

EFFECTOS DE LA PRESIÓN HIDROSTÁTICA SOBRE LA RECOMBINACIÓN ELECTRÓN-HUECO EN POZOS CUÁNTICOS DE GaAs-(Ga,Al)As

M. Lara-Quintero¹, Gregory Pujol Sierra¹, O. Cepeda-Giraldo¹, J. G. Bedoya², y C. A. Duque³

¹ *Depto. de Ciencia Básica, Universidad de Medellín, AA 1983, Medellín, Colombia*

² *Politécnico Colombiano JIC, Carrera 48 N° 7-151, Medellín-Colombia*

³ *Instituto de Física, Universidad de Antioquia, AA 1226, Medellín, Colombia*

RESUMEN

Usando la aproximación de masa efectiva se ha calculado la energía para los primeros estados ligados de electrón y hueco en pozos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As bajo los efectos de presión atmosférica e hidrostática. Los resultados para la diferencia de energías del par electrón-hueco en función de la presión para diferentes anchos de pozo cuántico describen razonablemente bien los resultados experimentales del coeficiente de presión para la fotoluminiscencia en pozos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As.

I. Introducción

Estudios acerca del efecto de la presión hidrostática han probado ser de gran valor en el contexto de las propiedades ópticas de semiconductores y sus heteroestructuras [1-4]. Para una estructura determinada, la diferencia de energía entre las transiciones de tipo I y tipo II están relacionadas con presiones hidrostáticas externas de manera continua y reversible. El estudio de presión en heteroestructuras permite comprender las tasas de dispersión, las cuales juegan un papel importante en la relajación de portadores fotoexcitados y en mecanismos de transporte bajo campos intensos.

Dai et al [5], utilizando espectroscopía de transmisión fotomodulada, han investigado las transiciones en pozos cuánticos múltiples de GaAs/Al_xGa_{1-x}As en función de la presión hidrostática. Ellos observaron estructuras espectrales asociadas a transiciones tanto directas como indirectas y además notaron que los coeficientes de presión para las transiciones directas, derivadas del confinamiento de las subbandas en GaAs, están entre los coeficientes respectivos para GaAs y Ga_{1-x}Al_xAs.

Elabsy [6] ha estudiado los efectos del cruce Γ -X sobre los estados de mínima energía y de energías de enlace de los donadores confinados en pozos cuánticos de GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Oyoko et al [7] han calculado la dependencia con un esfuerzo uniaxial de la energía de enlace de impurezas donadoras poco profundas en puntos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As. Hallaron que la energía de enlace para diferentes posiciones de la impureza donadora a lo largo del eje de crecimiento de la estructura se incrementa no solo con la presión sino también con la aproximación de las impurezas al centro del pozo cuántico. Venkateswaran et al [8] han reportado la dependencia con la presión hidrostática de la energía de transición entre el primer estado de electrón y el primer estado de hueco en pozos cuánticos de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As a $T = 80$ K. Ellos han mostrado que la energía de transición muestra un comportamiento lineal para bajas presiones y que en el régimen de altas presiones el pico de la transición se desvía hacia energías menores.

El propósito del presente trabajo constituye en simular de manera teórica los resultados presentados por Venkateswaran et al [8]. En nuestro modelo usamos la aproximación de masa efectiva y tenemos en cuenta el cambio de masa en la barrera de potencial.

II. Marco teórico

En la aproximación de masa efectiva, el hamiltoniano para un electrón (o un hueco) en un pozo cuántico de GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs bajo el efecto de presión hidrostática (P) a una cierta temperatura (T), está dado por [6]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m_{w,b}^*(P,T)} \nabla \right) + V(z,P,T), \quad (1)$$

donde w y b indican las regiones del pozo y la barrera y $m_{w,b}^*(P,T)$ son las correspondientes masas efectivas [6]. $V(z, P, T)$ es el potencial que confina al electrón (o al hueco) en la región del pozo; está dado por [6]

$$V(z, P, T) = \begin{cases} V_0(P, T) & \text{para } |z| > L/2, \\ 0 & \text{para } |z| \leq L/2, \end{cases} \quad (2)$$

donde L es el ancho del pozo, el cual puede ser obtenido mediante el cambio fraccional en el volumen de la heteroestructura.

Las autofunciones para el hamiltoniano en la ecuación (1) están dadas por

$$\Psi(z) = \begin{cases} \exp(\beta z) & \text{para } z < -L/2, \\ \exp(\beta L/2) \cos(\eta z) / \cos(\eta L/2) & \text{para } |z| \leq L/2, \\ \exp(-\beta z) & \text{para } z > +L/2, \end{cases} \quad (3)$$

donde, las diferentes constantes y las correspondientes autoenergías (E_0) se obtienen garantizando la continuidad de la función de onda y su derivadas en las interfases.

El potencial de confinamiento, tanto para electrones como para huecos, está asociado con la diferencia entre las brechas prohibidas (Gap) del Ga_{1-x}Al_xAs y el GaAs, la cual en función de P y T está dada por

$$V_0(P, T) = Q_c \left[1.155 x + 0.37 x^2 + (0.8 - 1.3 x) \times 10^{-3} P \right] \text{ eV}, \quad (4)$$

donde $Q_c = 0.6$ en el caso de electrones y 0.4 para huecos y x es la concentración de aluminio en la región de la barrera.

La energía de transición entre el primer estado de electrón (e_1) y el primer estado de hueco (hh_1 para el hueco pesado y lh_1 para el hueco liviano) para el sistema electrón-hueco no correlacionado está dada por

$$E = E_{0-e_1} + E_{0-hh_1} + E_g, \quad (5)$$

para transiciones a estados de hueco pesado, y

$$E = E_{0-e_1} + E_{0-lh_1} + E_g \quad (6)$$

para transiciones a estados de hueco liviano. En las dos ecuaciones anteriores

$$E_g = \left[1.519 + 10.7 \times 10^{-3} P - 5.405 \times 10^{-4} \frac{T^2}{T + 204} \right] \text{ eV} \quad (7)$$

es la brecha de energía para el GaAs.

En la próxima sección se presentan los resultados para la dependencia con la presión de las energías de transición correspondientes a las ecuaciones (6) y (7) en pozos cuánticos de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As a T = 80 K.

III. Resultados y discusión

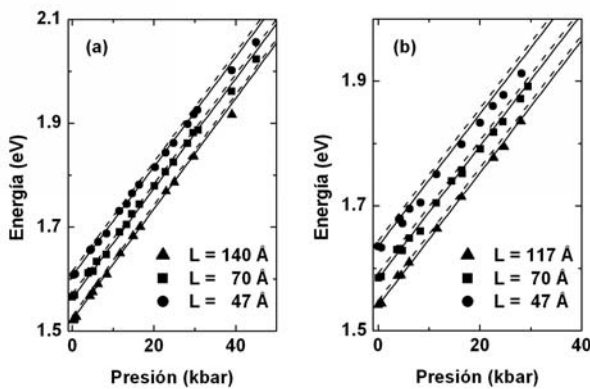


Figura 1. Dependencia con la presión hidrostática de la energía de transición entre los primeros estados de electrón y hueco en pozos cuánticos de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As a T = 80 K. En (a) los resultados son para transiciones a estados de hueco pesado y en (b) transiciones a estados de hueco liviano. Las líneas punteadas corresponden al par e-h no correlacionado. Las líneas continuas se obtienen al introducir la corrección excitónica [10]. Los símbolos corresponden a los resultados experimentales de Venkateswaran et al [8].

En la figura 1 se presenta la energía del pico de fotoluminiscencia para transiciones electrón-hueco en pozos cuánticos de GaAs-Ga_{0.7}Al_{0.3}As a T = 80 K en función de la presión hidrostática para diferentes anchos de la heteroestructura. La dependencia con la presión de los diferentes parámetros involucrados en el cálculo es como sigue: 1) El gap del GaAs pasa de 1506 meV a P = 0 hasta 2041 meV a P = 50 kbar, con un coeficiente de presión de 10.7 meV/kbar, 2) desde 0 hasta 50 kbar la masa efectiva de los electrones crece en 30%, lo cual conduce a un decrecimiento en la energía del primer nivel de pozo para el electrón, 3) en el mismo rango de presiones, la barrera de potencial para electrones pasa de 227 meV a 240 meV. El efecto combinado del aumento de la masa de electrón y el aumento de la altura de barrera hace que la energía para el primer nivel de pozo para electrones permanezca esencialmente constante. En dicho intervalo de presiones el nivel e1 pasa de 18 meV a 15 meV. El efecto de reducción de las dimensiones de la estructura es del orden de 2%, lo cual significa variaciones en energía inferiores a 1 meV. Finalmente, 4) la masa efectiva para huecos sufre un incremento del 2.5% y la altura de la barrera para estos también crece solo en 9 meV. Estos dos efectos combinados implican un comportamiento casi constante de la energía de los estados hh1 y lh1 con la presión. De lo anterior, claramente se concluye que el coeficiente de presión para la energía del pico e1-hh1 y/o e1-lh1 está fundamentalmente asociado al coeficiente de presión del Gap del GaAs.

Es importante destacar que para presiones mayores que 13.5 kbar se presenta el cruce Γ -X para las bandas del $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$. Esto se traduce en una perturbación sobre la altura de la barrera de potencial que confina a los electrones generando una disminución en la misma. Su efecto se refleja en los resultados experimentales como una desviación hacia energías menores con relación al comportamiento lineal en el pico de la recombinación electrón-hueco. Un cálculo más detallado podría incluir los efectos de la mezcla Γ -X para la barrera que confina a los electrones.

IV. Conclusiones

Usando la aproximación de masa efectiva se ha calculado la energía para los primeros estados ligados de electrón y hueco en pozos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As bajo los efectos de presión atmosférica e hidrostática. Los resultados incluyen los efectos de cambio de masa para electrón y hueco en la región de la barrera. Las energías de transición obtenidas describen razonablemente bien los resultados experimentales del coeficiente de presión para la fotoluminiscencia en pozos cuánticos de GaAs-(Ga,Al)As [8]. De los resultados obtenidos, claramente se concluye que el coeficiente de presión para la energía de transición entre estados de electrón y hueco está fundamentalmente asociado al coeficiente de presión del Gap del GaAs . Adicionalmente, se destaca que una descripción adecuada a altas presiones requiere de la inclusión de mezcla de bandas de conducción lo que permitiría obtener un coeficiente de presión menor.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el CODI-Universidad de Antioquia, Vicerrectoría de Investigación-Universidad de Medellín (Proyecto 07000000382) y Colciencias (Proyecto 1115-05-11502).

References

- [1]. B. A. Wilson, IEEE J. Quantum Electron. **24**, 1763 (1988).
- [2]. S. Adachi. *GaAs and Related Materials: Bulk Semiconducting and Superlattice Properties* (Singapore: World Scientific, 1994).
- [3]. M. Chandrasekhar and H. R. Chandrasekhar, High Pressure Res. **9**, 57 (1992).
- [4]. M. Chandrasekhar and H. R. Chandrasekhar. Phil. Mag. B **70**, 369 (1994).
- [5]. N. Dai, D. Huang, X. Q. Liu, Y. M. Mu, W. Lu, and S. C. Shen, Phys. Rev. B **57**, 6566 (1998).
- [6]. A. M. Elabsy, Superlatt. Microstruct. **14**, 65 (1993); A. M. Elabsy, J. Phys.: Condens. Matter. **6**, 10025 (1994).
- [7]. H. O. Oyoko, C. A. Duque, and N. Porrás-Montenegro, J. Appl. Phys. **90**, 819 (2001).
- [8]. U. Venkateswaran, M. Chandrasekhar, H. R. Chandrasekhar, B. A. Vojak, F. A. Chambers, and J. M. Meese, Phys. Rev. B **33**, 8416 (1986).
- [9]. P. Y. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).
- [10]. R. L. Greene and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **31**, 6498 (1985).