

Analise óptica e ajuste teórico da interação elétron-buraco em poço quântico de GaAs com barreiras de AlGaAs.

Optical analysis and theoretical adjust of the electron-hole interaction in GaAs/AlGaAs quantum well

RESUMO

João Vitor de Souza Paz
j.vitor-quimica@outlook.com
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Apucarana, Paraná,
Brasil

Leonardo Dias de Souza
leonardod@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Apucarana, Paraná,
Brasil

Jesus Maria Herazo Warnes
jesuswarnes@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal
do Paraná, Apucarana, Paraná,
Brasil

Neste trabalho utilizamos a técnica de fotoluminescência para estudar a emissão de radiação de um poço quântico de GaAs com barreiras de AlGaAs crescido através da técnica de Epitaxia por Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy* – MBE). Através da análise dos espectros de fotoluminescência buscamos identificar os canais de recombinação presentes nesta nanoestrutura. A emissão foi estudada em função da temperatura da amostra, em um intervalo de 8K a 300K. Com os dados obtidos pudemos identificar quatro canais de recombinação eletrônica. O canal de recombinação mais intenso foi observado até temperaturas próximas a temperatura ambiente, assim, nesta primeira etapa concentramos nossos esforços em entender a origem deste mecanismo de emissão e analisar a concordância entre nossos resultados e o ajuste fornecido por modelos teóricos existentes que descrevem a variação da energia da emissão de radiação em função da temperatura. Os modelos utilizados nos ajustes foram os modelos de Varshini, Viña e Passler. Com os dados obtidos através destes modelos verificamos um bom acordo de nossos resultados quando comparados com resultados da literatura.

PALAVRAS-CHAVE: Poço Quântico. Fotoluminescência. Espectroscopia.

Recebido: 19 ago. 2019.

Aprovado: 01 out. 2019.

Direito autoral: Este trabalho está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição 4.0 Internacional.



ABSTRACT

In this work we use the photoluminescence technique (PL) to study a AlGaAs/GaAs quantum well, grown by Molecular Beam Epitaxy - MBE. Through the analysis of the photoluminescence spectra we seek to identify the recombination channels present in this nanostructure. The PL emission was performed as a function of the sample temperature in a range from 8K to 300K. With the data analysis we could identify four electronic recombination channels. The most intense recombination channel was observed until room temperature, so we concentrated our efforts on understanding the origin of this emission mechanism as well as to compare the agreement between our results and the adjustment provided by existing theoretical models that describe the variation of the PL emission energy as a function of temperature. The models used in the adjustments were the Varshini, Viña and Passler models. With the data obtained through these models we verified a good agreement of our results when compared with results of the literature.

KEYWORDS: Quantum Well. Photoluminescence. Spectroscopy.

INTRODUÇÃO

Na natureza os átomos de determinadas substâncias podem ou não estar dispostos de forma organizada. Quando existe determinada organização dos átomos tem-se a chamada estrutura cristalina. O arranjo espacial dos átomos em uma determinada substância é de grande importância pelo fato de que um mesmo elemento pode apresentar características físicas diferentes, como por exemplo a grafita (constituída por átomos de carbono) não possui estrutura cristalina, já o diamante também é constituído apenas de átomos de carbono, porém seu arranjo espacial fornece estrutura cristalina e características físicas bem distintas da grafita [1]. Com o avanço da ciência e o controle sobre os métodos de crescimento e dopagem de matérias a níveis atômicos a ciência de semicondutores teve um grande avanço e rapidamente mudou o cenário tecnológico na metade do século XX.

Inicialmente estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade tipo poço quântico (*Quantum Well* – QW) formaram a base para a indústria eletro-óptica, porém com os avanços nas técnicas e no controle do crescimento de estruturas semicondutoras de baixa dimensionalidade como anéis e pontos quânticos fez com que o estudo de QWs e suas aplicações se tornassem menos atraente. Estruturas tipo ponto quântico e anéis quânticos permitiram projetar sistemas com estruturas de bandas com grande potencial de aplicação em eletrônica, fônica [2 – 4] bem como de grande interesse do ponto de vista acadêmico. Usualmente sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade são aplicados como mídia ativa de dispositivos emissores de luz como lasers e LEDs, dispositivos detectores de luz [5 – 9] e diodos em geral. No entanto, o estudo de nanoestruturas tipo QW vem ganhando destaque devido ao aprimoramento das técnicas de crescimento e incorporação de novos materiais semicondutores [10] e a possibilidade de crescimento de novas estruturas que melhoram a eficiência elétrica e óptica de dispositivos a base de QWs, assim tornando-as boas candidatas para a aplicações como por exemplo em lasers emitindo na região de menor atenuação de fibras ópticas (1.3 – 1.5 μm).

Neste trabalho apresentamos um estudo das propriedades ópticas de um poço quântico de GaAs com barreiras de AlGaAs feito através da técnica de fotoluminescência em função da temperatura bem como um estudo dos modelos de ajustes adequados para a interpretação dos resultados obtidos. Na próxima seção apresentaremos a amostra estudada e as condições experimentais utilizadas, os modelos teóricos utilizados nos ajustes dos dados e por fim os resultados obtidos.

AMOSTRA E PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL

A amostra analisada neste trabalho foi crescida através da técnica de MBE, sobre um substrato semi-isolante de GaAs (001) seguido por uma camada buffer de 1 μm de GaAs. Na sequência foi crescida uma super-rede com 30 repetições de $[\text{Al}_{0,18}\text{Ga}_{0,82}\text{As}/\text{GaAs} (50 \text{ \AA})]$, uma camada de 20 $\text{\AA}$ de AlAs e duas barreiras de 500 $\text{\AA}$ de espessura de $\text{Al}_{0,18}\text{Ga}_{0,82}\text{As}$ confinando uma camada de GaAs de 150 $\text{\AA}$. Uma camada final de AlAs de 20 $\text{\AA}$ e uma Cap Layer de GaAs com 50 $\text{\AA}$ fecha a estrutura.

A amostra foi caracterizada no Laboratório de Nanoestruturas do Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos através da técnica de fotoluminescência na faixa de temperatura de 8 K a 300 K com excitação proveniente de um laser de estado sólido emitindo em 440 nm e 6 μ W de potência. A detecção foi feita utilizando um espectrômetro Andor de 0,75 metros e uma CCD de InGaAs.

MODELOS DE AJUSTE

Ao trabalharmos com semicondutores existem diversos modelos para ajuste da energia de GAP em função da temperatura, os modelos mais conhecidos e utilizados são Varshini, Viña e Passler.

O modelo de Varshini foi um dos primeiros modelos a ser desenvolvido e um dos mais simples, ele é dado pela seguinte equação [11]:

$$E_g = E_g(0) - \alpha_{Var} \frac{T^2}{\beta + T}, \quad (1)$$

onde $E_g(0)$ é a energia de Gap do material há 0K, T a temperatura e os parâmetros α_{Var} (meV/K_b) e β (K) são parâmetros que vão ser determinados após fazer o ajuste da curva de energia do *gap* em função da temperatura[11].

O próximo modelo é o de Viña que é um modelo semi empírico, onde tem-se por base a distribuição estatística de Bose-Einstein [11]. A distribuição de Bose-Einstein é um modelo da mecânica estatística quântica que descreve a interação de partículas idênticas que não obedecem ao princípio da exclusão de Pauli [12].

A equação utilizada no modelo de Vinã é dada por:

$$E_g = E_B - a_B \left[1 + \frac{2}{\exp\left(\frac{\theta_B}{T}\right) - 1} \right]. \quad (2)$$

Neste modelo a quantidade $E_B - a_B$ representa a energia de GAP do material a zero Kelvin, sendo que o a_B representa a intensidade da interação elétron-fônon, θ_B é a energia média dos fônons com dependência de temperatura $\theta_B = \hbar\omega/K_b$ e T a temperatura do sistema [11].

O modelo de Passler também é um modelo empírico que foi desenvolvido com a finalidade de corrigir os erros e imprecisões dos modelos anteriores principalmente na região de baixas temperaturas [11].

A equação do modelo de Passler é:

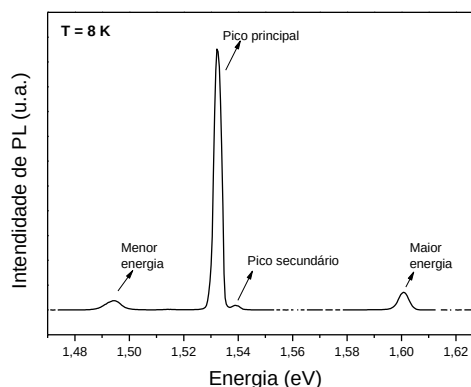
$$E_g(T) = E_g(T=0) - \frac{\alpha\theta}{2} \left[\sqrt[2]{1 + \left[\frac{2T}{\theta}\right]^P} - 1 \right]. \quad (3)$$

Sendo que α é um parâmetro não fixo que tem que aparece nas altas temperaturas que tem relação com a entropia do GAP, o θ é o mesmo parâmetro que aparece no modelo de Vina, P é o parâmetro que ajusta a curva da expressão e T a temperatura do sistema [11].

RESULTADOS

Na figura 1 apresentamos ver o espectro de fotoluminescência obtido a temperatura de 8 K, com potência de excitação de 6 μ W.

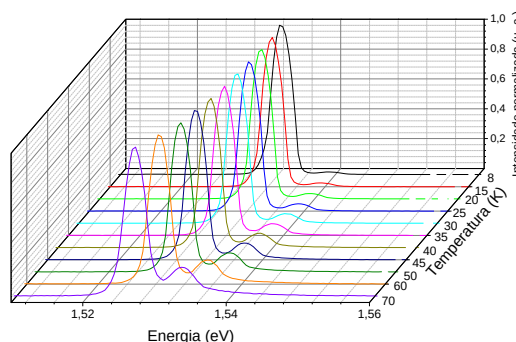
Figura 1 – Espectro de fotoluminescência obtido a temperatura de 8K.



Fonte: Autoria própria (2019).

Neste espectro podemos perceber a presença de 4 picos de energia apresentados durante as análises. O objeto deste estudo é o pico principal (pico de maior intensidade, com energia próxima a 1,53 eV). Esse pico principal é o resultado da recombinação elétron-buraco dentro de um poço quântico, onde o material é excitado com radiação de energia maior que o gap do material que desejamos analisar. Dessa forma, a excitação óptica promove um elétron da banda de valência para a banda de condução do semiconductor e ao retornar à banda de valência é emitida radiação (libera um fóton). Foram realizadas diversas medidas da energia emitida pela amostra em função da temperatura que a mesma está sujeita (figura 2).

Figura 2 – Espectros de fotoluminescência normalizada em função da temperatura para a amostra estudada.

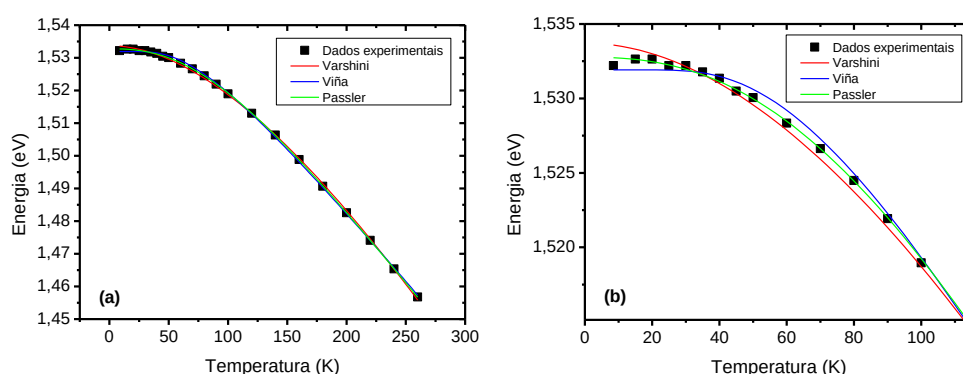


Fonte: Autoria própria (2019).

Analizando o pico de maior intensidade podemos ver que com o aumento da temperatura a energia de recombinação do éxciton tem uma forte dependência. A partir dos dados apresentados na figura 2 e dos espectros obtidos em temperaturas mais elevadas conseguimos seguir o pico de maior intensidade até aproximadamente 280 K. A partir da posição em função da temperatura para este

pico utilizamos os modelos de ajuste de Varshini, Viña e Passler para realizar um comparativo entre os métodos de ajuste, como apresentado na figura 3. Podemos observar na figura 3 que em baixas temperaturas temos um comportamento não linear da energia em função da temperatura. Nesta região podemos observar que o comportamento de tal variação segue uma característica de “S” invertido, onde a energia aumenta logo após o primeiro ponto de medição e em seguida tem uma queda conforme a temperatura aumenta. Para temperaturas mais elevadas passamos a observar um comportamento aproximadamente linear.

Figura 3 – (a) Variação do gap em função da temperatura e comparativo entre os ajustes fornecidos pelos modelos de Varshini, Viña e Passler para o pico principal e (b) ampliação da região de baixas temperaturas.



Fonte: Autoria própria (2019).

A realizar o ajuste com o modelo de Varshini os parâmetros α_{Var} , β e E_g ficaram livres para se ajustar conforme o processo de iteração é realizado. Com esse ajuste foi possível obter um desvio médio quadrático (R^2) de 0,99938, $\alpha_{Var} = 7,9379E-7$, $\beta = 429,0498$ e $E_g = 1,5337$ eV.

No ajuste pelo método de Viña os parâmetros E_B , a_B e θ_B não são fixos e são obtidos através de iterações até obter o melhor ajuste da curva, porém nesse método vale ressaltar que foi utilizado um valor inicial para cada parâmetro para melhor realização do ajuste, o valor arbitrário para as três variáveis foi 1. Após o ajuste os valores obtidos foram: R^2 de 0,995, $E_B = 1,58015$, $a_B = 0,04823$, $\theta_B = 215,8105$, vale lembrar que a energia de GAP do material a zero Kelvin é $E_B - a_B = 1,532$ eV.

No modelo de Passler os parâmetros $E_g(T = 0)$, α , θ e P não são fixos, porém para realizar um melhor ajuste é atribuído um valor arbitrário no $E_g(T = 0)$ onde o valor escolhido foi 1. Os valores obtidos foram: $\alpha = 4,736E - 4$, $\theta = 223,8730$, $P = 2,4788$, $E_g(T = 0) = 1,5327$ eV e um valor de $R^2 = 0,99994$. Os dados obtidos através do modelo de Passler e demais modelos estão compilados e apresentados na tabela 1.

Ao analisarmos a figura 4.b podemos ver o que modelo de Passler apresenta melhor concordância com os valores experimentais na região de baixas temperaturas, onde notamos uma característica de S invertido na curva. Esse melhor ajuste apresentado pelo mesmo é proveniente do parâmetro P que tem por objetivo fazer as correções na inclinação e variação da curva. Desse modo o modelo de Passler se mostra mais eficiente na descrição do comportamento da energia de emissão de fotoluminescência em função da temperatura. Quando

comparamos os valores dos nossos parâmetros obtidos no ajuste através do modelo de Passler com valores encontrados na literatura notamos uma boa concordância dos mesmos.

Tabela 1 – Parâmetros obtidos através dos ajustes realizados.

Modelo	Parâmetro	Valores obtido	Valores da literatura [13]
Varshini	α_{Var}	7,9379E-7	
	β	429,0498	
	E_g	1,5337	
Viña	E_B	1,58015	
	a_B	0,04823	
	θ_B	215,8105	
	$E_g = E_B - a_B$	1,532	
Passler	α	$4,736E - 4$	$2,8E-4 - 3,7E-4$
	θ	223,8730	150 – 200
	P	2,4788	2,55 – 2,8
	E_g	1,5327	1,5315

Fonte: Autoria própria (2019).

CONCLUSÃO

No presente trabalho realizou-se a análise de uma amostra semicondutora de poço quântico através da técnica de fotoluminescência, obtendo valores para energia de GAP da mesma em diferentes temperaturas. Os ajustes realizados através dos modelos de Varshini, Viña e Passler demonstraram um bom acordo com os dados experimentais para altas temperaturas onde ambos obtiveram valores da energia de GAP do material há 0K condizentes com valores da literatura de 1,5325 eV. Ao compararmos os três métodos pode-se destacar que Passler apresentou melhor ajuste em regiões de baixa temperatura, onde temos uma região de difícil ajuste pois apresenta um comportamento denominado de “S” invertido que é resultado das interações elétricas da estrutura do semicondutor e por estar em baixas temperaturas tem-se pouca influência da mesma na vibração da rede cristalina, enquanto os outros dois métodos apresentaram uma pequena divergência da curva de ajuste com a curva obtida através de dados experimentais.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao CNPq pelo auxílio financeiro e aos professores Marcio Daldin e Gilmar Eugenio pela disponibilização do laboratório utilizado para obtenção dos resultados.

BIBLIOGRAFIA:

- [1] MELLO, H. A.; INTRATOR, E. **Dispositivos semicondutores**. 4ª edição. Rio de Janeiro: Livros técnicos e científicos editora, 1980.
- [2] BIMBERG, D. **Semiconductor Nanostructures**, Berlin Heidelberg, Springer-Verlag, 2008.
- [3] AWSHALOM, D. D.; LOSS, D.; SAMARTH, N. **Semiconductor Spintronics and Quantum Computation**, Berlin, Springer-Verlag, 2002.
- [4] MARTI, A.; ANTOLÍN, E.; STANLEY, C. R.; FARMER, C. D.; LÓPEZ, N.; DÍAZ, P.; CÁNOVAS, E.; LINARES, P. G.; LUQUE, A. Production of Photocurrent due to Intermediate-to-Conduction-Band Transitions: A Demonstration of a key Operating Principle of the Intermediate-Band Solar Cell. *Physics*, n.247701, dez. 2006
- [5] LEWIS, R. B.; BEATON, D. A.; LU, X.; TIEDJE, T. GaAs_{1-x}Bi_x light emitting diodes. *Journal of Crystal Growth*, v. 311, p. 1872-1875, mar. 2009.
- [6] TOMINAGA, Y.; OE, K.; YOSHIMOTO, M. Low temperature dependence of oscillation wavelength in GaAs_{1-x}Bi_x laser by Photo-Pumping. *Applied Physics Express*, v.3, n.6, 2010.
- [7] S. J. Sweeney, WO patent 2010/149978 (2010).
- [8] BRODERICK, M.; USMAN, M.; SWEENEY, S. J.; O'REILLY, E. P.; Band engineering in dilute nitride and bismide semiconductor laser. *Semiconductor Science and technology*, v. 27, n. 9, Agosto 2012.
- [9] FAN, D.; ZENG, Z.; HU, X.; DOROGAN, V. G.; LI, C.; BENAMARA, M.; HAWKRIDGE, M. E.; MAZUR, Y. I.; Yu, S. Q.; JOHNSON, S. R.; WANG, Z. M.; SALAMO, G. J. Molecular beam epitaxy growth of GaAsBi/GaAs/AlGaAs separate confinement heterostructures. *Applied Physics Express*, v. 101, n.181103, outubro 2012.
- [10] SOUZA, L. D. de. **Crescimento, caracterizações estrutural e óptica de algumas nanoestruturas semicondutoras**. 2014. 111f. Tese (Doutorado em física) – instituto de física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2014.
- [11] LOPES, E.M. **Estudo das propriedades ópticas da super-rede InGaAs/InGaAlAs: Si através da técnica de fotoluminescência**. 2005. 95f. Tese (Mestrado em Física) – Departamento de Física, Universidade estadual de Londrina, Londrina, 2005.
- [12] EISBERG, R.; RESNICK, R. **Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos e Partículas**. 9ª edição. Rio de Janeiro: Editora Campus, 1994.
- [13] MORAIS, R. O.; DIAS, I.F.L.; SILVA, M.A.T.; CESAR, D.F.; DUARTE, J.L.; LOURENÇO, S.A.; LAURETO, E.; SILVA, E. C. F. da; QUIVY, A. A. **Effects of confinement on the electron-phonon interaction in Al_{0.18}Ga_{0.82}As/GaAs quantum wells**. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 21, p. 155601, março.2009.