

RESPUESTA ÓPTICA DE LOS EXCITONES EN POZOS CUÁNTICOS- FOTOLUMINISCENCIA EN FUNCIÓN DEL ANCHO DEL POZO

Answer standpoint of Excitons in the quantum well - Photoluminescence according to the weight well.

RESUMEN:

En este trabajo se interpreta teóricamente el espectro fotoluminiscencia para pozos cuánticos de $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$ dependiente: Del ancho del pozo. De las dimensiones de las rugosidades en interfaces no correlacionadas. Para solucionar la ecuación de Schrödinger se desarrolló un programa que permite calcular las energías y funciones propias de un sistema de pozo cuántico semiconductor teniendo en cuenta la variación en la masa efectiva de los electrones y huecos a lo largo de la heteroestructura. Finalmente se presenta el espectro fotoluminiscencia simulado para pozos con rugosidades, con altura $\pm a/4$ respecto al ancho medio del pozo (con a el parámetro de red).

PALABRAS CLAVES:

Excitón, Fotoluminiscencia, Pozo cuántico.

ABSTRACT:

This paper. It's interpret theoreticalment the specters photoluminescence quantum wells for $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$ dependent on the width of the well and the dimensions of the ridges in interfaces not correlated. To solve the equation Schrödinger developed a program that allows to calculate the energies and functions of a system of quantum well semiconductor taking into account the variation in the effective mass of electrons and holes along the heterostructures. It was finally introduced to simulated photoluminescence spectrum of wells with ridges, in the $a/4$ with respect to medium width of the pool±interface, with a height (with a parameter network).

KEYWORDS:

Exciton, Photoluminescence, Quantum well,

1. INTRODUCCIÓN

El desarrollo alcanzado en las técnicas de crecimiento de películas delgadas semiconductoras, tales como Epitaxia por haces moleculares (MBE *Molecular Beam Epitaxy*), deposición química de vapor metal orgánico (MOCVD *Metal Organic Chemical Vapor Deposition*), pulverización catódica [1], entre otras técnicas, ha permitido la fabricación de heteroestructuras semiconductoras a escala nanométrica (Pozos Cuánticos, Hilos Cuánticos, Puntos Cuánticos) con propiedades

ópticas y de conducción muy diferentes a las de semiconductores en bloque [1,2].

En estos materiales las propiedades excitónicas son extremadamente sensibles a los potenciales de confinamiento. Cuando se crecen pozos cuánticos, tales como $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$, los cuales son objeto de estudio en este trabajo, aparecen dos tipos de desorden a saber: Rugosidades en la interfase entre los dos semiconductores, (es decir la interfase no plana) y el desorden correspondiente a la difusión de átomos en la interfase de un semiconductor en el otro. En este trabajo sólo se considera el desorden debido a las Rugosidades (variaciones en el ancho del Pozo) originado en el proceso de crecimiento y que dan origen a fluctuaciones

SAULO DE JESÚS TORRES R.

Ingeniero Eléctrico, M. Sc. Física
Profesor Ingeniería de Sistemas
Universidad Tecnológica de Pereira
Estudiante Doctorado
Ingeniería del Software
Universidad Pontificia de Salamanca sede
Madrid.
saulotor@etp.net.co

“localizadas” en el potencial de confinamiento. Estas fluctuaciones modulan el perfil de las bandas de valencia y conducción afectando la respuesta óptica del pozo cuántico semiconductor. Como la fotoluminiscencia es sensible a la magnitud de la transición excitónica entonces el espectro de fotoluminiscencia da información acerca de las fluctuaciones del potencial de confinamiento. Esta influencia se manifiesta a través de la posición del pico y de la forma de línea del espectro de recombinación excitónica. De esta manera, utilizando el excitón como una sonda se evalúa la morfología de crecimiento.

2 DISEÑO DE SOFTWARE

El programa realizado en este trabajo, resuelve con sorprendente rapidez y precisión la solución de las ecuaciones trasciendes mediante un innovador artificio de triángulos semejantes formados en la intersección de dos curvas periódicas enmarcadas entre su respectivo intervalo de evaluación, ahorrando el tiempo de cálculo que emplean las iteraciones de aproximación que utilizan las técnicas de solución tradicionales para estas ecuaciones trasciendes. Estas ecuaciones resultan de modelar un pozo de potencial rectangular cuántico con rugosidades en la interface sobre tres materiales de semiconductores estilo emparedado, con el pozo de confinamiento de electrones/ huecos en el material del centro y las barreras en los materiales laterales, como por ejemplo de: $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$. Los cuales dan origen a fluctuaciones en la interface ideal dependiendo de las condiciones de crecimiento. Luego sobre este modelo se discute el Hamiltoniano de una partícula (electrón ó hueco) en una estructura semiconductor de pozo cuántico. Para un potencial generado por un pozo cuántico que varía lentamente en comparación con las distancias interatómicas se calculan los estados electrónicos de los portadores en el pozo cuántico, mediante la aproximación de la función envolvente. El cálculo se realiza para pozos cuánticos con tres valores de ancho, como por ej.: $l = 12.7$ nm y $12.7 \pm a/2$ nm con a el parámetro de red. En el cálculo de energías y funciones propias se emplea la aproximación de Masa efectiva isotrópica. Se consideran bordes de banda parabólica, por lo tanto las masas efectivas son consideradas escalares. Se soluciona el problema de valores propios mediante el programa en mención, obteniéndose los resultados de energía y funciones propias tanto para electrones como para huecos, los que se utilizan para los cálculos del espectro de fotoluminiscencia considerando las dimensiones de las islas en las interfaces, donde un problema tres dimensional (perfil plano y rugosidades o islas en profundidad), se simplifica mediante un análisis estadístico para tres tipos de islas (A que ensanchan el pozo, B que lo estrechan y C promedio), donde la probabilidad de coexistencia para cada tipo de isla depende de la técnica de crecimiento de las películas semiconductoras. El programa utiliza un factor de

probabilidad en cada tipo de isla para construir la forma de línea del Espectro de Fotoluminiscencia, correspondiéndose con gran precisión con los Espectros de Fotoluminiscencia Experimentales probados.

3. RESULTADOS Y ANÁLISIS

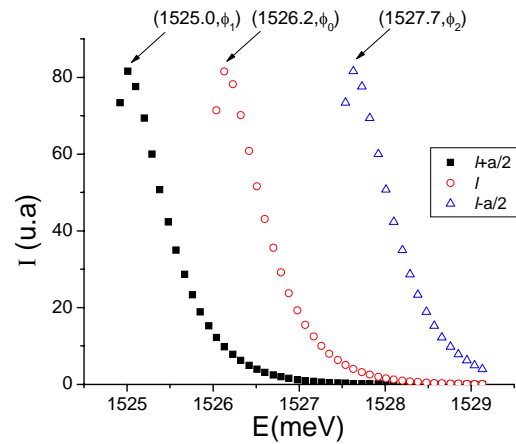


Figura 1. Espectros de Fotoluminiscencias calculados para pozos cuánticos de $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$ de espesores $l+a/2$, l , $l-a/2$ con $l=12.72$ nm.

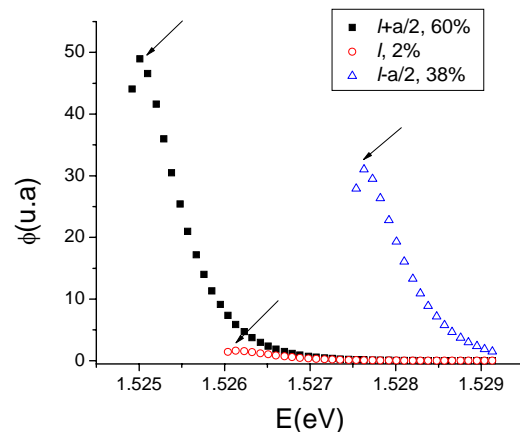


Figura 2. Espectros de Fotoluminiscencias calculados para pozos cuánticos de $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$ de espesores $l+a/2$, l , $l-a/2$ con $l=12.72$ nm con pesos relativos. Se indican las posiciones del pico en cada caso.

Si consideramos que los tres valores de ancho de pozo coexisten en una misma heteroestructura de pozo cuántico el espectro total debe corresponder a la suma de las tres contribuciones, teniendo en cuenta la emisión porcentual de cada ancho de pozo (ver figura 3). En la figura 3a se presenta el espectro de fotoluminiscencia dependiente de la energía y en la figura 3b se presenta el espectro dependiente de la longitud de onda. Medidas experimentales han permitido detectar la recombinación de excitones desde islas tipo a , b y c para pozos cuánticos de $\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$, en la figura 4 se presenta un espectro experimental.

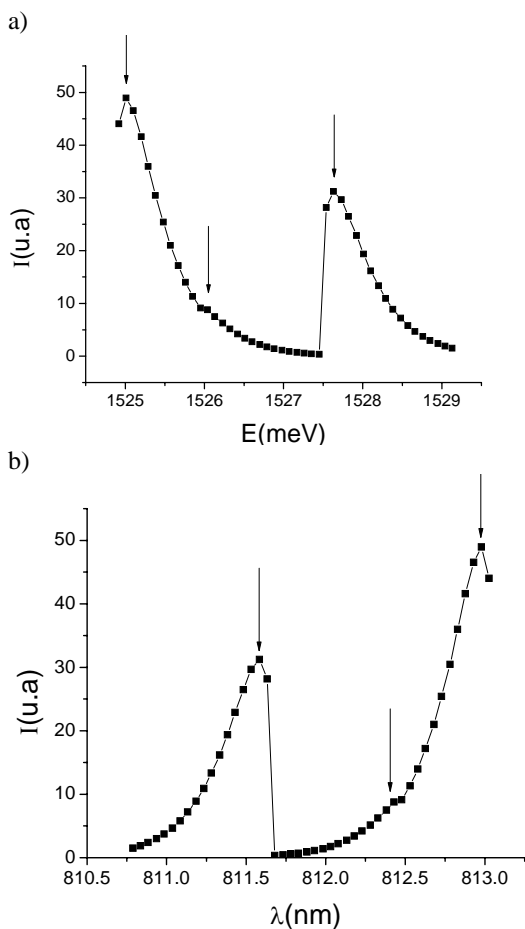


Figura 3. Espectros de Fotoluminencias calculados para pozos cuánticos de Al0.37Ga0.63As/GaAs/Al0.37Ga0.63As con rugosidad a/2 en la interfase. a) En función de la energía. b.) En función de la longitud de onda.

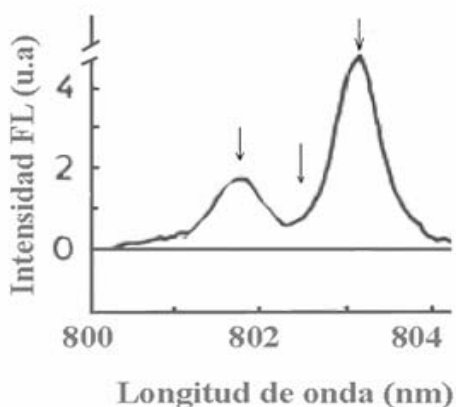


Figura 4 Espectros de fotoluminencia experimental de Al0.37Ga0.63 As/GaAs/Al0.37Ga0.63As para ancho de L=12.72 nm a T=4.2K

Fecha de Recepción: 5 de Julio de 2008.
 Fecha de Aceptación: 1º de Agosto de 2008.

Al comparar los resultados obtenidos en la simulación (Figura3b) con los valores experimentales (Figura 4) se observa una discrepancia del orden de los 0.002eV. Si tenemos en cuenta que el valor para la energía del excitón depende directamente de la energía de la brecha y la energía de ligadura del excitón, valores que oscilan en la literatura en el rango de los meV, consideramos que el resultado cuantitativo del proceso de simulación de espectros es muy bueno.

Desde el punto de vista cualitativo, se observa que el lado derecho del perfil simulado (el de mayor longitud de onda) cae abruptamente a diferencia del resultado experimental. Para corregir este comportamiento se sugiere considerar una distribución de anchos de pozo (o distribución de islas) dentro de un área de influencia del excitón definido por su radio excitónico. De esta manera el peso del perfil definido en la ecuación (45) de la Tesis de Maestría:

$$I(h\nu)\alpha(h\nu - E_{exc})^{1/2} \exp\left(-\frac{h\nu - E_{exc}}{kT}\right)$$

no estaría dado por la densidad de islas en la interfase (como se describió anteriormente) sino por una distribución estadística de defectos dentro del radio excitónico. Esta distribución sería tipo Gaussiana para el caso de islas no correlacionada con otro tipo de isla, o tipo Lorentziana para islas correlacionadas. Esto último se basa en la descripción estadística de fenómenos correlacionados y no correlacionados.

5. CONCLUSIONES

5.1. El modelo de pozo rectangular describe el sistema en la aproximación de gap directo e interfase abrupta.

5.2. El programa de cálculo desarrollado en este trabajo permite calcular los valores propios de energía y función de onda, así como la simulación de espectros de fotoluminencia para diversos materiales semiconductores.

5.3. Los resultados obtenidos tienen buena coincidencia con los resultados reportados, tanto teóricos como experimentales.

5.4. Considerar el cambio en la masa efectiva de los portadores a través de la interface permite realizar una pequeña corrección en los cálculos.

5.5. Es importante evaluar cuantitativamente los procesos de crecimiento de las películas empleadas en el desarrollo de dispositivos, pues su morfología final influye sobre la respuesta óptica, ej: el espectro de fotoluminencia.

5.6. Por lo anterior, los espectros de fotoluminiscencia pueden ser empleados como método indirecto de la rugosidad de las interfaces.

5.7. El hecho de que la función de onda penetre las barreras es muy importante, pues de la longitud de penetración de la densidad de probabilidad $|\phi|^2$ y de la separación entre pozos vecinos, depende la respuesta de la heteroestructura como superred ó multipozo.

6. BIBLIOGRAFÍA

- [1] G.A. Mendoza, Tesis Doctoral U. Nacional Bogotá (2001).
- [2] B. R. Nag, "Physics of quantum Devices", Kluwer Academic Publishers (Dordrecht The Netherlands 2000).
- [3] J. H. Davies, "The Physical of Low Dimensional Semiconductors", Cambridge University Press, Cambridge (1998).