen su componente en la dirección z (dirección de crecimiento de la estructura), y otra perpendicular a ella, así como términos cruzados.

Como se puede comprobar de (15) el problema del cálculo de niveles energéticos se reduce a la solución de un sistema de ec. diferenciales que gobiernan el comportamiento espacial de las funciones en envolvente. Mientras que los detalles microscópicos de la heteroestructura,

es decir todos los parámetros que dependen de los fenómenos que varían rápidamente en la escala de la célula unidad han desaparecido explícitamente de las ecuaciones de movimiento. Sólo están presentes mediante parámetros efectivos como son los elementos de matriz entre bandas $\langle l | p | m \rangle$, el tensor de masa efectiva M_{lm}^{ab} y los band-offset V_l , que por otra parte son parámetros conocidos mediante mediciones experimentalmente.

Para solucionar el sistema dado por (15) hay diferentes aproximaciones que nos permiten llegar a resultados analíticos. El más sencillo de todos es el modelo de Ben Daniel-Duke[18], el cual presupone que las bandas de los semiconductores que componen la heteroestructura son parabólicas no degeneradas e isotrópicas, pero con masas efectivas distintas en cada semiconductor. Con estas consideraciones el sistema (15) queda reducido a la siguiente forma (para electrones) :

$$\left[\epsilon_s + V_0(z) - \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{\mu(z)} \frac{\partial}{\partial z} + \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2\mu(z)} \right] X(z) = \epsilon X(z) \quad (16)$$

donde :

$$\begin{aligned} \mu(z) &= m_p \quad \text{si } z \text{ corresponde al pozo} \\ &= m_b \quad \text{si } z \text{ corresponde a la barrera} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V_s(z) &= 0 \quad \text{si } z \text{ corresponde al pozo} \\ &= V_0 \quad \text{si } z \text{ corresponde a la barrera} \end{aligned}$$

Donde V_0 es el band-offset de conducción.

Las condiciones de contorno son en este caso la de continuidad de la función de onda $X(z)$ y de la de densidad de corriente $1/\mu(z) dX/dz$.

En este caso, las soluciones son sencillas y muy similares a las calculadas en el caso del problema académico de la mecánica cuántica de una partícula en un pozo finito. Para $m_p \cdot m_b > 0$ y estados ligados al pozo (que son los que nos interesan) la solución da una

función envolvente par o impar de la forma :

$$\begin{aligned} X_{par}(z) &= A \cos(k_p z) & |z| \leq \frac{L}{2} \\ X_{par}(z) &= B \exp\left[-\kappa_B\left(z - \frac{L}{2}\right)\right] & |z| \geq \frac{L}{2} \end{aligned} \quad (17a)$$

$$\begin{aligned} X_{impar}(z) &= A \sin(k_p z) & |z| \leq \frac{L}{2} \\ X_{impar}(z) &= B \exp\left[-\kappa_B\left(z - \frac{L}{2}\right)\right] & |z| \geq \frac{L}{2} \end{aligned} \quad (17b)$$

Donde L es la anchura del pozo. Imponiendo las condiciones de contorno en las interfaces $|z| = L/2$ se obtienen las ecuaciones implícitas cuyas raíces son los niveles de energía E_n de los estados ligados de la heteroestructura, según el modelo de Ben Daniel-Duke :

$$\begin{aligned} \epsilon_n \operatorname{tg}(\epsilon_n) &= \frac{m^P}{m^B} \left(\frac{m^P L^2 V_0}{2\hbar^2} - \frac{m^B}{m^P} \epsilon_n^2 \right)^{\frac{1}{2}} & \forall n \text{ par} \\ \epsilon_n \operatorname{cotg}(\epsilon_n) &= -\frac{m^P}{m^B} \left(\frac{m^P L^2 V_0}{2\hbar^2} - \frac{m^B}{m^P} \epsilon_n^2 \right)^{\frac{1}{2}} & \forall n \text{ impar} \end{aligned} \quad (18)$$

donde $\epsilon_n = \left(\frac{m^P L^2 E_n}{2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}$

Y si experimentalmente conocemos alguno de los niveles de energía E_n podemos conocer el band-offset V_0 , puesto que a partir de (23):

$$\begin{aligned} V_0 &= E_n + \frac{m^B}{m^P} E_n \operatorname{tg}^2 \left(\frac{m^P E_n L^2}{2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} & \forall n \text{ par} \\ V_0 &= E_n - \frac{m^B}{m^P} E_n \operatorname{cotg}^2 \left(\frac{m^P E_n L^2}{2\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} & \forall n \text{ impar} \end{aligned} \quad (19)$$

Comparando estos resultados con los obtenidos para el problema del pozo finito en el vacío, podemos ver que se obtienen relaciones muy similares. Esto se debe sobre todo a que hemos evitado, en lo posible, los detalles atómicos de los semiconductores. De todas formas estos

detalles quedan reflejados en dos puntos de las ecuaciones :

- 1) Sustituimos m_0 por la masa efectiva (como resultado del potencial periódico).
- 2) Las expresiones de la energía están corregidas por el factor m^B/m^P , que da cuenta del cambio de masas efectivas en la interficie.

De las ecuaciones (18) podemos ver que cualquier pozo tiene como mínimo una nivel de energía ligado, sea cual sea la altura de la barrera V_0 . El número de niveles ligados en el pozo viene dado por :

$$N=1+Parte\ Entera\left[\left(\frac{2m^P V_0 L^2}{2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}}\right] \quad (20)$$

El modelo de Ben Daniel-Duke es muy sencillo y nos da expresiones analíticas para el cálculo del band-offset, el cual es el objetivo de nuestra investigación en el presente capítulo. Sin embargo, en la mayoría de heteroestructuras no es lo suficientemente preciso, puesto que en los semiconductores la masa efectiva varía con la energía, es decir las bandas no son parabólicas.

III.2c- HETEROESTRUCTURAS CUYAS BANDAS SIGUEN EL MODELO DE KANE

El siguiente paso en el cálculo de los niveles (o del band-offset) proviene de un efecto que se produce en los semiconductores de volumen y tiene una importancia aún mayor cuando creamos la heteroestructura. Si ϵ_{n0} es la energía de un punto extremal de la banda n , y para una cierta k el valor de $\epsilon_{nk}-\epsilon_{n0}$ no es despreciable respecto a la distancia energética con las otras bandas, se necesita realizar un estudio más detallado que el modelo de bandas parabólicas. La primera idea podría ser un tratamiento perturbativo entre las bandas, sin embargo, si el conductor con que trabajamos es tal que el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción más baja están relativamente juntos, y suficientemente separados del resto de las bandas se puede realizar un tratamiento más exacto. Esto es lo que hizo Kane [19] para el caso del InSb, donde Γ_6 (BC), Γ_8 (BV) y Γ_7 están muy juntos ($\epsilon_0 \sim 0.26\text{eV}$), y bien separados de las otras bandas. En este caso Kane

diagonaliza exactamente el término de acoplamiento entre estas bandas y trata el resto como perturbaciones de segundo orden.

De hecho este tratamiento es extensible a muchos de los semiconductores III-V y II-VI de los utilizados en la construcción de heteroestructuras tales como GaAs-Al_xGa_{1-x}As, In_xGa_{1-x}As-InP, HgTe-CdTe, In_xGa_{1-x}As-Al_xGa_{1-x}As, etc.

Siguiendo el formalismo de Kane, si denotamos como $\lambda(k)$ la energía :

$$\lambda(k) = \epsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (21)$$

se encuentra que las $\lambda(k)$ son soluciones de las ecuaciones [20] :

$$\lambda(k) = -\epsilon_0 \quad (22a)$$

o

$$\lambda(k) [\lambda(k) + \epsilon_0] [\lambda(k) + \epsilon_0 + \Delta] = \hbar^2 k^2 P^2 \left[\lambda(k) + \epsilon_0 + \frac{2\Delta}{3} \right] \quad (22b)$$

donde ϵ_0 es la separación entre Γ_6 y Γ_8 (gap del semiconductor) fig.4, Δ la diferencia de energía entre Γ_8 y Γ_7 (acoplamiento spín-órbita) y P es el elemento de matriz entre bandas del operador velocidad :

$$P = -\frac{i}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle = -\frac{i}{m_0} \langle S | p_y | Y \rangle = -\frac{i}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle \quad (23)$$

todos los otros elementos de matriz de P desaparecen por simetría. Siendo $|S\rangle$, $|X\rangle$, $|Y\rangle$ y $|Z\rangle$ son las funciones de Bloch de las 8 bandas (Γ_6 , Γ_7 y Γ_8) cuyas combinaciones lineales utilizaremos como base de las funciones de onda (Tabla I).

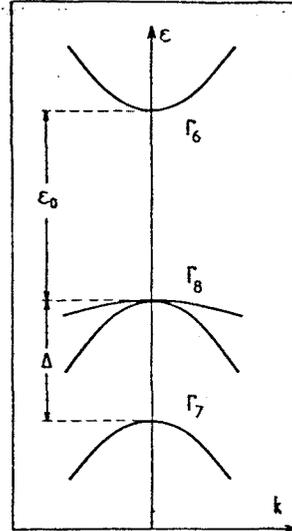


Figura 4. Estructura de bandas de un compuesto III-V con gap directo para $k=0$. Sólo se muestran los estados (Γ_6 , Γ_7 , Γ_8) próximos al nivel de Fermi a $T=0$ para un cristal perfecto.

u_i	$ J, m_J\rangle$	ψ_{J, m_J}	$\epsilon_i(k=0)$
u_1	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$i S\uparrow\rangle$	0
u_3	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} Z\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X+iY)\downarrow\rangle$	$-\epsilon_0$
u_5	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X+iY)\uparrow\rangle$	$-\epsilon_0$
u_7	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} (X+iY)\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z\uparrow\rangle$	$-\epsilon_0 - \Delta$
u_2	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$i S\downarrow\rangle$	0
u_4	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{6}} (X-iY)\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} Z\downarrow\rangle$	$-\epsilon_0$
u_6	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X-iY)\downarrow\rangle$	$-\epsilon_0$
u_8	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} (X-iY)\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} Z\downarrow\rangle$	$-\epsilon_0 - \Delta$

Tabla I. Partes periódicas de las funciones de Bloch de Γ_6 , Γ_7 , Γ_8 . Los índices J, m_J indican los valores propios de los operadores J y J_z respectivamente.

De las ecuaciones (22) vemos que cada solución es dos veces degenerada. Además las relaciones de dispersión son isotrópicas en k , es decir $\epsilon(k)$ sólo depende del módulo $|k|$, cuando en realidad son anisotrópicas, pero esto es un efecto de interacción $k \cdot p$ entre Γ_6 , Γ_7 y Γ_8 y bandas superiores, y en el presente análisis sólo se ha tenido en consideración el acoplamiento entre las bandas Γ_6 , Γ_7 y Γ_8 .

Las soluciones de la ec.(22a) corresponden a los estados de las partículas pesadas (Γ_8 con $m_j = \pm 2/3$), mientras que las de la ec.(22b) corresponden a los estados de las partículas ligeras (Γ_6 , Γ_7 y Γ_8 con $m_j = \pm 1/2$). Si desarrollamos la ecuación (22b) hasta segundo orden en k entorno a $k=0$, nos queda la expresión :

$$\begin{aligned} & [\lambda(0) + Bk^2] [\lambda(0) + Bk^2 + \epsilon_0] [\lambda(0) + Bk^2 + \epsilon_0 + \Delta] \\ & = \hbar^2 P^2 k^2 \left[\lambda(0) + Bk^2 + \epsilon_0 + \frac{2\Delta}{3} \right] \end{aligned} \quad (24)$$

en particular para los términos en $k=0$ obtenemos :

$$\lambda(0) [\lambda(0) + \epsilon_0] [\lambda(0) + \epsilon_0 + \Delta] = 0 \quad (25)$$

de donde obtenemos la energía de los puntos extremos ($k=0$) de las bandas Γ_6 , Γ_7 y Γ_8 de las partículas ligeras :

$$\begin{aligned} \lambda(0) &= 0 && (\Gamma_6, \text{ para electrones BC}) \\ \lambda(0) &= -\epsilon_0 && (\Gamma_8, \text{ para huecos ligeros BV}) \\ \lambda(0) &= (\epsilon_0 + \Delta) && (\Gamma_7, \text{ para huecos spin-órbita}) \end{aligned} \quad (26)$$

Si ahora de (24) sólo retenemos los términos en k^2 obtenemos las relaciones para las masas efectivas en los puntos extremos ($k=0$) de las bandas :

$$\frac{1}{m_{\Gamma_6}} = \frac{1}{m_0} + \frac{4P^2}{3\epsilon_0} + \frac{2P^2}{3(\epsilon_0 + \Delta)} \quad \text{para electrones} \quad (27a)$$

$$\frac{1}{m_{\Gamma_8}} = \frac{1}{m_0} - \frac{4}{3} \frac{P^2}{\epsilon_0} \quad \text{para huecos ligeros} \quad (27b)$$

$$\frac{1}{m_{\Gamma_7}} = \frac{1}{m_0} - \frac{2P^2}{3(\epsilon_0 + \Delta)} \quad \text{para huecos s-o} \quad (27c)$$

Donde m_0 es la masa del electrón en el vacío. De estas relaciones podemos comprobar que la masa efectiva de los electrones en Γ_6 es positiva, mientras que la de los huecos en Γ_8 y Γ_7 es negativa, además de los efectos de simetría del acoplamiento $k \cdot p$ entre las bandas.

Hasta ahora solamente hemos realizado aproximaciones de la ec.22b, de las cuales hemos deducido las energías de los puntos extremales para cada banda, y expresiones que nos relacionan el elemento de matriz P (que en principio desconocemos), con magnitudes conocidas, como son las masas efectivas en $k=0$, la energía del gap y el desdoblamiento espín-órbita. A continuación, vamos a obtener expresiones exactas, a partir de la ec.22b, de las relaciones de dispersión $\epsilon(k)$ para cada banda, en función de parámetros conocidos. Esto nos permitirá obtener las expresiones para las masas efectivas, en función de la energía.

Definamos ahora para los electrones el parámetro $m_{\Gamma_6}(\lambda)$ de la forma siguiente :

$$\lambda(k) = \epsilon(k) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\Gamma_6}(\lambda)} \quad (28)$$

Sustituyendo (27a) y (28) en (22b) obtenemos una expresión para la relación de dispersión de la banda de conducción (Γ_6), en la que desaparece el término P :

$$\frac{m_{\Gamma_6}(\lambda)}{m_{\Gamma_6}(0)} = \frac{(\lambda + \epsilon_0)(\lambda + \epsilon_0 + \Delta) + \left(\epsilon_0 + \frac{2\Delta}{3}\right)}{\epsilon_0(\epsilon_0 + \Delta) \left(\lambda + \epsilon_0 + \frac{2\Delta}{3}\right)} \quad (29a)$$

y operando de una forma similar con (27a,b) y el equivalente a (29) para las otras bandas obtenemos las reacciones de dispersión para Γ_8^1 y Γ_7 :

$$\frac{m_{\Gamma_8^1}(\lambda)}{m_{\Gamma_8^1}(-\varepsilon_0)} = -\frac{2}{3} \frac{\lambda(\lambda + \varepsilon_0)}{\varepsilon_0 \left(\lambda + \varepsilon_0 + \frac{2\Delta}{3} \right)} \quad (29b)$$

$$\frac{m_{\Gamma_7}(\lambda)}{m_{\Gamma_7}(-\varepsilon_0 - \Delta)} = -\frac{1}{3} \frac{\lambda + (\lambda + \varepsilon_0)(\lambda + \varepsilon_0 + \Delta)}{(\lambda + \varepsilon_0 + \Delta)(\varepsilon_0 + \Delta) \left(\lambda + \varepsilon_0 + \frac{2\Delta}{3} \right)} \quad (29c)$$

donde :

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_{\Gamma_6}(0)} &= \frac{1}{m_e} - \frac{1}{m_0} \\ \frac{1}{m_{\Gamma_8^1}(-\varepsilon_0)} &= \frac{1}{m_{lh}} - \frac{1}{m_0} \\ \frac{1}{m_{\Gamma_7}(-\varepsilon_0 - \Delta)} &= \frac{1}{m_{s-o}} - \frac{1}{m_0} \end{aligned} \quad (30)$$

y m_e , m_{lh} y m_{s-o} son las masas efectivas de los portadores en los puntos extremales de las bandas. Es importante hacer notar el hecho de que el parámetro que hemos definido como $m_r(\lambda)$ no es la masa efectiva del portador en función de la energía, puesto que si aplicamos la definición de masa efectiva :

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2\varepsilon(k)}{dk^2} \quad (31)$$

a la expresión de $\varepsilon(k)$ dada por (28) :

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\Gamma_6}(\lambda)} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

el resultado no es $m_{\Gamma_6}(\lambda) = m^*$ puesto que esta depende de k .

III.2d-ESTRUCTURA DE BANDAS DEL InGaAs Y EL InAlAs

Como podemos ver uno de los principales efectos del acoplamiento entre bandas descrito por el modelo de Kane es la dependencia de la masa efectiva con la energía, hecho que será transcendental en el cálculo de los niveles de energía en la heteroestructura. En la (figura 5a) hemos hecho una representación de $\epsilon(k)$ para el $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ y el $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$. Los parámetros que hemos utilizado para dicho cálculo los presentamos en la tabla II. Como podemos ver, los vectores de onda k son reales para los estados de la banda de conducción y valencia, mientras que para la banda prohibida nos salen vectores de onda k imaginarios, lo que significa que pertenecen a estados evanescentes. Un hecho importante es que la función energía $\epsilon(k)$ esta definida incluso en la banda prohibida lo que nos permite definir una masa efectiva para esta zona del diagrama de energías del semiconductor. Esto es muy importante en el cálculo de estados ligados a los pozos de las heteroestructuras, ya que cuando las partículas se encuentran en la barrera están en la banda prohibida del semiconductor que actua como tal.

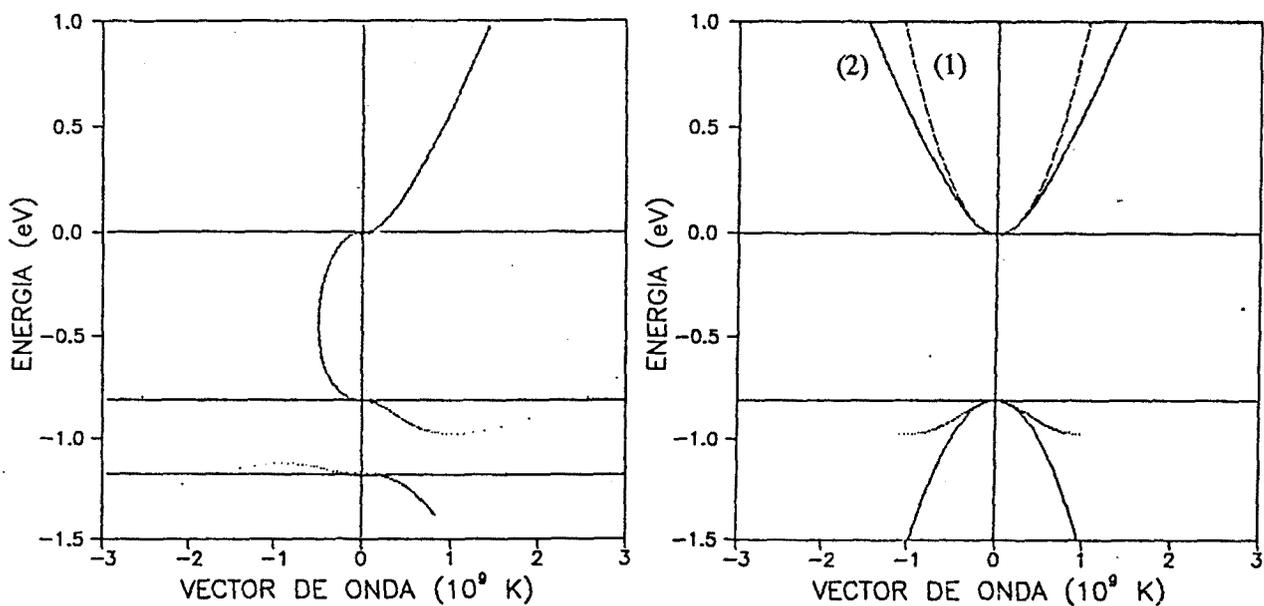


Figura 5. (a) Estructura de bandas de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. (b) Estructuras de bandas de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ correspondiente (1) al modelo de Kane y (2) al modelo de aproximación parabólica.

	In _{0.53} Ga _{0.47} As	In _{0.52} Al _{0.48} As
E _{gap} (meV)	810	1540
m _e (m ₀)	0.04112	0.0840
m _{lh} (m ₀)	-0.05030	-0.1477
m _{hh} (m ₀)	-0.4650	-0.4280
Δ (meV)	360	340

Tabla II. Parámetros utilizados en el cálculo de $\epsilon(k)$.

En la (figura 5b) mostramos la estructura de bandas para valores del vector de onda k reales que obtenemos mediante el presente cálculo junto con las calculadas simplemente mediante una aproximación parabólica, de esta comparación podemos ver que la masa efectiva para las partículas ligeras aumenta al alejarnos de los puntos extremales de las bandas. Otro hecho importante es que en este modelo las partículas pesadas (banda Γ_8^h) no sufren ningún acoplamiento con las partículas ligeras (bandas Γ_6 , Γ_7 y Γ_8^l). El acoplamiento se realiza con otras bandas más alejadas. De hecho la masa efectiva de estos nos da una idea de esta interacción, siendo menor cuanto más se aproxime a la masa del electrón libre, y mayor cuanto menor sea la masa.

Una vez calculadas las relaciones de dispersión $\epsilon(k)$ para las diferentes bandas de los semiconductores estamos en disposición de calcular la masa efectiva en función de la energía aplicando la ec.(31). Resulta evidente que considerando el modelo más sencillo de bandas parabólicas, la masa efectiva es constante para cada banda y con el valor en $k=0$, m_e , m_{lh} , m_{hh} y m_{s-o} . En cambio en el modelo de Kane que hemos utilizado sólo se mantiene constante la masa efectiva de los huecos pesados. En las fig.6 y 7 representamos las masas efectivas para electrones y huecos ligeros de los materiales In_{0.53}Ga_{0.47}As y el In_{0.52}Al_{0.48}As, materiales que forman respectivamente los pozos y las barreras de nuestras heteroestructuras.

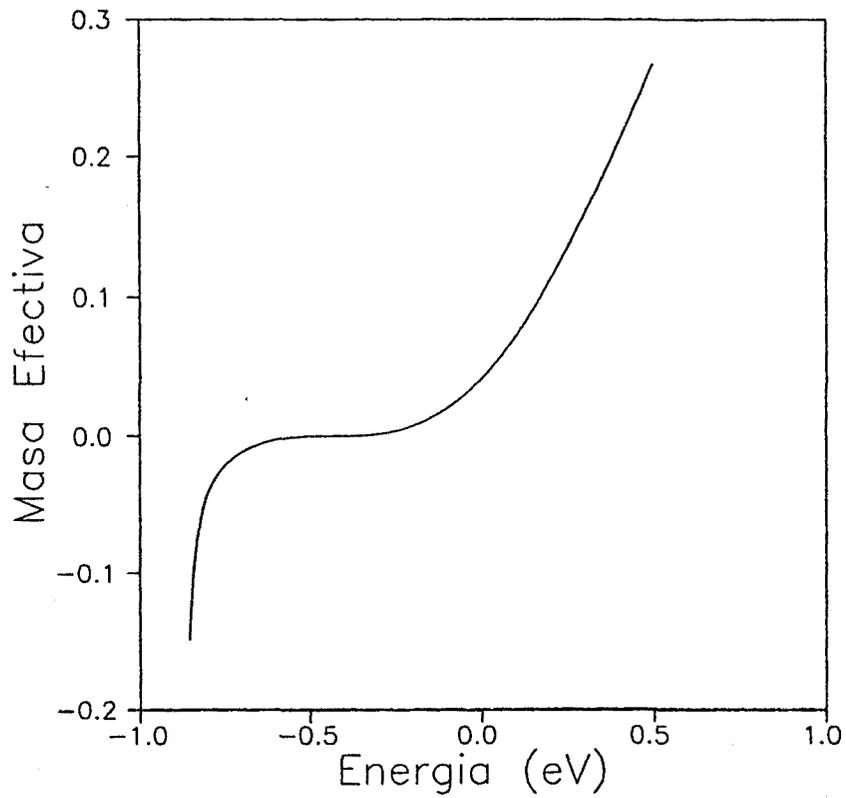


Figura 6. Masa efectiva para electrones y para huecos ligeros en In_{0.53}Ga_{0.47}As.

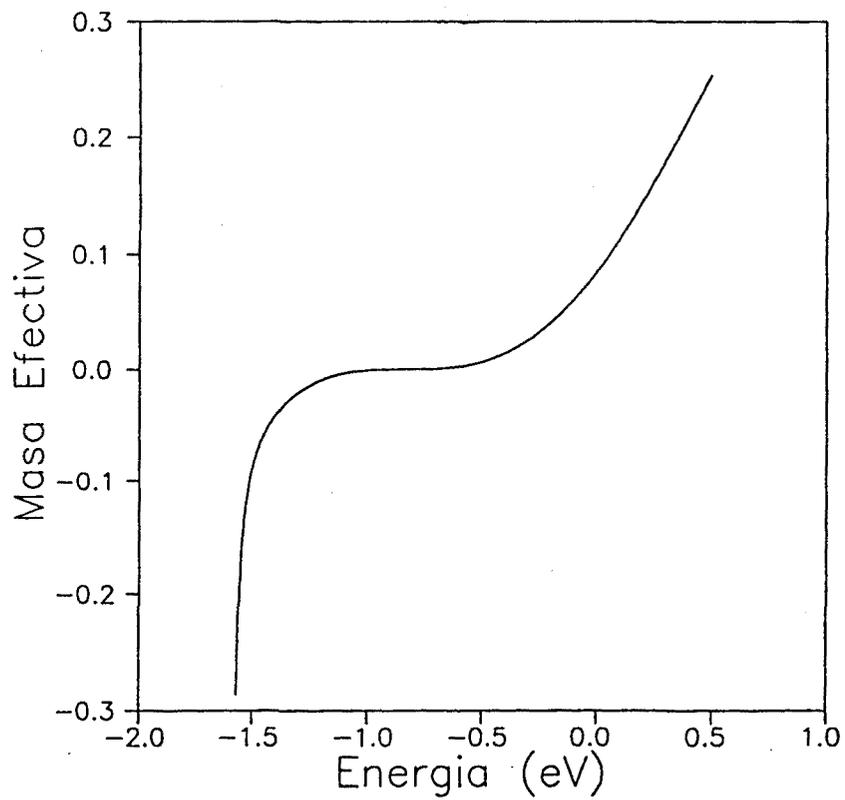


Figura 7. Masa efectiva para electrones y para huecos ligeros en In_{0.52}Al_{0.48}As.

A partir de estas gráficas podemos resaltar los puntos más interesantes del comportamiento de la masa efectiva con la energía :

- 1) Para $k=0$ la masa efectiva es igual a m_c cuando $\epsilon(0)=0$ y a m_v cuando $\epsilon(0)=-\epsilon_0$.
- 2) Cuando nos alejamos de los puntos en que $k=0$ hacia valores de los vectores de onda k reales, es decir en la BC y BV, el valor absoluto de la masa efectiva es monotonamente creciente.
- 3) Si nos movemos desde $k=0$ hacia valores imaginarios de este vector de onda, la masa efectiva disminuye hasta hacerse cero en el centro de la banda prohibida, a partir de aquí cambia de signo, volviendo a aumentar su valor absoluto. Cambia monotonamente de comportamiento de electrón a hueco.

III.2e-CALCULO DE ESTADOS EN LOS POZOS

Los estados y niveles de energía ligados en un pozo de este tipo vendrán dadas por las ecuaciones (17) y (18) respectivamente, pero teniendo en cuenta la dependencia, descrita en este apartado, de la masa efectiva con la energía de las partículas, tanto en el pozo como en la barrera. Veamos como afecta esta dependencia con el siguiente ejemplo. Supongamos que el pozo creado por la discontinuidad originada en la BC al realizar la heteroestructura siguiente $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}-\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}-\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, tiene un band-offset de 470meV y que la anchura de este es de 4.5nm, el diagramas de energías será el presentado en la figura 8, mientras que las funciones $m^*(\epsilon)$ las tenemos representadas en las figuras 6 y 7. Calculando los niveles de energía con el modelo de Ben Daniel-Duke y con la corrección aportada por el modelo de Kane obtenemos los resultados presentados en la tabla III.

Nivel Energético	Ben Daniel-Duke	Kane
E_0	130meV	137meV
E_1	469meV	276meV

Tabla III . Valores energéticos de los niveles creados en un pozo, como el de la fig.8, según los dos modelos comentados.

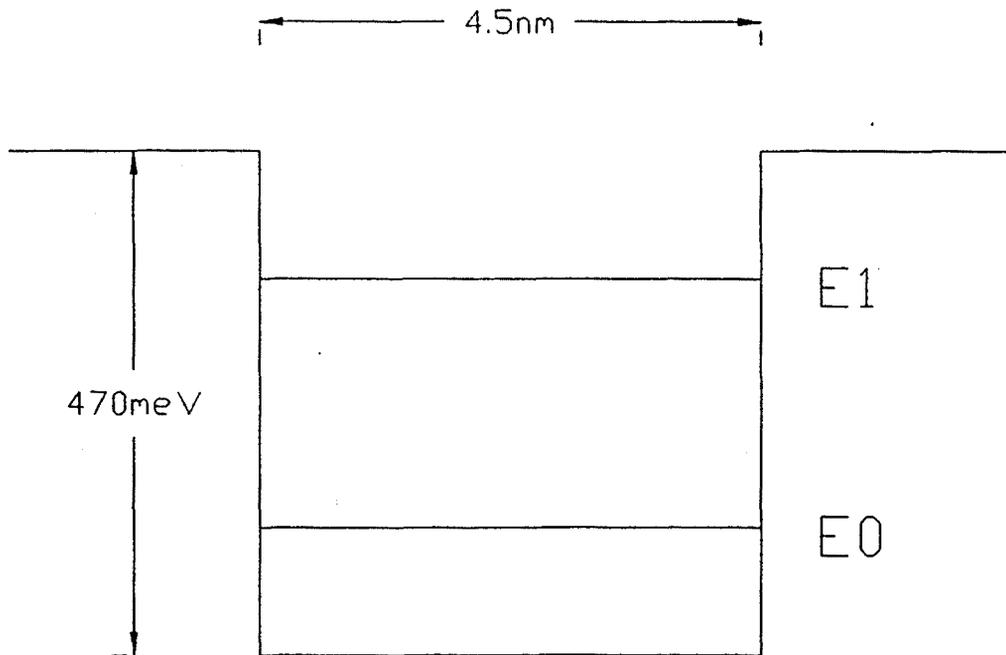


Figura 8. Diagrama de energías correspondiente a la heteroestructura $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}-\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}-\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ con anchura=4.5nm.

Las masas efectivas en $k=0$, para estos semiconductores son :

- 1) Para el $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$: $m_e=0.04112$
- 2) Para el $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$: $m_e=0.084$

Los dos modelos dan el mismo número de niveles ligados, pero la energía de estos es distinta. La diferencia no es muy grande para el primer nivel E_0 pero si para el segundo E_1 . En principio cuanto mayor sea la masa de la partícula menor será la energía del nivel que originará, esto se ve claramente en el caso de E_1 (en el modelo de Kane la masa es mayor que en el de Ben Daniel-Duke para energías mayores que 0, caso que ocurre en el pozo), sin embargo, parece que ocurra lo contrario para E_0 , donde el modelo de Kane da una energía superior al de Ben Daniel-Duke a pesar de que la partícula en el pozo tiene mayor masa efectiva. Este hecho se debe a que para esta energía la partícula, cuando se encuentra en la barrera, está dentro de la banda prohibida (en un estado evanescente) y muy alejada del mínimo de la banda de conducción, lo que implica que aquí su masa efectiva es muy pequeña, esta contribución hace que en total la energía del nivel E_0 sea, en este caso, superior según el modelo de Kane.

III.2f-LIMITACIONES DEL MODELO

Toda resolución de un problema conlleva ciertas hipótesis y aproximaciones que limitan su rango de aplicación. Durante la resolución del problema de los niveles creados en la heteroestructura hemos realizado varias aproximaciones, de las cuales vamos a intentar averiguar las limitaciones.

Una de las más importantes es la restricción de las bandas en las que consideramos el acoplamiento, hemos calculado este efecto con las bandas $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$, puesto que desconocemos los parámetros de las bandas más alejadas para poder calcular su contribución. Esta aproximación no introduce gran información física en el resultado cualitativo de las bandas $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$ (salvo para las partículas pesadas puesto que no tienen otra interacción) entorno a $k \sim 0$, pero sí que hace variar el comportamiento de estas bandas para valores del vector de onda k superiores. Hasta donde será válida la solución obtenida mediante el modelo de Kane en nuestro sistema, depende de la separación entre $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$, y entre estas y el resto de bandas más alejadas. En principio cuanto más cerca esten entre si $\Gamma_6, \Gamma_7, \Gamma_8$, es decir cuanto menor sea ϵ_0 , mayor será el acoplamiento entre ellas, y cuanto más alejadas se encuentren del resto de bandas menor será la influencia que estas últimas efectuarán sobre las que nos interesan. Cuanto más se cumplan estos dos requisitos tanto más extenso será el rango de validez de la solución obtenida con este modelo. Si, por ejemplo, tomamos la relación de dispersión calculada para Γ_6 (BC) vemos que $\epsilon(k)$ es creciente con k , llegará un momento que a partir de un valor del vector de onda k la energía $\epsilon(k)$ no será despreciable respecto a la energía que separa Γ_6 de las bandas superiores, y la interacción con estas bandas habrá de ser tomada en consideración. Para saber el rango de validez del modelo lo que se suele hacer es comparar con resultados obtenidos mediante otras técnicas más precisas que tengan en cuenta la estructura de bandas al completo. Por ejemplo con cálculos de tight-binding, donde se construye la estructura de bandas del cristal a partir de las propiedades atómicas de los átomos que lo constituyen, la validez del cual se extiende a toda la zona de Brillouin [21]. En la (figura 9) podemos ver los resultados de este tipo de cálculo comparado con los resultados del modelo de Kane para dos materiales semiconductores III-V, el GaAs y el AlAs [21].

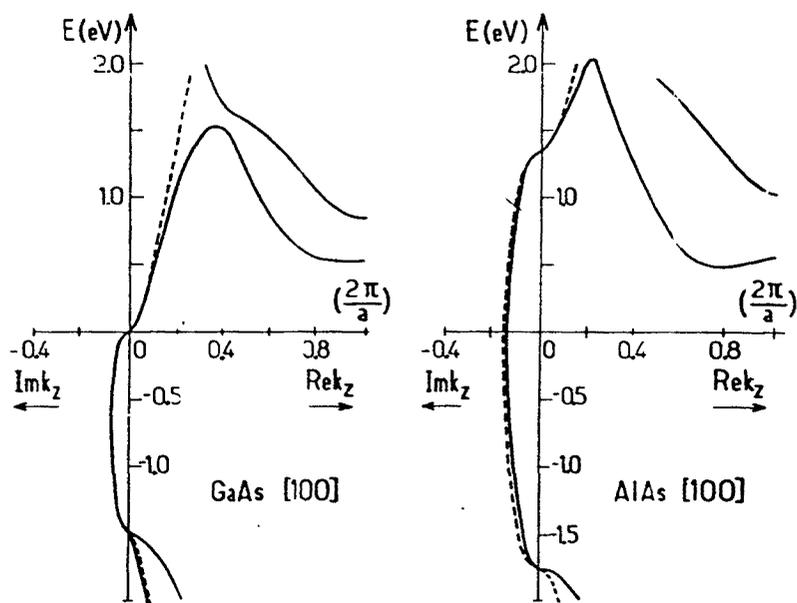


Figura 9. Estructuras de bandas de GaAs y AlAs calculadas según el modelo de tight-binding y según el modelo de Kane.

Como podemos ver en estas figuras la zona correspondiente a valores imaginarios del vector de onda k (banda prohibida) prácticamente son idénticos en los dos tipos de cálculos. También, en el caso del GaAs, coinciden hasta energías de la banda de conducción del orden de 0.3eV. Lo cual es muy interesante para el cálculo de heteroestructuras, puesto que en las aplicaciones prácticas (lasers de pozo cuántico, HEMT, etc.) son los niveles bajos los que tienen mayor importancia. Para estos dos materiales, como podemos observar en la (fig.9), el modelo de Kane se considera válido para valores de k del orden de hasta $1/10$ de la zona de Brillouin. El hecho de que los semiconductores con que se construyen nuestras heteroestructuras, $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ e $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$, tengan características muy similares a estos nos incita a tomar este mismo rango de validez para las soluciones obtenidas en estos semiconductores.

Para el caso de los huecos ligeros es más problemático, puesto que en los cálculos realizados la masa aumenta muy rápidamente con la energía. Haciendo mayor que la de los pesados, a tan sólo unas decenas de meV del máximo de la banda de valencia. Y tiende a infinito muy rápidamente, que evidentemente no se ajusta a la realidad. Por esta razón, en los cálculos donde entran en juegos partículas de este tipo, hemos preferido utilizar la masa de los huecos

ligeros cte, e igual a la que tienen en el máximo de la banda de valencia. En cualquier caso, intentaremos trabajar siempre que podamos con transiciones entre banda de conducción y huecos pesados, puesto que en este caso hay menos fuentes de error.

Cuando estamos tratando con heteroestructuras, en las que una de las capas está deformada (debido a diferencia de parámetros de red entre los semiconductores), los cálculos no dan resultados satisfactorios. En la figura 10(a y b) [22] mostramos la variación del nivel de energía creado en un pozo de $\text{InP}/(\text{InAs})_n/\text{InP}(001)$ con la anchura del pozo [22], mediante la aproximación de bandas parabólicas, el modelo de Kane, y cálculos de tight-binding. La figura 10a corresponde al caso en que no hay deformaciones, y la 10b corresponde al caso donde hay deformaciones. Como podemos ver en ellas cuando no hay deformación, el modelo de Kane da resultados coincidentes con los de tight-binding, mientras que cuando hay deformación los dos cálculos no coinciden. Esto provocará errores al intentar deducir cualquier parámetro de los pozos a partir de la energía de los niveles. Por ejemplo, en la figura 11 [22] hay una representación del error cometido al calcular la anchura de un pozo con los diferentes modelos presentados, comparados con los calculados mediante tight-binding. Se puede ver que sólo en el caso de pozos no deformados, el modelo de Kane es válido. La diferencia residual entre el modelo de Kane y los cálculos de tight-binding, es debida a las condiciones de contorno utilizadas en el cálculo de masas efectivas [23].

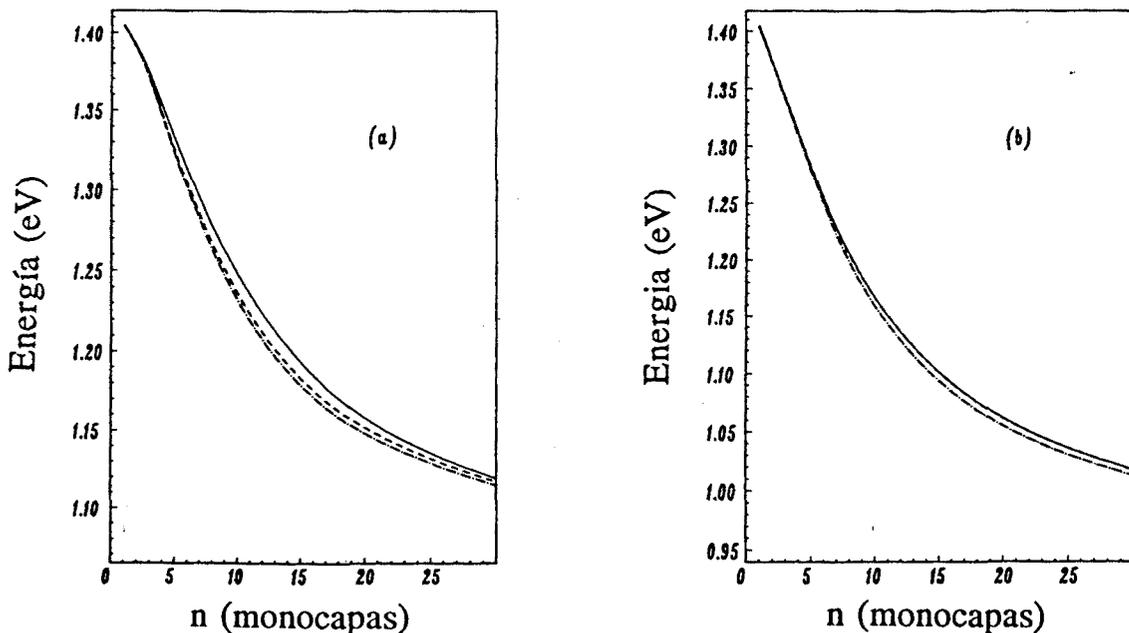


Figura 10. Variación del nivel de energía creado en un pozo de $\text{InP}/(\text{InAs})_n/\text{InP}(001)$ en función de la anchura del pozo según los modelos de bandas parabólicas, Kane, y tight-binding. (a) Ausencia de deformaciones. (b) Presencia de deformaciones.

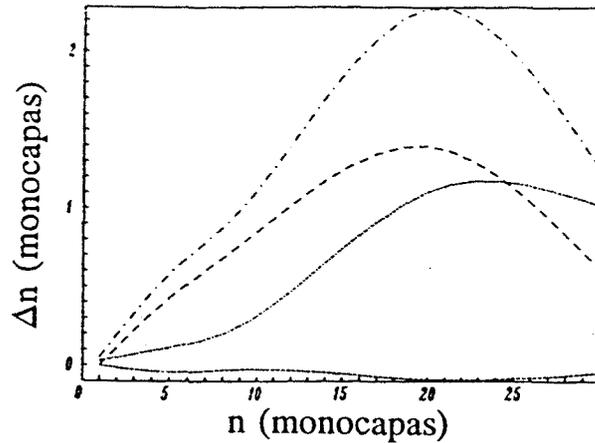


Figura 11. Error en el cálculo de la anchura de un pozo cuántico según los modelos de bandas parabólicas y Kane al comparar con el modelo de tight-binding.

Otra de las hipótesis realizadas durante la resolución del problema de los estados propios de la función envolvente es la suposición de que las funciones atómicas de Bloch en los dos semiconductores que forman la heteroestructura son iguales en los puntos extremales Γ_6, Γ_7 y Γ_8 . Esta hipótesis se basa en que el valor de P (elemento de matriz entre bandas para el operador velocidad) es casi igual para muchos semiconductores de los utilizados en este ámbito, en la tabla IV tenemos los valores de este parámetro, o lo que es lo mismo $E=2m_0P^2$ para un grupo de semiconductores III-V.

	InP	InAs	InSb	GaAs	GaSb
ϵ_0 (eV)	1.4236	0.418	0.2352	1.5192	0.811
Δ (eV)	0.108	0.38	0.81	0.341	0.752
m_{Γ_6}/m_0	0.079	0.023	0.0139	0.0665	0.0405
E_p (eV)	17	21.11	22.49	22.71	22.88

Tabla IV. Valores del parámetro P para distintos semiconductores III-V

III.3-INTRODUCCION DE LAS MEDIDAS EXPERIMENTALES

Como hemos mencionado con anterioridad, uno de los parámetros fundamentales de una heteroestructura es el band offset. Se han utilizado varias técnicas para determinar los band offsets (de conducción y valencia) en los pozos cuánticos, entre ellas la medida de capacidad-tensión (C-V) en heterouniones simples [24,25], características corriente-tensión (I-V) en condensadores con estructura semiconductor/aislante/semiconductor (SIS) [26], espectroscopía de admitancia en MQW [27,28], fotoluminiscencia en SQW [29], o espectroscopía de fotoemisión (XPS) [30,31]. Recientemente, Letartre et al. [32] han usado la espectroscopía de niveles profundos (DLTS) para analizar la dinámica de emisión en SQW y determinar el band offset de conducción. Los mismo autores [33] han realizado un cálculo analítico de la capacidad en función de la tensión de un SQW situado en una unión. Este análisis permite obtener el band offset entre bandas de conducción, pero no da ninguna información sobre la cinética de los portadores en el pozo cuántico. Este mismo problema tiene la espectroscopía de admitancia utilizada en [27,28], además de que es una técnica muy sensible a corrientes parásitas y resistencias en serie debidas a los contactos. Por otro lado las medidas de (I-V) tienen el problema de que se necesitan las muestras adecuadas (SIS) para realizarlas. En cuanto a las medidas de fotoluminiscencia (PL) tienen los problemas típicos de esta técnica, algunos de los cuales ya conocemos del capítulo anterior, como son el hecho de que es muy sensible a los niveles creados por defectos e impurezas, el corrimiento de Stokes o que sólo podemos ver la transición de menor energía, generalmente entre el primer nivel creado en la BC y el primero de la BV y como veremos después esta información es insuficiente para tener unos resultados fiables. El problema de las técnicas de fotoemisión (XPS), reside en su resolución puesto que trabajan con energías muy grandes, del orden de KeV, respecto a las que hay que determinar que suelen ser del orden de centenas de meV. La única técnica, de las mencionadas anteriormente, que nos da información tanto del band offset como de la cinética de los portadores en el pozo, es la DLTS, su único problema es que se trabaja fuera del equilibrio.

En el presente capítulo se llevan a cabo dos tipos básicos de medidas; por una parte hemos realizados medidas ópticas tanto de fotoluminiscencia (PL) como de absorción óptica (AO) y de fotoexcitación de la luminiscencia (PLE); por otra parte se han realizado medidas de

admitancia. Para las primeras hemos utilizado como muestras pozos cuánticos simples (SQW) y múltiples (MQW), mientras que para las medidas eléctricas sólo hemos utilizado SQW.

Las medidas ópticas las hemos ajustado mediante cálculos teóricos donde hemos tenido en cuenta la no parabolicidad de las bandas descrita en el apartado anterior, así como las reglas de selección de las transiciones entre niveles, las cuales deduciremos después. Como hemos dicho antes la PL no es una técnica muy fina para la determinación del band offset, sin embargo, es una medida previa a cualquier medida de PLE, puesto que para realizar estas últimas hemos de centrar el monocromador de análisis (ver capítulo I) en un centro de recombinación radiativa de la muestra, y estos los encontraremos mediante la PL. Es en este punto donde uno de los puntos, de los que en principio es un problema, de la PL permiten que la PLE pueda analizar todas las transiciones ópticas posibles entre los niveles de los pozos, puesto que si centramos el monocromador de análisis en una longitud de onda λ_0 correspondiente a la radiación entre un defecto y un nivel del pozo, esta λ_0 nunca coincidirá con la radiación de excitación. Si por el contrario tuviésemos que centrar la λ_0 en el pico correspondiente a la transición entre los dos primeros niveles de cada pozo (conducción y valencia), el análisis de la PLE no podría llegar hasta este punto puesto que se saturaría el detector. Como comprobaremos en las medidas, ni la PLE ni la AO presentan los problemas de la PL, además nos permiten ver más transiciones, lo cual que podamos hacer un análisis mucho más preciso para determinar el band offset. Estas técnicas, sin embargo, no nos proporcionan información sobre la cinética de los portadores de los niveles creados en los pozos.

En el análisis de admitancia además de tener en cuenta la no parabolicidad de las bandas de conducción, se ha considerado la dinámica de los portadores en los niveles energéticos del pozo. Además, se han realizado los cálculos analíticos tanto para la capacitancia como para la conductancia en función de la tensión de polarización y la frecuencia, y han sido utilizados para ajustar las medidas de admitancia del SQW. Como resultado hemos obtenido tanto el band offset entre bandas de conducción, como los coeficientes de captura de los portadores en el pozo. En el análisis de admitancia realizado aquí, a diferencia del referenciado en [27,28], nos encontramos en condiciones de equilibrio puesto que trabajamos a temperatura constante. Además, nosotros realizamos las medidas de conductancia y capacitancia variando

la tensión de polarización de la estructura, manteniendo la frecuencia de la pequeña señal de medida constante. Mientras que en las otras se mantiene constante la tensión de polarización y se varía la frecuencia de la señal de medida.

Para ver las posibilidades de las diferentes técnicas es interesante dar un vistazo a la estructura de niveles energéticos que se origina al crear un pozo cuántico, tal estructura será similar a la representada en la figura 12.

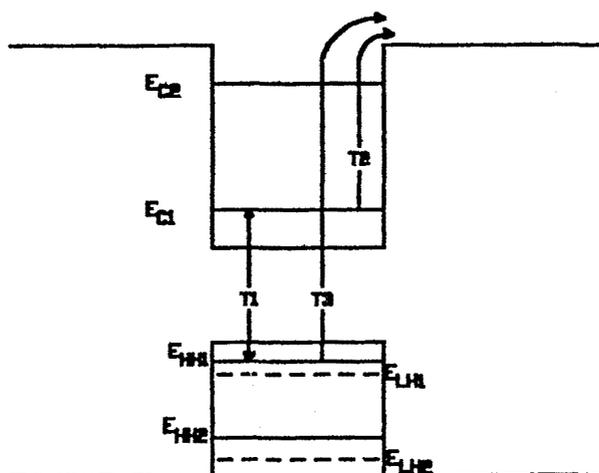


Figura 12. Transiciones posibles en un pozo cuántico de tipo I.

En este diagrama hemos representado los tres tipos de transiciones en las que intervienen los niveles creados en los pozos. Todas las técnicas descritas anteriormente trabajan utilizando alguna de estas transiciones, y en particular con las que hemos trabajado nosotros. Así, las transiciones T_1 entre niveles del pozo conducción y niveles del pozo de valencia, que pueden ser debidas tanto a la recombinación de un electrón con un hueco como a la creación de dicha pareja, se miden mediante técnicas ópticas PL, PLE o AO. Hemos de tener en cuenta que las energías obtenidas no son directamente la diferencia entre los dos niveles, sino que generalmente hay que considerar la energía de ligadura del excitón, lo cual puede representar un problema puesto que dicha energía, la mayoría de veces, nos será desconocida, y en los

pozos cuánticos puede ser bastante más grande que en los semiconductores de volumen. En cuanto a las transiciones T_2 y T_3 , en principio también pueden medirse por técnicas ópticas, esto sólo dependerá de la diferencia energética entre el nivel del pozo y la banda de la barrera entre las que se realizan las transiciones. En el caso de nuestras muestras de pozos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ entre barreras de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, las transiciones del tipo T_3 tienen energías del mismo orden que las T_1 y en principio pueden ser medidas de la misma forma, sólo dependerá de la probabilidad de dichas transiciones, sin embargo, las transiciones T_2 tienen una energía mucho menor y su detección óptica es mucho más problemática, no obstante hemos intentado medirla mediante AO. La gran ventaja de analizar este tipo de transiciones es que en ellas sólo toma partido una clase de portadores y por lo tanto no entra en juego la energía del excitón. Precisamente son las transiciones del tipo T_2 las que se miden mediante la espectroscopía de admitancia, por lo que desde este punto de vista aparece como una técnica bastante interesante.

No obstante, no debemos olvidar que siempre estamos trabajando con diferencias energéticas entre niveles, o entre un nivel y una banda de la barrera, y que el band offset está definido como la diferencia energética entre las dos bandas de conducción (o valencia). Por esta razón, sea cual sea la técnica utilizada, siempre tendremos que utilizar la teoría analizada en el primer apartado de este capítulo para calcular las posiciones de dichos niveles. Veamos a continuación, primero las muestras que hemos utilizado para realizar este estudio, y después el procedimiento que hemos seguido para realizar las medidas así como los ajustes.

III-4.MUESTRAS

Las muestras utilizadas en el presente capítulo son pozos cuánticos simples (SQW) y múltiples (MQW), en los cuales las barreras están formadas por $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ y los pozos por $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crecidos mediante MBE sobre un sustrato de InP dopado n^+ . Primero se creció una capa, de $1\mu\text{m}$ de espesor, de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, cuyo parámetro de malla coincide con el del sustrato, y después se creció una capa de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ que forma el pozo. Se han realizado muestras con dos fracciones molares de In distintas, con $x=0.53$ (caso en el que coinciden los parámetros de malla del pozo y la barrera) y $x=0.60$ (caso en el que no coinciden, y por lo tanto hay deformaciones). Además hay muestras de distintas anchuras de pozo, 4.4nm ,

5.0nm y 25nm. En el caso de los MQW esta etapa se realizo 25 veces para obtener 25 pozos cuánticos de las mismas características sobre la misma muestra. A continuación, tanto en los SQW como en los SQW se creció otra capa, de $0.35\mu\text{m}$ de espesor, de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, que forma la otra barrera de confinamiento del pozo.

En el caso de las muestras en las que no se realizaron contactos para poder hacer medidas eléctricas, se creció una última capa de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ para proteger la estructura activa de la muestra de posibles oxidaciones. En la figura 13 se muestra la estructura tanto de los SQW (a) como de los MQW (b), y en la tabla V se ha realizado un resumen de las principales características de las muestras utilizadas en las medidas ópticas. No hay que olvidar que estos datos nos los proporciona el tecnólogo, y por lo tanto no suelen ser producto de mediciones, sino el resultado de cálculos realizados a partir de las condiciones de trabajo durante el crecimiento de las muestras. Por esta razón, cuando realicemos las medidas experimentales algunos de estos parámetros pueden variar.

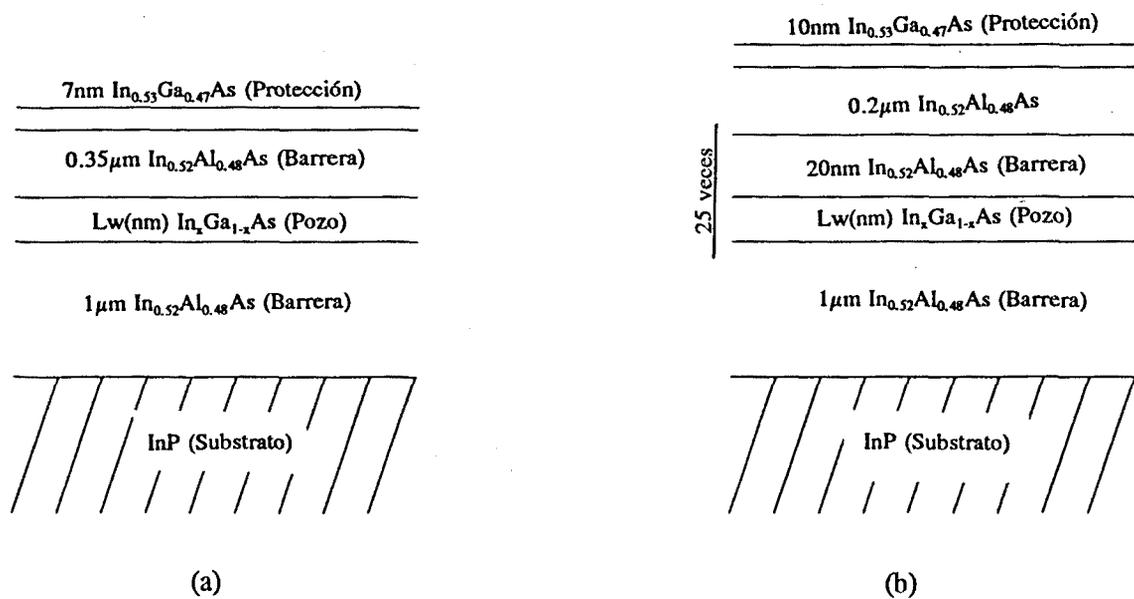


Figura 13. Estructura de niveles de (a) SQW; (b) MQW.

Muestra	x (In)	Grosor (nm)	Tipo	Tg (°C)
MBE 689	0.53	25	SQW	500
MBE 690	0.53	5.0	SQW	500
MBE 774	0.60	4.4	MQW	500
MBE 775	0.53	5.0	MQW	500
MBE 797	0.60	5.0	SQW	

Tabla V. Características principales de las muestras utilizadas en las medidas ópticas

Las muestras en las que se han realizado medidas eléctricas tienen algunas características diferentes respecto a las descritas anteriormente. En primer lugar las capas de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, forman las barreras, fueron dopadas intencionadamente con una concentración N_D del orden de $2.5 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. En segundo lugar, se les realizó un contacto Schottky mediante la deposición de una capa de Ti de 10nm de espesor a través de una máscara fotolitográfica de $500\mu\text{m}$ de diámetro, y la posterior deposición de otra capa de 40nm Ti/100nm Au a través de una máscara de $100\mu\text{m}$ de diámetro. Finalmente, se creció un contacto ohmico en la parte trasera del sustrato de InP, mediante una metalización a base de AuGe/Ni/Au. En la tabla VI están resumidas sus características principales.

MUESTRA	x (In)	Grosor (nm)	Tipo	Tg (°C)
MBE 801	0.53	5.0	SQW	
MBE 795	0.53	25	SQW	
MBE 797	0.60	5.0	SQW	
MBE 800	0.60	25	SQW	

Tabla VI. Características principales de las muestras utilizadas en las medidas eléctricas.

MEDIDAS OPTICAS

III.5-CONSIDERACIONES SOBRE LA FORMA DE LOS ESPECTROS

Básicamente la forma de los espectros, viene gobernada por la densidad de estados, y los efectos del excitón. Y serán estos dos factores los que diferenciarán la forma de los espectros entre pozos cuánticos y materiales volúmicos.

La densidad de estados en un sistema bidimensional, en la aproximación de bandas parabólicas, viene dada por [34] :

$$\rho_{2D}(E_n) = n \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \quad (32)$$

Como podemos ver en la figura 14, la densidad de estados presenta discontinuidades para cada E_n , a diferencia de la densidad de estados de los materiales volúmicos. De la comparación de las dos podemos ver que :

- 1- En los sistemas bidimensionales la densidad de estados siempre es finita, mientras que para los materiales volúmicos tiende a cero con la energía.
- 2- Cuando observamos una transición en la que intervienen valores grande de n , como puede ocurrir en pozos anchos, el sistema bidimensional se acerca al volúmico.

Por otra parte, tendremos un desplazamiento hacia el azul (energías mayores), en los pozos cuánticos respecto al material volúmico, debido a que la transición de mínima energía no será el gap del material, sino éste más la energía del primer nivel creado en la banda de conducción y en la de valencia, es lo que se llama efecto de confinamiento cuántico.

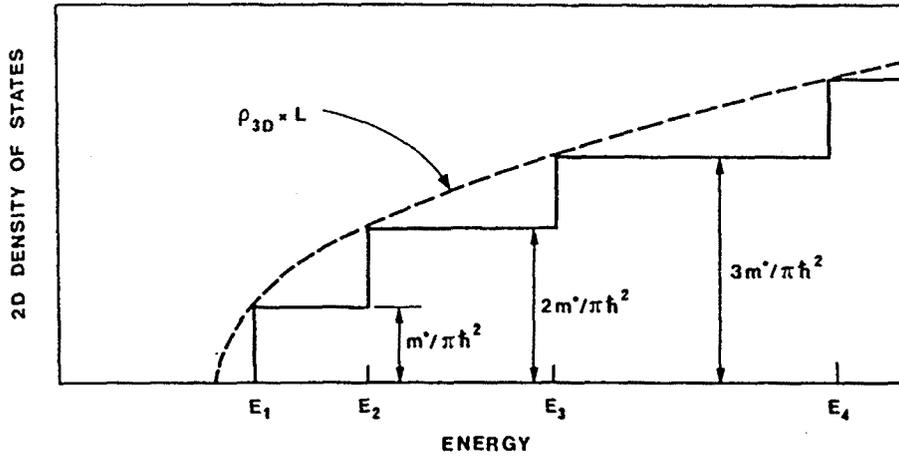


Figura 14. Densidad de estados en un sistema bidimensional.

Al igual que en los semiconductores volúmicos, los espectros de AO no están determinados sólo por la creación de un electrón libre con hueco libre. Al igual que ocurría en las capas epitaxiales, el electrón y el hueco están correlacionados en su movimiento de una forma, que se puede describir como una simple atracción coulombiana entre ellos. Esta atracción da lugar a estados ligados, de los cuales el de menor energía está a una distancia energética igual a [34]:

$$R_y^* = \frac{2m_{red}e^4}{\hbar^2(8\pi\epsilon)^2} = \frac{m_{red}}{m_0} \frac{1}{\epsilon_r^2} R_y \quad (33)$$

y el electrón y el hueco están ligados con un radio de Bohr efectivo, igual a [34]:

$$a_B^* = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{\mu e^2} = \epsilon_r \frac{m_0}{\mu} a_B \quad (34)$$

Siendo $R_y = 13.6\text{eV}$ (energía de Rydberg) y $a_B = 0.529\text{\AA}$ la energía y radio del átomo de hidrógeno, ϵ_r la permitividad relativa del semiconductor y μ la masa reducida del par electrón-hueco.

Para un radio a_B^* del orden de 100\AA , es fácil imaginar que tanto la función de onda como

los niveles de energía del excitón, se verán modificados en los pozos cuánticos, cuya anchura es normalmente menor al diámetro del excitón $2a_B^*$.

En el caso límite de bidimensionalidad pura, $L \ll a_B^*$, se obtiene que la energía de Rydberg bidimensional $R_{2D} = 4R_{3D}$, para un pozo infinito [35]. Para pozos finitos, se calcula la energía de ligadura del excitón utilizando métodos variacionales, siendo siempre menor que la del pozo infinito y mayor que R_{3D} . En la figura 15 representamos el resultado para dos alturas de barrera, junto con un pozo infinito [36].

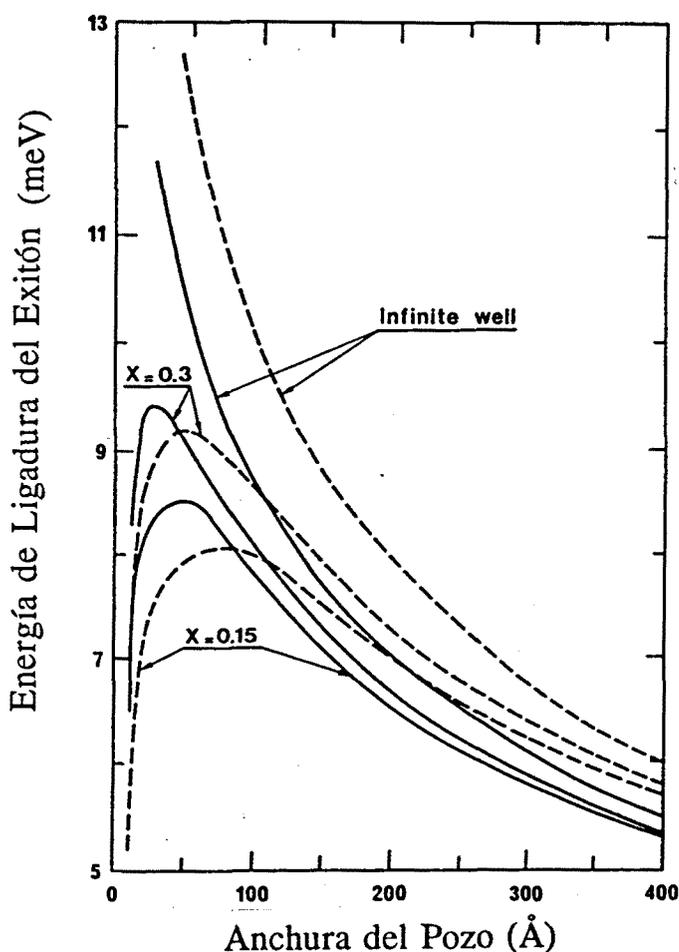


Figura 15. Energía de ligadura del excitón para pozos cuánticos finitos en función del grosor del pozo.

El resultado final es que la energía de ligadura del excitón, en el caso bidimensional, es mayor, y por lo tanto está más separado del continuo. Esto hace que incluso a temperatura ambiente se vea el picó del excitón. En la figura 16 mostramos dos espectros de absorción, uno de GaAs volúmico y el otro de una estructura MQW, con pozos de 100Å de anchura del

mismo material [37]. En ella podemos comprobar tanto el corrimiento a energías superiores del espectro debido a los pozos, como la estructura de escalones debida a la densidad de estados. Además se ve un claro incremento de la intensidad del pico del excitón.

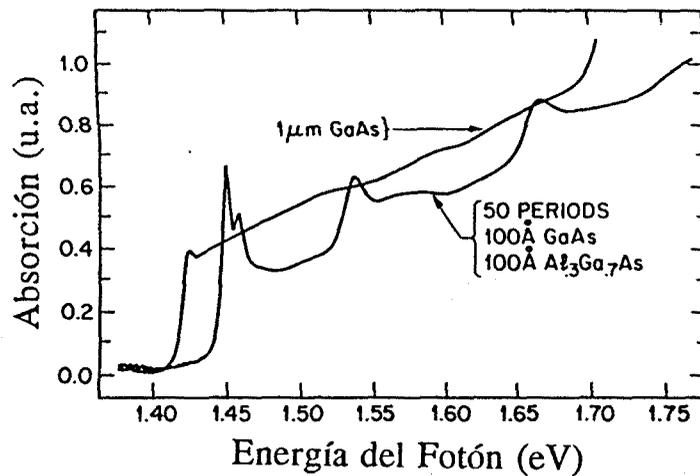


Figura 16. Espectros de absorción de GaAs volúmico y de un MQW (anchura del pozo 10nm) del mismo material.

III.5a-REGLAS DE SELECCION

Tanto en los SQW como en los MQW tenemos dos pozos cuánticos, uno formado en la banda de conducción y otro en la de valencia, en los cuales se forman una serie de estados ligados, y entre los cuales pueden haber transiciones. Existen una serie de reglas que han de cumplir las partículas que pueblan dichos estados, para que sea posible el paso de una partícula de uno de los niveles a otro. Estas son las reglas de selección, y vienen determinadas por las funciones de onda del estado inicial y final.

Consideremos el coeficiente de absorción $\alpha(h\nu)$, el cual podemos expresar como :

$$\alpha(h\nu) = A \sum_{i,j} P_{if} n_i n_f \quad (35)$$

Siendo :

P_{if} : la probabilidad de transición de un electrón desde el estado "i" al "f".

n_i : la densidad de electrones en el estado "i".

n_f : la densidad de estados finales disponibles.

La probabilidad de transición P_{if} , cuando sometemos el semiconductor a un campo electromagnético, viene dada por la regla de oro de Fermi [38] que, junto con la aproximación del dipolo eléctrico para el potencial de interacción, nos permite expresarla como [39] :

$$P_{if} = A \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | \epsilon p | i \rangle|^2 \delta [e_f - e_i - \hbar\omega] f(e_i) [1 - f(e_f)] \quad (36)$$

donde ϵ es el vector de polarización, ω la frecuencia angular de la onda electromagnética, p el momento del electrón, y $f(e_j)$ el factor de ocupación del nivel "j".

A partir de estas dos últimas expresiones, obtenemos la siguiente relación para $\alpha(\omega)$:

$$\alpha(\omega) = A^* \sum_{if} \frac{1}{m_0} |\epsilon p_{if}|^2 \delta [e_f - e_i - \hbar\omega] [f(e_i) - f(e_f)] \quad (37)$$

siendo : $p_{if} = \langle i | p | f \rangle$.

Para poder explotar esta expresión del coeficiente de absorción, necesitamos un modelo de las funciones de onda. Tomemos el de la función envolvente utilizado en el cálculo de niveles, que hemos realizado al principio de este capítulo. Según este modelo podemos escribir la función de onda de un estado $|i\rangle$ de la forma :

$$F(r) = u_{v_i}(r) f_i(r) \quad (38)$$

$$f_i(r) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(ik_x r_x) X_i(z)$$

de esta forma los elementos de matriz $\epsilon \cdot p_{if}$ quedan :

$$\epsilon p_{if} = \epsilon \int_{\Omega} F_i^*(r) p F_f(r) d^3r \quad (39)$$

y puesto que las funciones u_{vi} y u_{vf} , varían rápidamente respecto a $X_i(z)$ y $X_f(z)$ obtenemos:

$$\epsilon p_{if} = \epsilon \langle u_{vi} | p | u_{vf} \rangle \int_{\Omega} f_i^* f_f d^3r \delta_{if} \epsilon \int_{\Omega} f_i^* p f_f d^3r \quad (40)$$

donde: $\langle u_{vi} | p | u_{vf} \rangle = \int_{\Omega_0} u_{vi}^*(r) p u_{vf}(r) d^3r$

A partir de estas expresiones podemos deducir las reglas de selección . Puesto que las transiciones que mediremos se realizan entre bandas distintas, nos ocuparemos solamente de este problema, dejando de lado las transiciones que se realizan dentro de una banda. Las reglas de selección tienen dos orígenes :

- 1- El elemento de matriz del dipolo atómico $\langle u_{vi} | p | u_{vf} \rangle$ da lugar a reglas de selección sobre la polarización de la onda electromagnética.
- 2- La integral de solapamiento entre las funciones envolvente seleccionan los números cuánticos de las subbandas inicial y final.

Las reglas de selección sobre la polarización de la onda, están resumidas en la tabla VII [40].

Polarization	ε_x	ε_y	ε_z	Type of transitions
Propagation parallel to \hat{z}	$\frac{\Pi}{\sqrt{2}}$	$\frac{\Pi}{\sqrt{2}}$	impossible	$HH_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{x}	impossible	$\frac{\Pi}{\sqrt{2}}$	forbidden	$HH_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{y}	$\frac{\Pi}{\sqrt{2}}$	impossible	forbidden	$HH_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{z}	$\frac{\Pi}{\sqrt{6}}$	$\frac{\Pi}{\sqrt{6}}$	impossible	$LH_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{x}	impossible	$\frac{\Pi}{\sqrt{6}}$	$\frac{2\Pi}{\sqrt{6}}$	$LH_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{y}	$\frac{\Pi}{\sqrt{6}}$	impossible	$\frac{2\Pi}{\sqrt{6}}$	$LH_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{z}	$\frac{\Pi}{\sqrt{3}}$	$\frac{\Pi}{\sqrt{3}}$	impossible	$(\Gamma_7)_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{x}	impossible	$\frac{\Pi}{\sqrt{3}}$	$\frac{\Pi}{\sqrt{3}}$	$(\Gamma_7)_n \rightarrow E_m$
Propagation parallel to \hat{y}	$\frac{\Pi}{\sqrt{3}}$	impossible	$\frac{\Pi}{\sqrt{3}}$	$(\Gamma_7)_n \rightarrow E_m$

Tabla VII. Reglas de selección de transiciones entre subbandas

De ella podemos sacar dos conclusiones :

1- Las transiciones entre huecos pesados y electrones, son tres veces más intensas que entre huecos ligeros y electrones. Mientras que las spín-orbita y electrones tienen una intensidad intermedia.

2- Para propagaciones de la onda perpendicularmente a la capa que forma el pozo, correspondiente a campos eléctricos paralelos a la dicha capa, son posibles los tres tipos de transiciones. Por otra parte para la propagación paralela a la capa, las transiciones en las que intervienen huecos pesados están prohibidas. Esto es importante en cierto tipo de dispositivos, como pueden ser los láseres realizados con esta tecnología.

Para averiguar las reglas de selección sobre los números cuánticos hemos de analizar la expresión que obtenemos para $\langle f_i | f_f \rangle$:

$$\langle f_i | f_f \rangle = \langle X_n^{(h)} | X_m^{(e)} \rangle \langle k_1 | k_1' \rangle = \int dz X_n^{*(h)}(z) X_m^{(e)}(z) \frac{1}{S} \int d^2 r_1 \exp [i (k_1' - k_1) r_1] \quad (41)$$

De esta expresión, la primera regla de selección que podemos deducir es la conservación del vector de onda en el plano de las capas :

$$k_1' - k_1 = 0 \quad (42)$$

que es debida a la invariancia traslacional del hamiltoniano de la heteroestructura en el plano de dichas capas.

La evaluación de las reglas de selección de los índices de las subbandas se obtiene al calcular la integral de solapamiento $\langle X_n^{(h)} | X_m^{(e)} \rangle$. En los pozos de tipo I, que son los que nos interesan, los electrones de conducción y valencia están confinados esencialmente en la misma capa. Si además el pozo es simétrico, las funciones envolvente tienen una paridad definida respecto al centro del pozo. Así, la integral de solapamiento sólo es distinta de cero si $n+m$ es par. Y si los pozos creados son rectangulares e infinitos, sólo son posibles transiciones en las que se cumpla la condición $n=m$. De hecho para pozos finitos las transiciones donde $n=m$ son mucho más intensas que las otras. Por ejemplo, en pozos

cuánticos rectangulares creados mediante capas de GaAs-Ga(Al)As, sólo se ha logrado medir la transición HH_3-E_1 , aparte de aquellas en $n=m$, mediante AO y PLE [41,42].

Con estas consideraciones sobre la forma de los espectros de AO (PLE), junto con las reglas de selección, y el cálculo de niveles creados en los pozos, estamos en disposición de identificar las transiciones medidas experimentalmente.

III.5b-CALCULO DE TRANSICIONES EN SQW Y MQW

En la primera parte de este capítulo hemos obtenido expresiones que nos permiten calcular los niveles energéticos (o el band-offset), creados en los pozos formados por heteroestructuras. Sin embargo, lo que nosotros observamos, en los espectros medidos, son energías de transiciones entre niveles pertenecientes al pozo creado en la banda de conducción, y al creado en la banda de valencia. Como podemos ver en la figura 17, esta energía será la suma de la energía de los dos niveles, entre los que se produce la transición, más la energía del gap del semiconductor que forma la capa del pozo, menos la energía de ligadura del excitón.

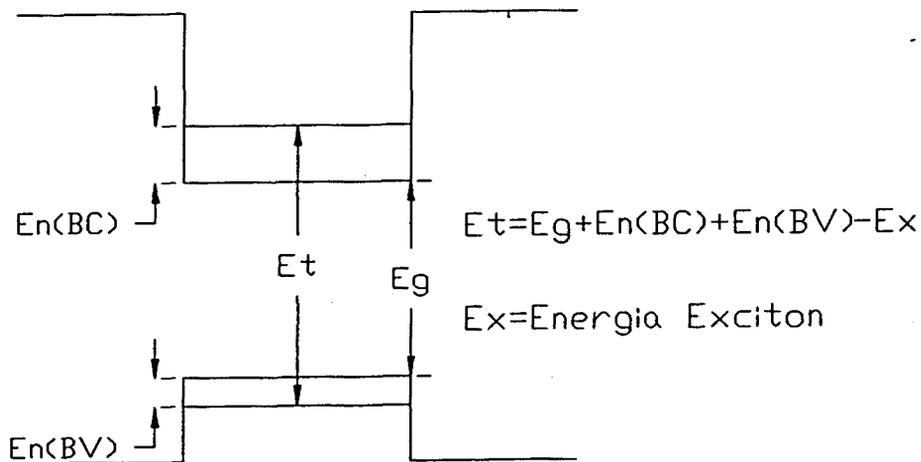


Figura 17. Energía correspondiente a las transiciones entre niveles del pozo de banda de conducción y el pozo de banda de valencia.

El procedimiento que hemos seguido para realizar un cálculo que nos permita identificar las transiciones medidas, consiste en generar gráficas en las que representamos la energía de las posibles transiciones (teniendo en cuenta las reglas de selección), en función del band-offset de conducción. En estas gráficas hacemos variar el band-offset de conducción, y calculamos el de valencia a partir del anterior y los valores del gap de los semiconductores que forman el pozo y la barrera. Con los valores de los band-offset calculamos las energías de los niveles creados en los dos pozos y, a partir de éstas, las energías de las transiciones.

Para realizar los cálculos utilizamos como datos las masas efectivas para $k=0$, de las bandas que intervienen en las transiciones, la energía del gap de los materiales que forman la barrera y el pozo, y la anchura del pozo. Aunque este último lo utilizaremos como parámetro de ajuste.

Por otra parte, al realizar los cálculos surgen algunos problemas de difícil resolución. Así, al calcular la variación de la masa efectiva de los huecos ligeros con la energía, siguiendo el modelo de Kane, ésta crece muy rápidamente. Para energías inferiores a 50meV, respecto al máximo de la banda de valencia, la masa efectiva supera el valor de la de los huecos pesados, y enseguida se hace prácticamente infinita. Evidentemente, este cálculo no describe correctamente el comportamiento de la masa efectiva de los huecos ligeros. Para evitar este problema hemos supuesto que la masa efectiva de estas partículas se mantiene constante, hipótesis que introduce un error en los resultados, pero nos permite realizar los cálculos. Este error será menor, cuanto menor sea la energía del nivel en que se encuentra la partícula en el pozo de valencia, y ésta será menor cuanto menor sea la profundidad de éste, es decir el band-offset de valencia.

En la figura 18 presentamos los resultados para un SQW (o MQW) formado por $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ e $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ a una temperatura de 15K. Los datos que hemos utilizado en la realización de dichos cálculos se presentan en la tabla VIII, junto con una anchura de pozo de 4.7nm.

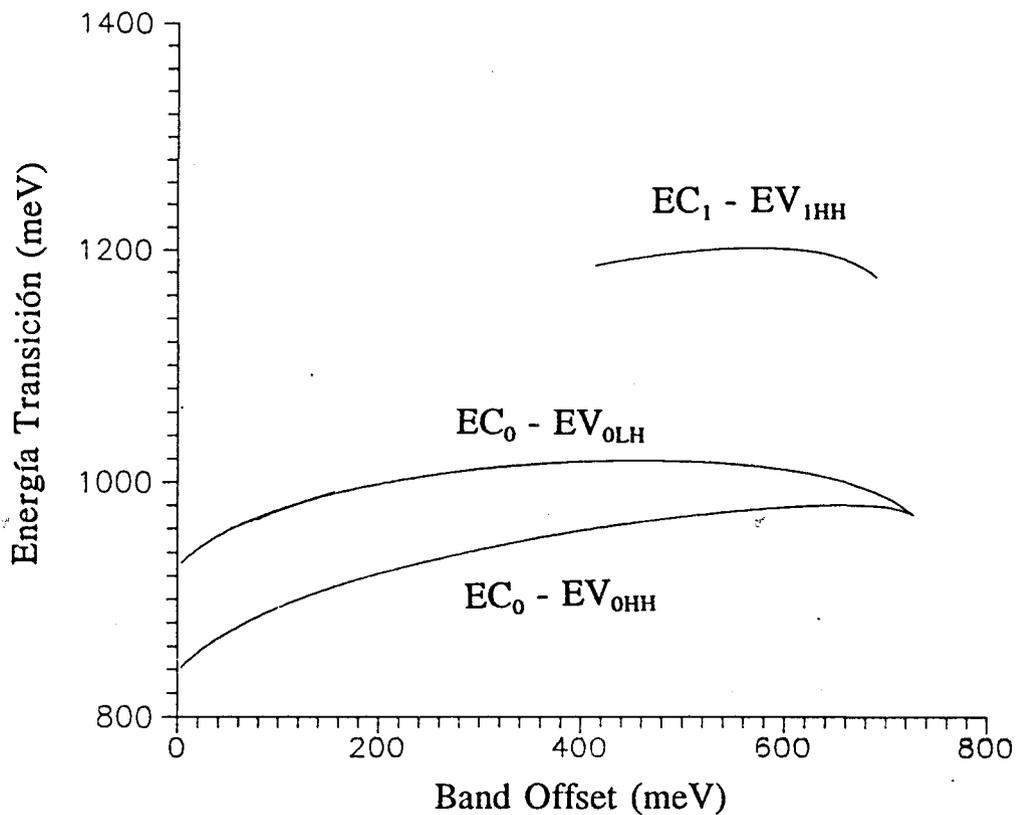


Figura 18.

	Pozo (InGaAs)	Barrera (InAlAs)
Energía Gap	810 meV	1540 meV
$m_{ef} e^- (k=0)$	0.04112	0.084
$m_{ef} lh (k=0)$	-0.0503	-0.14768
$m_{ef} hh (k=0)$	-0.465	-0.428

Tabla VII. Parámetros utilizados en los cálculos de energía de los niveles en función del band offset

El método para determinar el band-offset consiste en identificar los picos de los espectros medidos, y ajustarlos a las gráficas obtenidas. Como podemos deducir de estas gráficas, necesitamos tener el valor de varias transiciones para poder averiguar el band-offset, puesto que con una sola, como resultaría de una experiencia de fotoluminiscencia, la indeterminación es excesivamente grande. También tenemos que tener en cuenta las

limitaciones sobre el rango de validez de las soluciones obtenidas con el modelo de Kane. Así, los cálculos serán más exactos cuanto menor sea la energía de los niveles, en este caso transiciones, en particular para la banda de conducción vimos que las soluciones eran válidas hasta unos 300meV respecto al fondo de la banda. Lo que significa, si la energía del gap del pozo es de unos 800meV, que los resultados serán válidos para transiciones de energía menor a unos 1100meV. Otro factor que hemos de tener en cuenta, es que los valores teóricos obtenidos para transiciones $HH_n \rightarrow E_n$ son más precisos que los obtenidos para las transiciones $LH_n \rightarrow E_n$. En cualquier caso, la energía de estas últimas transiciones será ligeramente inferior a lo calculado (resultado de una masa efectiva mayor que la utilizada en los cálculos), y se diferenciarán tanto menos cuanto menor sea el band-offset de valencia.

Por otra parte con este tipo de gráficas es relativamente fácil diferenciar entre posibles variaciones de grosor de los pozos y variaciones de composición. Las primeras repercuten en variaciones de la posición relativa de las transiciones sobre la gráfica, mientras que las segundas mantienen la distancia entre transiciones, y sólo varía el valor absoluto de estas. De esta forma podemos determinar, no sólo el band-offset, sino también el grosor del pozo y la fracción molar de In del semiconductor que lo forma. En principio tanto el espesor como la fracción molar son parámetros que nos proporciona el tecnólogo, sin embargo, al igual que ocurría en las capas epitaxiales, el valor que nos proporciona tiene un margen de error demasiado grande para el tipo de cálculo que aquí realizamos.

Para los pozos en los que el semiconductor que forma el pozo está deformado, los cálculos se complican, no sólo por la "indeterminación" que tenemos sobre las masas efectivas, como hemos mencionado con anterioridad. En este caso, el band-offset es distinto para los huecos pesados y los ligeros, puesto que debido a la deformación la energía del gap para unos y otros es diferente. Esta diferencia la podemos calcular mediante las expresiones presentadas en el capítulo anterior, que dan los corrimientos ΔE_{hh} y ΔE_{lh} respecto al gap original, para una determinada deformación ϵ . Sin embargo, ahora tanto las variaciones de grosor como de composición cambian la posición relativa de las transiciones. Como consecuencia no podremos averiguar el espesor del pozo tal como hacíamos en los pozos sin deformar, por lo tanto el ajuste de los niveles resulta impracticable en el caso de los pozos deformados.

III.5c-RESULTADOS EXPERIMENTALES

En la figura 19 mostramos un espectro típico de PLE, para un SQW de unos 5nm de grosor y $x=0.53$ (a), muestra MBE690, y uno de una muestra de 25nm de grosor y la misma fracción molar (b), muestra MBE689.

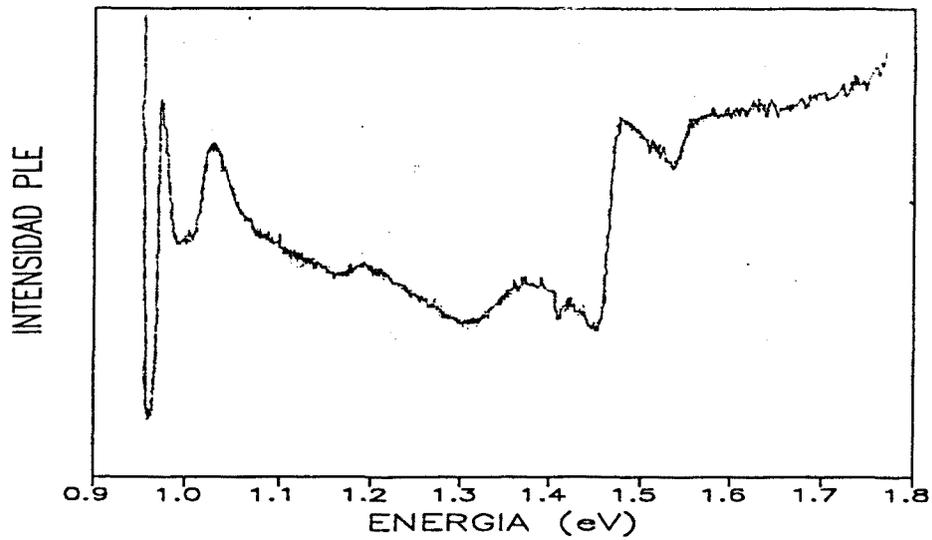


Figura 19(a).

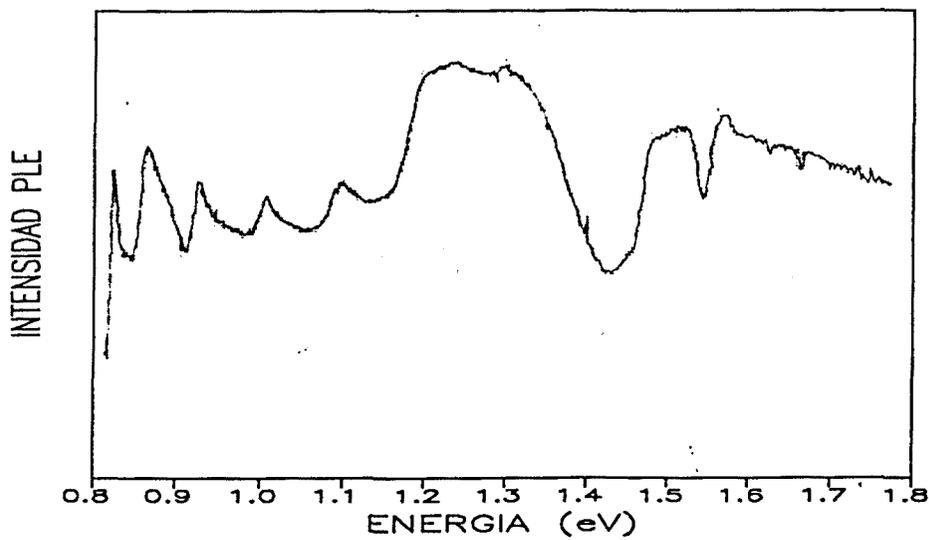


Figura 19(b).

Para la medida de estos dos espectros hemos centrado la λ , del monocromador de análisis, en un nivel de recombinación debido a una impureza, de forma que podemos medir a partir de la primera transición entre niveles, $HH_0 \rightarrow E_0$.

En el primer caso logramos identificar las primeras tres transiciones $HH_0 \rightarrow E_0$, $LH_0 \rightarrow E_0$, $HH_1 \rightarrow E_1$, en las cuales se observa el pico del excitón. Además, podemos comprobar que el último frente corresponde a la energía del gap del $In_{0.52}Al_{0.48}As$ a 15K (unos 1550meV), que forma las barreras del pozo. En el espectro correspondiente a la muestra del pozo ancho podemos identificar más transiciones, ya que hay más estados ligados. También podemos comprobar que la energía de la primera transición es menor que en el pozo estrecho, consecuencia lógica de la distribución de niveles al aumentar la anchura. De la comparación de estos resultados con los cálculos experimentales hemos visto que en las muestras anchas, sólo se distinguen las transiciones entre huecos pesados y banda de conducción, esto es debido a la los aquí los niveles están más juntos, la resolución del sistema, y que la intensidad de las transiciones con huecos ligeros es menor.

En la figura 20(a-c), presentamos los espectros de PLE de las muestras medidas. De ellos hemos extraído las energías de las transiciones que mostramos en la tabla IX, junto con las características de las muestras utilizadas.

Los datos que hemos utilizado, para realizar los ajustes de estas medidas, son los de la tabla VIII, salvo para las muestras deformadas. En estas últimas la fracción molar de indio en el pozo es de $x=0.6$, esto hace que el gap cambie a 734meV (en vez de los 810meV para $x=0.53$). Pero como existe una deformación tenemos un incremento del gap, que además es distinto para los huecos ligeros y los pesados :

$$\Delta E_{HH} = 48.6 \text{meV}$$

$$\Delta E_{LH} = 15.1 \text{meV}$$

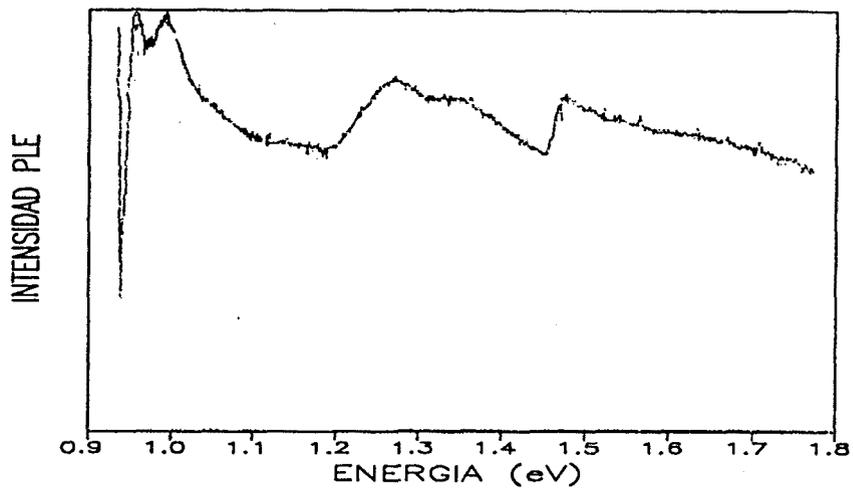


Figura 20(a).

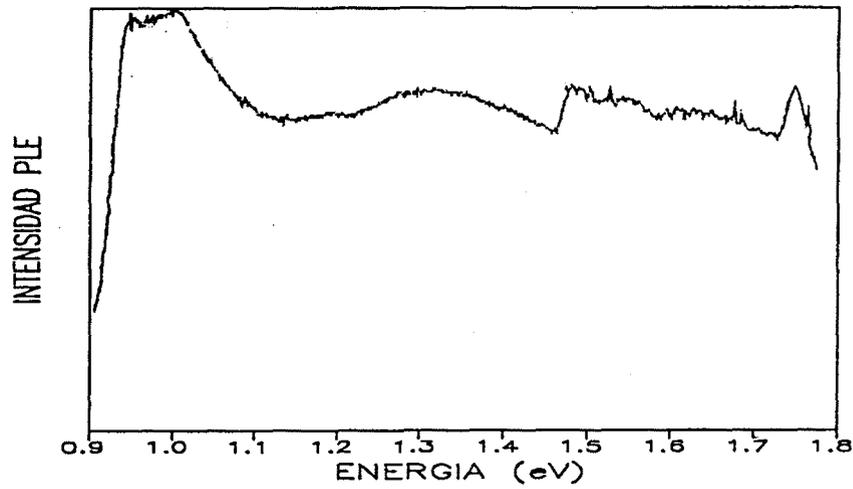


Figura 20(b).

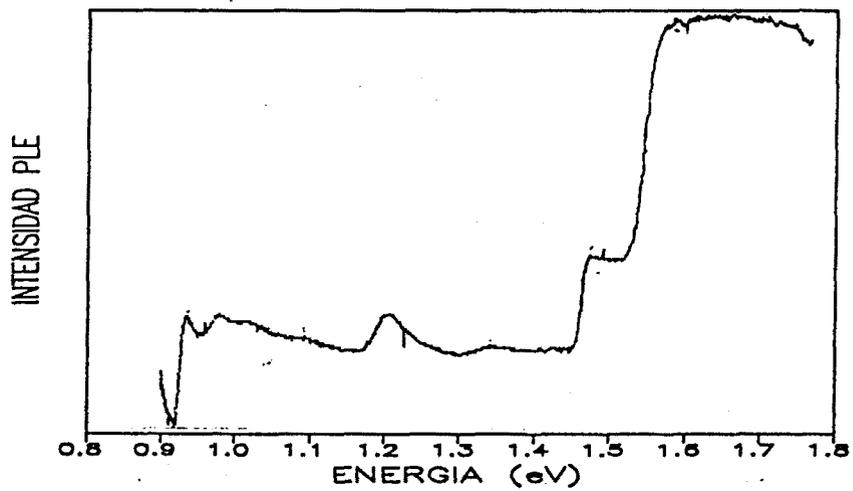


Figura 20(c).

Muestra	MBE690	MBE775	MBE689	MBE774	MBE797
Tipo	SQW	MQW	SQW	MQW	SQW
Anchura	4.7nm	5.5nm	20nm	4.4nm	5.0nm
F.Molar	0.53	0.53	0.53	0.60	0.60
	977meV	957meV	821meV	949meV	931meV
	1030meV	991meV	863meV	998meV	974meV
	1195meV	1135meV	922meV	1470meV	1205meV
	1370meV	1279meV	1000meV		1475meV
	1480meV	1470meV	1091meV		1560meV
	1555meV		1195meV		
			1290meV		
			1477meV		
			1560meV		

TABLA IX. Transiciones energéticas medidas mediante PLE.

Como hemos mencionado antes la anchura del pozo la hemos obtenido haciendola variar como parámetro en los ajustes. Como resultado hemos obtenido unos valores, que en algunos casos difieren de los proporcionados por el tecnólogo. Así, por ejemplo, la muestra MBE690 es de 4.7nm en vez de los 5.0nm, y la MBE689 es de unos 20nm en vez de 25nm.

En las muestras no deformadas el ajuste es bueno, sobre todo para las muestras delgadas, donde se producen sólo dos o tres transiciones, y para niveles cuyas energías están dentro de los límites que habíamos establecido como válido para el modelo de Kane. En cambio, para las muestras gruesas, mientras que las primeras transiciones se ajustan relativamente bien, al aumentar la energía hay discrepancias entre los cálculos y las medidas. Las medidas dan

energías de transición mayores que las calculadas, debido a que para estos niveles de energía la masa efectiva real no es tan grande como los resultados del modelo de Kane.

De los ajustes con estas muestras obtenemos un band-offset de conducción de $460\text{meV} \pm 40\text{meV}$. En cambio para las muestras deformadas no podemos deducir gran cosa debido a los problemas que tenemos en el cálculo de niveles, desconocimiento de la masa efectiva, diferente energía de gap y band-offset para los dos tipos de huecos. Lo que si parece claro, del ajuste del primer nivel, es que el band-offset es ligeramente mayor para este tipo de muestras.

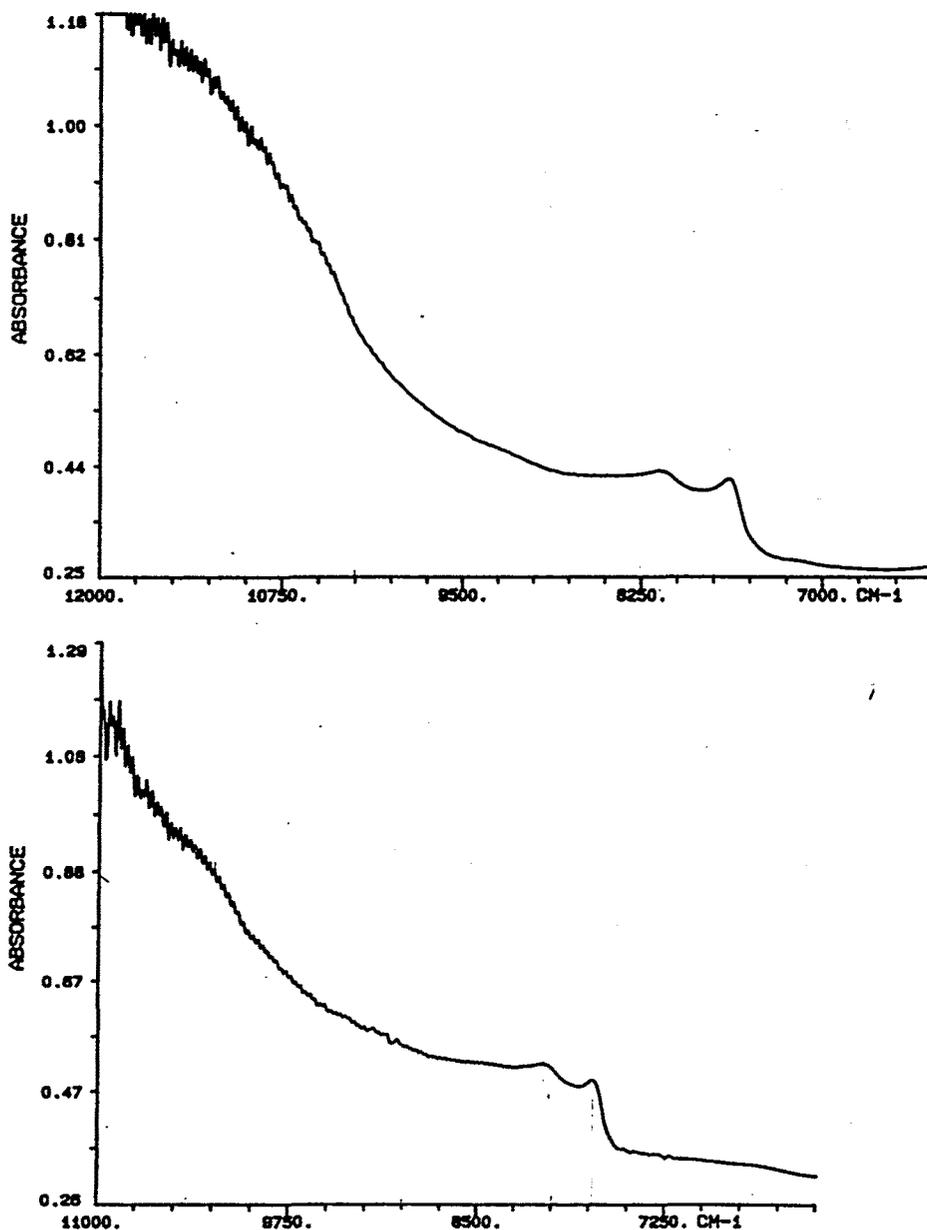


Figura 21. Espectros de AO para dos MQW.

Respecto a las medidas de AO, como ya hemos mencionado, sólo son factibles en MQW. En la figura 21 mostramos los espectros obtenidos para las muestras MBE774 y 775. De estas medidas, aunque no aportan nada nuevo sobre la PLE, si podemos comprobar que las energías de las transiciones coinciden con lo obtenido en PLE. Sin embargo, estas medidas nos presentan problemas cuando aumenta la energía, debido a una línea de base que aparece en los espectros, junto con oscilaciones propias del sistema de medida. Con esta técnica hemos intentado medir transiciones de electrones entre niveles del pozo creado en la banda de conducción, y la barrera, lo cual nos permitiría un análisis más preciso. Sin embargo los resultados no fueron satisfactorios.

MEDIDAS DE ADMITANCIA

III-6a. ANALISIS DE ADMITANCIA DE ESTRUCTURAS SQW

Consideremos un pozo cuántico de anchura d , a una distancia L de un contacto Schottky (figura 22). Supondremos que el pozo es lo suficientemente estrecho como para considerar la carga almacenada en él como una densidad superficial de carga. En este caso la carga total de la estructura viene dada por :

$$Q = qA [N_D W - n_w] \quad (43)$$

donde q es la carga del electrón, A el área del contacto Schottky, N_D la concentración del dopante en el material de volumen, W la anchura de la región de deplexión y n_w la concentración de electrones por unidad de área en el pozo.

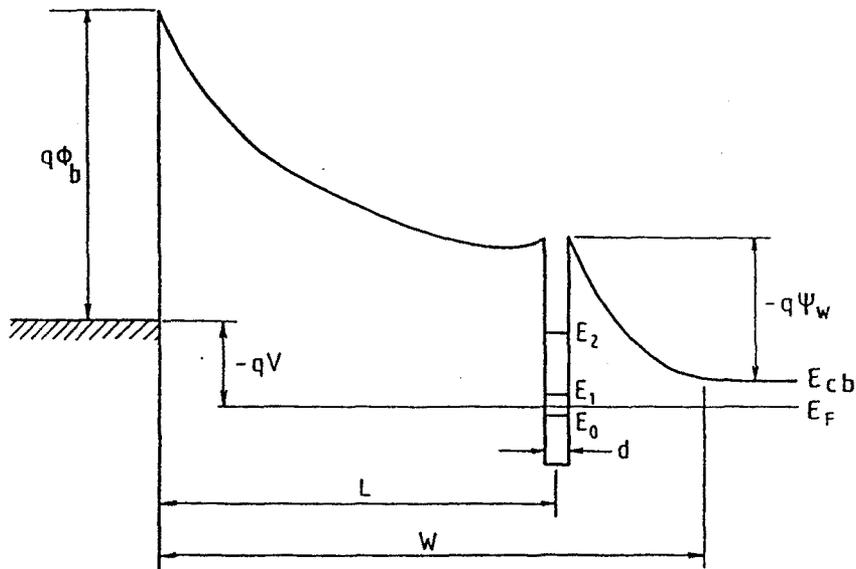


Figura 22. Efecto de la presencia de un contacto Schottky en la vecindad de un pozo cuántico.

Esta densidad viene dada por :

$$n_w = \sum_i \int_{E_i}^{\infty} f(E) \sigma(E) dE \quad (44)$$

donde E_i es la energía del mínimo de la i -ésima sub-banda de conducción del pozo, $f(E)$ es el factor de ocupación para la energía E y $\sigma(E)dE$ es la densidad de estados con energía entre E y $E+dE$. Esta densidad de estados viene dada por [34] :

$$\sigma = \frac{m_i^*}{\pi \hbar^2} \quad (45)$$

donde m_i^* es la masa efectiva de cada sub-banda, que es distinta para cada una de ellas debido a la no parabolicidad. En primera aproximación podemos sacar de la integral la densidad de estados, la cual supondremos que varía lentamente con la energía en cada sub-banda:

$$n_W = \sum_i \sigma(E_i) \int_{E_i}^{\infty} f(E) dE = \sum_i \sigma(E_i) \int_{E_i}^{\infty} \frac{dE}{1 + \exp\left[\frac{E - E_F - Q\psi_W}{KT}\right]} \quad (46)$$

donde $\sigma(E_i)$ es la densidad de estados en el mínimo de cada sub-banda. Y finalmente, integrando para cada sub-banda obtenemos :

$$n_W = \sum_i \sigma(E_i) KT [Ln(1 + e^{u_i}) - u_i] \quad (47)$$

siendo :

$$u_i = \frac{E_i - E_F - Q\psi_W}{KT} \quad (48)$$

en esta expresión hemos llamado E_F al nivel de fermi y ψ_W a la barrera de potencial entre la zona neutra de la estructura y el pozo (figura 22).

Ahora ya conocemos todos los términos que intervienen en la carga almacenada en la estructura, y por lo tanto estamos en condiciones de calcular la admitancia que presentará dicha estructura al aplicarle una señal eléctrica. Esta viene dada por :

$$Y(\nu) = j\nu \frac{\delta Q}{\delta V} \quad (49)$$

donde j es la unidad imaginaria y ν la frecuencia de la señal aplicada. Teniendo en cuenta la expresión (43) podemos escribir :

$$Y(\nu) = j\nu QA \left[N_D \frac{\delta W}{\delta V} - \frac{\delta n_W}{\delta V} \right] \quad (50)$$

El problema que se nos presenta ahora es determinar $(\delta W/\delta V)$ y $(\delta n_w/\delta V)$ en función de la tensión de polarización y de la frecuencia ν . Para realizar esto hemos de resolver la ecuación de Poisson, y lo haremos para el caso en que el pozo se encuentra en la región de deplexión de la estructura, es decir cuando $L < W$ como está representado en la figura 22, puesto que corresponde a la polarización de trabajo. En la figura 23 representamos la distribución de carga, figura 33a, la de campo eléctrico, figura 23b, y la de potencial, figura 23c, que tendremos en la estructura en dichas condiciones.

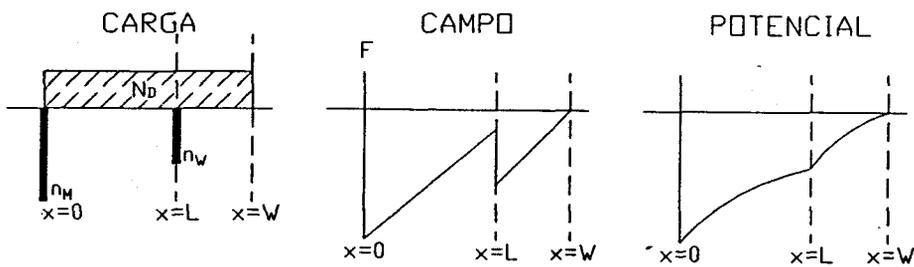


Figura 23. (a) (b) (c)

la carga total viene dada por la ecuación (43), mientras que la distribución de campo eléctrico la obtendremos al integrar la ecuación:

$$\frac{dF}{dx} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (51)$$

bajo las siguientes condiciones de contorno :

$$F|_{x=W} = 0 ; F|_{x=L^+} - F|_{x=L^-} = -\frac{en_w}{\epsilon} \quad (52)$$

con lo que resulta :

$$\begin{aligned} F(x) &= -\frac{eN_D}{\epsilon} (W-x) + \frac{en_W}{\epsilon} , 0 < x < L \\ F(x) &= -\frac{eN_D}{\epsilon} (W-x) , L < x < W \end{aligned} \quad (53)$$

y por último, la distribución de potencial la obtenemos integrando la ecuación:

$$\frac{d\Psi}{dx} = -F(x) \quad (54)$$

teniendo en cuenta las condiciones de contorno :

$$\Psi |_{x=W} = 0 ; \Psi |_{x=0} = V - \phi_b \quad (55)$$

con lo que resulta :

$$\begin{aligned} \Psi(x) &= -\frac{eN_D}{2\epsilon} (W-x)^2 + \frac{en_W}{\epsilon} (L-x) , 0 < x < L \\ \Psi(x) &= -\frac{eN_D}{2\epsilon} (W-x)^2 , L < x < W \end{aligned} \quad (56)$$

En este caso ($L < W$) para $x=0$, es decir en la superficie del contacto se cumple que :

$$V - \phi_b = -\frac{eN_D W^2}{2\epsilon} + \frac{en_W L}{\epsilon} \quad (57)$$

donde ϕ_b es la altura de la barrera Schottky.

Para una tensión de polarización V la ecuación (57) nos relaciona n_w y W . Sin embargo, existe otra relación entre estos dos parámetros. A partir de (47) la concentración n_w está directamente relacionada con la energía normalizada u_i . A partir de la figura 22 y teniendo en cuenta la expresión (48) podemos ver que :

$$u_i = \frac{E_c - E_F}{KT} - \frac{Q\psi_w}{KT} - \frac{\Delta E_i}{KT} \quad (58)$$

donde E_c es el mínimo de la banda de conducción y ΔE_i es la diferencia entre este mínimo y la energía del mínimo de la sub-banda i del pozo. La ψ_w viene dada por :

$$\psi_w = -\frac{QN_D}{2\epsilon} (W-L)^2 \quad (59)$$

El resultado es un conjunto de ecuaciones ligadas ((47), (57), (58) y (59)) que se han de verificar simultáneamente para valores correctos de n_w y W . En la práctica, para una tensión V se hace una elección arbitraria de n_w y mediante (57) determinamos W . A continuación aplicando secuencialmente (59), (58) y (47) obtenemos un valor para n_w . Volvemos a comenzar el proceso escogiendo nueva n_w entre los dos valores anteriores y continuaremos hasta que n_w converja.

Diferenciando la ecuación (57) y sustituyendo en (50) obtenemos :

$$Y(v) = jv \left[\epsilon \frac{A}{W} + QA \left(1 - \frac{L}{W} \right) \frac{\delta n_w}{\delta V} \right] \quad (60)$$

El primer término entre paréntesis es la capacidad de la zona de carga espacial. El segundo contiene la respuesta de los portadores que se encuentran en el pozo. Para poder explotar la expresión de la admitancia tendremos que buscar una forma analítica a este segundo factor, $(\delta n_w / \delta V)$ en función de parámetros que conozcamos o podamos medir. Para ello hemos

de considerar la cinética de los estados en una subbanda del pozo, etiquetada como i.

$$\frac{df_i(E, t)}{dt} = n_s(t) c_{ni} [1 - f_i(E, t)] - e_{ni}(E, t) f_i(E, t) \quad (61)$$

siendo $f_i(E, t)$ el factor de ocupación, en el instante t de los estados de la subbanda i de energía E, c_{ni} y e_{ni} son sus coeficientes de captura y emisión, respectivamente, y $n_s(t)$ es la concentración de portadores libres en la banda de conducción del material volúmico en la posición del pozo.

Asumiendo condiciones de pequeña señal, tenemos:

$$f_i(E, t) = f_{i0}(E) + \delta f_i(E, t) \quad (62)$$

$$\frac{d}{dt} [\delta f_i(E, t)] = jv \delta f_i(E, t) \quad (63)$$

y

$$n_s(t) = n_{s0} + \delta n_s(t) \quad (64)$$

$$\frac{d}{dt} [\delta n_s(t)] = jv \delta n_s(t) \quad (65)$$

donde el subíndice 0 indica condiciones de estado estacionario.

La sustitución de (62), (63), (64) y (65) en (61) tras algunos cálculos nos da:

$$\delta f_i(E, t) = \frac{f_{i0}(E) (1 - f_{i0}(E))}{1 + jv \frac{f_{i0}(E)}{c_{ni}(E) n_{s0}}} \frac{\delta n_s(t)}{n_{s0}} \quad (66)$$

sustituyendo n_{so} por:

$$n_{so} = N_D \exp\left[\frac{q\psi_w}{kT}\right] \quad (67)$$

encontramos:

$$\delta f_i(E, t) = \frac{f_{io}(E) (1-f_{io}(E))}{1 + j\nu \frac{f_{io}(E)}{C_{ni}(E) n_{so}}} \frac{q\delta\psi_w(t)}{kT} \quad (68)$$

Los cambios de concentración de electrones, por unidad de área, en el pozo se pueden escribir como:

$$\delta n_w(t) = \sum_i \int_{E_i}^{\infty} \sigma_i \delta f_i(E, t) dE \quad (69)$$

donde E_i es el mínimo de la i -ésima sub-banda en el pozo.

La sustitución de (68) en (69) y la integración de (69) nos dan:

$$\delta n_w(t) = q\delta\psi_w(t) \sum_i \frac{\sigma_i}{\gamma\tau_i} \left[\arctg[\gamma\tau_i f_{io}(E_i)] - \frac{j}{2} \text{Ln}[1 + (\gamma\tau_i f_{io}(E_i))^2] \right] \quad (70)$$

donde τ_i es la constante de tiempo de captura de la subbanda i en el pozo, dada por:

$$\tau_i = \frac{1}{C_{ni}(E_i) n_{so}} \quad (71)$$

Para obtener (70) hemos supuesto que tanto σ_i como $c_{ni}(E)$ cambian lentamente con la energía, en cada sub-banda.

Teniendo en cuenta la expresión (57) y (59), podemos escribir:

$$\delta \psi_w(t) = \left(1 - \frac{L}{W}\right) \left[\delta V(t) - \frac{qL}{\epsilon} \delta n_w(t) \right] \quad (72)$$

Finalmente la sustitución de (72) en (70) nos da:

$$\frac{\delta n_w}{\delta V} = \frac{\sum_i (a_i - j b_i)}{1 + \frac{qL}{\epsilon} \sum_i (a_i - j b_i)} \quad (73)$$

donde

$$a_i = \frac{q\sigma_i}{v\tau_i} \left(1 - \frac{L}{W}\right) \arctg[v\tau_i f_{io}(E_i)] \quad (74)$$

y

$$b_i = \frac{q\sigma_i}{2v\tau_i} \left(1 - \frac{L}{W}\right) L n [1 + (v\tau_i f_{io}(E_i))^2] \quad (75)$$

Reservaremos este resultado obtenido para la contribución de los portadores del pozo para su sustitución al realizar los ajustes. Ahora escribamos las expresiones de la capacitancia y la conductancia a partir de la de la admitancia, ecuación (60) :

$$C = \frac{\text{Imag}[Y(v)]}{v} = \epsilon \frac{A}{W} + qA \left(1 - \frac{L}{W}\right) \text{Real} \left[\frac{\delta n_W}{\delta V} \right] \quad (76)$$

y

$$G = \text{Real}[Y(v)] = -qAv \left(1 - \frac{L}{W}\right) \text{Imag} \left[\frac{\delta n_W}{\delta V} \right] \quad (77)$$

Además, en algunos casos la resistencia en serie R, debida a los contactos, no se puede despreciar. En estos casos tendremos un circuito equivalente como el presentado en la figura 24, con una capacitancia y una conductancia equivalentes iguales a :

$$C_{eq} = \frac{C}{(1+RG)^2 + (RCv)^2} \quad (78)$$

y

$$G_{eq} = \frac{G(1+RG) + RC^2v^2}{(1+RG)^2 + (RCv)^2} \quad (79)$$

En estas ecuaciones los únicos parámetros libres son τ_i , ΔE_i , y R. Y con ellas estamos en disposición de ajustar nuestras medidas de admitancia, y poder determinar a partir de ellas el band offset entre bandas de conducción y la constante de captura de portadores en los niveles del pozo.

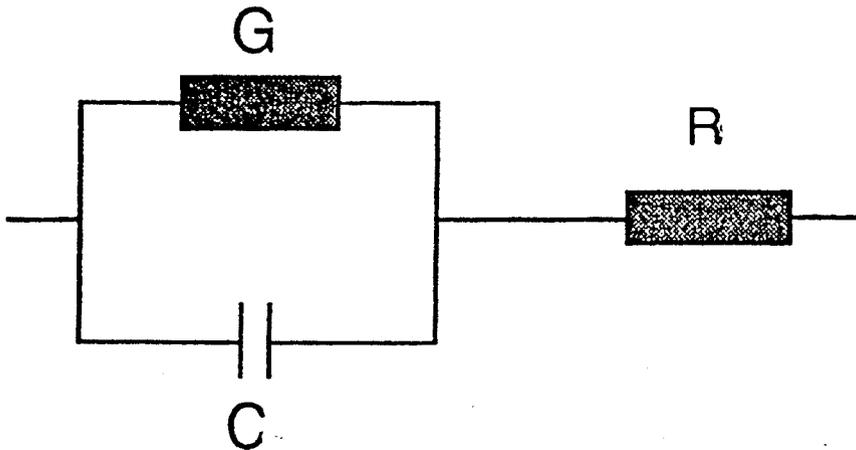


Figura 24. Modelo eléctrico de la estructura formada por un contacto Schottky y un pozo cuántico.

III.6b.RESULTADOS EXPERIMENTALES Y AJUSTES

La figura 25 muestra un ejemplo de medidas de admitancia realizadas en las muestras de pozos cuánticos.

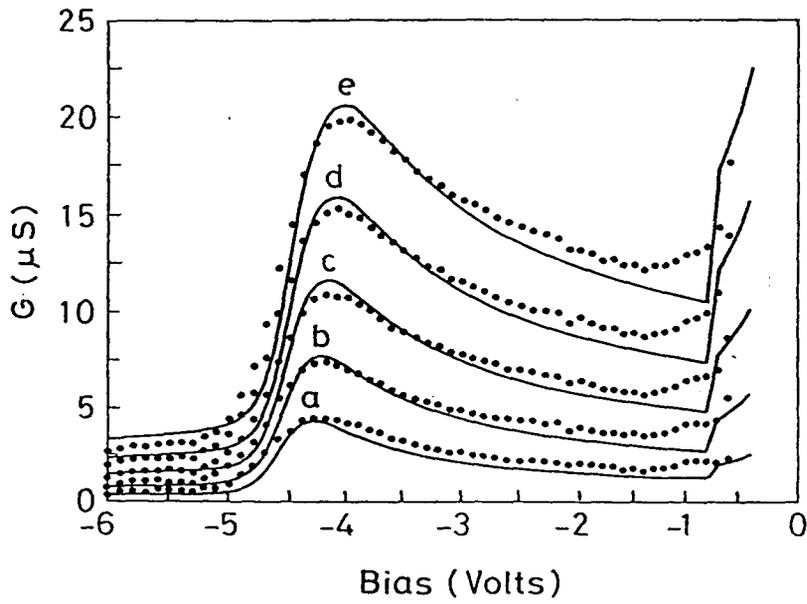


Figura 25(a).

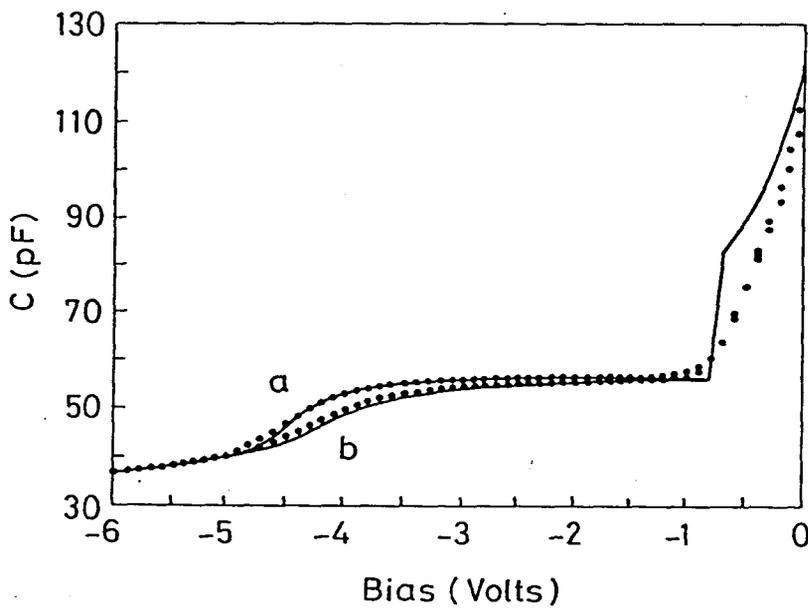


Figura 25(b).

Si nos fijamos, por ejemplo, en los espectros de conductancia, podemos hacer una interpretación cualitativa de dichos espectros. Comencemos en el extremo derecho de la gráfica, donde la tensión de polarización es cero. Al decrementar la tensión de polarización la conductancia disminuye, en un punto determinado disminuye bruscamente. Esto es debido a que la zona de carga espacial ha llegado al pozo, y por lo tanto los electrones que hay en él entran en juego en la conducción. Hasta este momento la señal de conductancia era debida a la conducción, a través del pozo, de los electrones externos a él. De hecho la conductancia tendría que bajar hasta cero, si no fuese por que hay una resistencia en serie debida a efectos de contacto. Si seguimos disminuyendo la tensión de polarización, la conductancia aumenta, consecuencia de la bajada del nivel de Fermi en el pozo. Esto hace que disminuya el coeficiente de emisión de los electrones en el pozo, y por lo tanto que haya menos electrones disponibles provenientes del pozo. Además, esta bajada del nivel de Fermi implica que las mismas variaciones de tensión de medida, provoquen variaciones del nivel de Fermi mayores, aumentando la conductancia del dispositivo. Cuando el nivel de Fermi llega al fondo del pozo se acaba el suministro de electrones, y la conductancia vuelve a caer hasta un mínimo, que depende de la resistencia de contacto y la frecuencia de medida.

El efecto de la frecuencia es muy sencillo de analizar. Para frecuencias bajas los portadores pueden seguir las variaciones de la señal, con lo que la parte imaginaria de $\delta n_w / \delta V$ (que es lo que contribuye a la conductancia) tiende a cero. De ahí que G disminuya monótonamente cuando lo hace la frecuencia. Al aumentar la frecuencia los portadores tendrán problemas para seguir las variaciones de la señal, y por lo tanto la parte imaginaria aumenta, dando una contribución mayor a la conductancia.

Los resultados experimentales se han ajustado mediante las expresiones (78) y (79). En los cálculos sólo se han considerado los electrones de la primera sub-banda del pozo, puesto que bajo las condiciones de trabajo las sub-bandas superiores no se llenan, y por lo tanto no contribuyen a la señal de admitancia. "Este punto se ha corroborado mediante cálculos numéricos". Así, para ajustar los espectros podemos variar tres parámetros independientes que desconocemos a priori :

- La resistencia en serie, R.
- La diferencia entre mínimos de la banda de conducción del material de la barrera y la energía del primer estado ligado del pozo, ΔE_0 .
- El coeficiente de captura de la primera sub-banda, c_{n0} .

Sin embargo, para obtener una mayor precisión se ha considerado que el dopaje N_D , la distancia entre el contacto Schottky y el pozo L y la altura de la barrera ϕ_b también son parámetros libres. En la tabla X presentamos los parámetros obtenidos tras el ajuste de las medidas.

Composición Pozo	0.53	0.60
N_D (cm^{-3})	$(2.6 \pm 0.1) \times 10^{16}$	$(2.6 \pm 0.1) \times 10^{16}$
L (μm)	0.38 ± 0.01	0.38 ± 0.01
ϕ_b (V)	0.63 ± 0.05	0.58 ± 0.04
R (Ω)	220 ± 30	180 ± 30
ΔE_0 (eV)	0.325 ± 0.015	0.37 ± 0.02
c_{n0} (cm^3/s)	$3 \times 10^{-7} - 7 \times 10^{-7}$	$3 \times 10^{-7} - 13 \times 10^{-7}$

Tabla X. Parámetros obtenidos a partir de los ajustes de las medidas de conductancia para los pozos

III-6c. DETERMINACION DEL BAND OFFSET

El band offset de conducción se obtiene de la relación siguiente :

$$\Delta E_c = \Delta E_0 + E_0 \quad (80)$$

donde E_0 es la energía del primer estado ligado en el pozo, que se ha calculado resolviendo la ec. de Schrödinger con la aproximación de la masa efectiva. Para realizar estos cálculos

se han tenido en cuenta efectos de no parabolicidad en la banda de conducción, tanto en el pozo como en la barrera, de acuerdo con el modelo de Kane descrito en la primera parte de este capítulo.

Los resultados obtenidos para el band offset de la banda de conducción son :

$$- \Delta E_c = 0.47 \pm 0.03 \text{ eV, para el caso de } x=0.53$$

$$- \Delta E_c = 0.52 \pm 0.03 \text{ eV, para el caso de } x=0.60$$

Las medidas realizadas entre 200 y 300K dan valores de ΔE_c que se encuentran dentro de las barras de error.

El coeficiente de captura de los portadores en la primera sub-banda del pozo está comprendido en los siguientes rangos :

$$- 3 \cdot 10^{-7} - 7 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s para } x=0.53$$

$$- 3 \cdot 10^{-7} - 13 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^3/\text{s para } x=0.60$$

III.7-CONCLUSIONES

Hemos determinado el band-offset de conducción (valencia) de pozos cuánticos, mediante dos tipos de técnicas distintas Admitancia y Ópticas. A pesar de la aparente simplicidad de las medidas ópticas, vemos que los resultados pueden ser más complicados de interpretar, debido a que trabajamos con niveles de la banda de conducción y de valencia. Por el contrario, en las medidas de admitancia, que a primera vista es una técnica menos vistosa, sólo trabajamos con los niveles de la banda de conducción. Esto presenta varias ventajas que hacen preferible la utilización de esta técnica siempre que sea posible. Por una parte conocemos mucho mejor la evolución de la masa efectiva con la energía de los electrones que de los huecos ligeros, en cualquier caso eliminamos la fuente de error proveniente de los cálculos en la banda de valencia. Por otra parte, mientras que en las técnicas ópticas hay que tener en cuenta la energía del excitón, la cual no conocemos exactamente, en las medidas de admitancia, este no entra en juego y por lo tanto suprimimos esta fuente de error.

- [1] G.Bastard. "Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures". Les Editions de Physique. Les Ulis Cedex (1988).
- [2] C.Weisbuch, B.Vinter. "Quantum Semiconductor Structures". Academic Press. San Diego 1991.
- [3] M.Razeghi, J.Ramdani, H.Verrielle, D.Decoster, M.Constant, J.Vanbremeersch. Appl. Phys. Lett. **49**, 215 (1986).
- [4] L.F.Tiemeijer, P.J.A.Thijs, P.J.de Waard, J.J.M.Binsma, T.V.Dongen. Appl. Phys. Lett. **58**, 2738 (1991).
- [5] Y.H.Lo, R.J.Deri, J.Harbison, B.J.Skromme, M.Seto, D.M.Hwang, T.P.Lee. Appl. Phys. Lett. **53**, 1242 (1988).
- [6] C.Y.Chen, S.N.G.Chu, A.Y.Cho. Appl. Phys. Lett. **46**, 1145 (1985).
- [7] C.W.Wang. Appl. Phys. Lett. **59**, 573 (1991).
- [8] A.S.Brown, U.K.Mishra, J.A.Henige, M.J.Delaney. J. Vac. Sci. Technol. **B6**, 678 (1988).
- [9] P.R.Breger, K.Chang, P.Bhattacharya, J.Singh, K.K.Bajaj. Appl. Phys. Lett. **53**, 684 (1988).
- [10] R.E.Mallard, N.J.Long, G.R.Booker, E.G.Scott, M.Hockly, M.Taylor. J. Appl. Phys. **70**, 182 (1991).
- [11] S.M.Wang, T.G.Andersson, M.J.Ekenstedt. Appl. Phys. Lett. **59**, 2157 (1991).
- [12] E.J.Fantner, G.Bauer. "Two Dimensional Systems, Heterostructures and Superlattices" editado por G.Bauer, F.Kuchar y H.Heinrich, Springer Series in Solid State Sci. **53**, p.207 (Springer Verlag, Berlin) 1984.
- [13] G.Bastard, J.A.Brum. IEEE J. Quant. Electr. **QE22**, 1625 (1986).
- [14] J.N.Schulman, Yia-Chung Chang. Phys. Rev. **B24**, 4445 (1981); Phphys. Rev. **B31**, 2056 (1985).
- [15] Yia-Chung Chang, J.N.Schulman. J. Vac. Sci. Technol. **21**, 540 (1982).
- [16] M.Jaros, K.B.Wong. J. Phys. **C17**, L 765 (1984).
- [17] G.Bastard. "Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures". Pag. 71. Les Editions de Physique. Les Ulis Cedex (1988).
- [18] D.J.Ben Daniel, C.B.Duke. Phys. Rev. **152**, 683 (1966).
- [19] E.O.Kane. J. Phys. Chem. Sol **1**, 249 (1957).
- [20] G.Bastard. "Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures". Pag. 45. Les Editions de Physique. Les Ulis Cedex (1988).

- [21] J.N.Schulman, T.C.Mc Gill. "Synthetic Modulated Structure Materials" editado por W.L.L. Chang y B.C.Giessen (Academic Press, New York) 1984.
- [22] Y.Foulon, C.Priester. Phys. Rev. B **44**, 5889 (1991).
- [23] T.Ando, H.Akera. Pys. Rev. B **40**, 11609 (1989).
- [24] H. Kröemer, W.Y. Chien, J.S. Harris, Jr., and D.D. Edwall, Appl. Phys. Lett. **36**, 295 (1980).
- [25] S. Forrest. Appl. Phys. Lett., **45**, 1199 (1984).
- [26] C.K. Peng, A. Ketterson, and H. Morkoç, J. Appl. Phys., **60**, 1709, 1986.
- [27] X. Letartre, D. Stievenard, M. Lannoo, and D. Lippens. J. Appl. Phys., **68**, 116 (1990).
- [28] L.F. Marsal, J.M. López-Villegas, J. Bosch and J.R. Morante. Aceptado para publicación en Appl. Phys. Lett.
- [29] D.F. Welch, G.W. Wicks, and L.F. Eastman, J. Appl. Phys., **55**, 3176 (1984).
- [30] J.R. Waldrop, E.A. Kraut, C.W. Farley, and R.W. Grant, J. Appl. Phys., **69**, 372 (1991).
- [31] J.P. Landesman, J.C. Garcia, J. Massies, P. Maurel, G. Jezequel, J.P. Hirtz, Appl. Phys. Lett., **60**, 1241 (1992).
- [32] X. Letartre, D. Stiévenard, and E. Barbier, Appl. Phys. Lett., **58**, 1047 (1991).
- [33] X. letartre, D. Stiévenard, and E. Barbier, J. Appl. Phys., **69**, 7912 (1991).
- [34] C.Weisbuch, B.Vinter. "Quantum Semiconductor Structures". Pag. 21-22. Academic Press. San Diego 1991.
- [35] T.Ando,A.B.Fowler, F.Stern. Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
- [36] R.L.Greene, K.K.Bajaj, D.E.Phelps. Phys. Rev. B **29**, 1807 (1984).
- [37] S.Schmimtt-Rink, D.S.Chemla, D.A.B.Miller. Advances in Physics **38**, 89 (1989).
- [38] A.Messiah. "Mécanique Quantique" (Dunod Paris) 1959.
- [39] G.Bastard. "Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures". Pag. 239. Les Editions de Physique. Les Ulis Cedex (1988).
- [40] G.Bastard. "Wave Mechanics Applied to Semiconductors Heterostructures". Pag. 248. Les Editions de Physique. Les Ulis Cedex (1988).
- [41] R.Dingle, en Festkorperprobleme editado por H.J.Queiser. Adv. Solid State Phys. vol. **15** (Pergamon/Vieweg, Braunschweig) 1975.
- [42] R.C.Miller, D.A.Kleinman, A.C.Gossard. Phys. Rev. B **29**, 7085 (1984).

CONCLUSIONES

CONCLUSIONES GENERALES

-Se ha realizado el montaje y la puesta a punto de un sistema experimental para la medida de espectros de fotoluminiscencia (PL) y fotoexcitación de la luminiscencia (PLE). En este proceso se han caracterizado todos los elementos del montaje, midiendo las funciones de transferencia del sistema para todas las configuraciones posibles de redes de difracción, filtros y detectores. También se han medido los espectros de emisión de las fuentes de excitación que se han utilizado. Además, cuando ha sido necesario, se han diseñado y realizado los filtros electrónicos específicos de cada detector. El conjunto ha sido integrado de forma que la realización de las medidas sea lo más automatizado posible.

-Hemos efectuado un análisis de la influencia de los parámetros que caracterizan a las capas epitaxiales sobre la estructura de bandas del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ crecido sobre un sustrato de InP o GaAs, para luego poder deducir dichos parámetros a través de los espectros de AO y la PL, que muestran la estructura de bandas. En este sentido, se ha mostrado el proceso sistemático de la caracterización de las capas epitaxiales a partir de los ajustes de los espectros de AO.

-Hemos establecido un método de análisis del espectro de absorción que nos permite discernir el posible origen de las inhomogeneidades en las capas epitaxiales. A saber: variaciones de composición o bien campo de deformaciones.

-Hemos establecido la variación de la energía del gap con la temperatura para el InGaAs matched sobre InP. El método utilizado mejora los resultados de la literatura.

-Hemos cuantificado las variaciones de composición correspondientes a la modulación gruesa en muestras de InGaAs/InP ligeramente comprimidas. Los resultados indican una disminución de las variaciones a medida que aumenta el espesor de la capa.

-Hemos analizado por AO la calidad cristalina en capas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ con fracciones molares que van desde 0.176 a 0.736. Los resultados obtenidos coinciden con los de TEM

y difracción de rayos X, en cuanto que la calidad de la capa empeora al ir aumentando la fracción molar de Im hasta $x = 0.5$ para mejorar para valores de x superiores, a pesar de la gran diferencia de parámetros de malla entre capas y sustrato. Además nuestro análisis nos ha permitido constatar que la dispersión energética aumenta con la deformación media.

-Hemos mostrado que el límite de resolución espacial de la PL y la AO se encuentra en un valor superior al del tamaño del excitón. Esto nos impide poder estudiar la modulación de contraste fina observada por microscopía TEM.

-La comparación de medidas AO y PL nos ha permitido confirmar que las variaciones de deformación en capas parcialmente relajadas corresponden a los diferentes dominios microscópicos limitados por disoluciones.

-La gran potencia de esta técnica nos ha permitido tanto confirmar resultados obtenidos por otras técnicas de medición como averiguar nuevas características de las capas epitaxiales. Sin embargo durante este estudio también hemos visto que la AO es una técnica complementaria y necesita los datos aportados por otras técnicas, sobre todo de la microscopía electrónica, para poder trabajar a pleno rendimiento.

-En cuanto al estudio de pozos cuánticos, hemos puesto especial énfasis en analizar cuales son las ventajas e inconvenientes de las diferentes técnicas para determinar el band offset.

-Hemos visto que mediante PLE podemos medir las transiciones energéticas entre diferentes niveles creados en los pozos de conducción y valencia. El hecho de poder acceder a estados excitados facilita el proceso de ajuste. En la realización de los ajustes de las energías de las transiciones hemos tenido en cuenta la no parabolicidad de las bandas.

-Los principales problemas que se encuentran al realizar los ajustes de las medidas ópticas son; el desconocimiento de la energía de ligadura del excitón y la imprecisión en el valor de la energía de la banda prohibida. Estas dificultades difícilmente pueden ser superadas en el caso de pozos deformados.

-Como alternativa hemos desarrollado una técnica basada en medidas de admitancia. En este caso no entra en juego la energía del excitón ni la de la banda prohibida.

-Hemos utilizado las técnicas anteriores para medir el band offset de pozos cuánticos de $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, para valores de x . Para $x = 0.53$, que corresponde al caso matched entre pozo y barrera, obtenemos un valor de 470meV; para $x = 0.6$, caso en que hay deformaciones, se obtiene un valor de 520meV. Tales resultados coinciden con lo publicado hasta ahora.



