

# Estructuras semiconductoras cuasi bi-dimensionales caracterizadas por su radiación entre pares donador-aceptor: Aplicación a GaAs

A. Juárez, Dpto. de Física del Estado Sólido, Universidad Autónoma de Puebla, México

A. Zehe, Departamento de Física, Universidad Técnica de Dresde, República Democrática Alemana

## RESUMEN

---

En este trabajo presentamos un cálculo de la transición entre pares donador-aceptor (PDA) en una estructura cuasi bidimensional. En estas estructuras, la función de distribución de PDA tiene modificaciones originando característicos comportamientos en la forma de línea, que aquí son analizados bajo el régimen de excitación continua y pulsada. Como resultado general se observan discontinuidades en la forma de línea, consecuencia de la geometría analizada, así como corrimientos de pico de emisión principal hacia la región de más altas energías.

La explicación a esto radica en el mayor número de pares cercanos calculados aquí. Aplicamos los resultados al GaAs. A partir de nuestro análisis sería posible conocer la anchura de películas delgadas sobre la base de sus espectros fotoluminiscentes.

## ABSTRACT

---

An analysis of the Donor-Acceptor-Pair (DAP) transition in quasi two-dimensional structures is made, calculating essentially the pair distribution function. Remarkable modifications in comparison to the bulk behaviour act on the emission line shape which is analyzed in both the steady state and pulsed excitation regime. As main results, jumps in the emission band at

---

A. Juárez recibe apoyo financiero de Conacyt y Sep., México en sus estudios doctorales en la Universidad Técnica de Dresden, R.D.A.

photon energies corresponding to characteristic measures of the multithin-film structure are found as well as peak energy blue shifts. The latter is explained by the fact of a higher number of close pairs calculated for this type of structure. The analysis involves GaAs and provides information on the spacing of doped thin films in an otherwise intrinsic bulk.

## I N T R O D U C C I Ó N

---

Sistemas de baja dimensionalidad han sido estudiados en los últimos años /1,2/. El desarrollo alcanzado por métodos como la Epitaxia por Haces Moleculares (MBE), ha permitido la obtención de estructuras al nivel de monocapas atómicas. Al mismo tiempo, el control en la cantidad y el tipo de dopante de esas películas delgadas determina también la eficiencia de los dispositivos fabricados /3/. Mediante MBE se han crecido películas de GaAs, GaAlAs, InP, Si,  $\text{CaF}_2$ ,  $\text{CoSi}_2$  y otros materiales, las cuales han sido objeto de diversos estudios recientes bajo condiciones experimentales que incluyen agregación de impurezas /4/, aplicación de campos eléctricos y magnéticos /5/, presión hidrostática /6/, campos de temperatura /7/ y diversos modos de excitación /7,8/.

En lo fundamental, la fotoluminiscencia y la espectroscopía por fotoexcitación han sido las técnicas más apropiadas para realizar estos estudios /1-8/.

Nuevos tipos de estructuras se han fabricado mediante MBE y MO-CVD. Un ejemplo de ello lo representan las estructuras nipi que presentan propiedades físicas variables. Los primeros trabajos en este campo datan de los años setenta y fueron propuestos inicialmente por DOEHLER /9/, y en forma más general por ESAKI y TSU /10/.

Numerosos trabajos tratan sobre la luminiscencia de estructuras cuánticas formadas por barreras periódicas. Las transiciones excitónicas, en estas estructuras han sido estudiadas e identificadas /11,12/. Transiciones banda-impureza también han sido estudiadas /11/.

En contraste, la transición entre Pares Donador-Aceptor (PDA), presenta dificultades para su identificación ya que en estos dispositivos cuánticos, los niveles energéticos de las bandas de conducción y de valencia así como de las impurezas, no pueden ser establecidas con precisión . /8/

De las diferentes transiciones radiativas en semiconductores, la transición entre PDA tiene la característica de depender de la distribución local de impurezas aceptoras y donadoras y de llevar en su forma de línea, detalles de la geometría de la red /13/. Por lo tanto, el estudio de su espectro de fotoluminiscencia, conociendo la distribución de impurezas nos permite conocer la estructura geométrica de las películas usadas.

En este trabajo proponemos una estructura geométrica que permitiría la identificación de esta transición. Nuestro modelo está formado por películas equidistantes ultradelgadas dopadas con impurezas aceptoras y donadoras separadas por películas intrínsecas. Bajo estas condiciones, la distribución de PDA estará presente en la forma de la línea y las transiciones posibles entre las diferentes capas dopadas.

Los avances experimentales de MBE y de MO-CVD hacen factible la reproducción de este modelo.

Como primer paso calculamos la modificación de la función de distribución de PDA introduciéndola posteriormente en la forma de línea de dicha transición. Analizamos los casos de excitación continua y pulsada aplicándolos a GaAs.

La transición entre PDA tiene probabilidad de ocurrir a distancias de separación de impurezas del orden de hasta dos veces el radio de Bohr de la impureza menos profunda.

De esta forma consideramos la máxima separación entre películas dopadas a ser 200 Å en el caso de GaAs.

Los numerosos trabajos de fotoluminiscencia llevados a cabo en superredes como estructuras "nipi" y heteroestructuras, contemplan diversos aspectos de las propiedades de los semiconductores, sin embargo, la transición entre PDA no se ha abordado en el contexto que aquí se propone. Por medio del estudio de esta transición, sería posible medir la separación de capas semiconductoras sobre la base de sus espectros de fotoluminiscencia.

## 1. FORMA DE LA LÍNEA DE LA TRANSICIÓN ENTRE PDA: CONSIDERACIONES GENERALES

La energía del fotón emitido en la transición entre PDA está dado en buena aproximación por

$$h\nu = E_g - (E_D + E_A) + \frac{e^2}{\epsilon R} \quad (1)$$

La forma de la línea de esta transición está determinada por la función de ocupación de pares,  $F(R)$ , la probabilidad de recombinación,  $P(R)$  y la función de distribución,  $G(R)$ .

$$I(R) \sim P(R) G(R) F(R) \quad (2)$$

La probabilidad de recombinación,  $P(R)$ , en la aproximación de masa efectiva es /14/

$$P(R) = P_0 \exp \left[ \frac{2R}{a_B} \right] \quad (3)$$

siendo  $P_0$  una constante y  $a_B$  el radio efectivo de Bohr de la impureza menos profunda. En el caso de GaAs,  $a_B$  es del orden de 100 Å.

F(R) depende de la sección eficaz de captura  $\sigma(R)$  y de la densidad de excitación externa, g /15/

$$F(R) = \left[ 1 + \frac{P(R)}{g v \sigma(R)} \right]^{-1} \quad (4)$$

siendo v la velocidad térmica de los electrones en la banda de conducción.

Para una distribución caótica en tres dimensiones de impurezas, G(R) tiene la forma /16/

$$G(R) = 4\pi NR^2 \exp \left[ -\frac{4}{3} \pi NR^3 \right], \quad (5)$$

donde N es la concentración de impurezas mayoritarias.

El análisis de la transición entre PDA para películas delgadas debe tomar en cuenta las siguientes consideraciones para P(R) y F(R): La probabilidad de recombinación P(R), está determinada por las funciones de onda de los portadores, las que a su vez contienen la constante dieléctrica, que por el nivel dopamiento no es cambiada, y la ec. (3) en buena aproximación, continúa siendo válida.

De la ec. (4) además de la dependencia en el parámetro de excitación externo, g, y en la sección eficaz de captura, la cual para una distribución dada de impurezas no se modifica, existe también la dependencia en la constante dieléctrica. Así, las mismas consideraciones para P(R) son válidas y la ec. (4) permanece invariable en nuestro análisis.

Puesto que depende del arreglo en la red, la función de distribución de PDA debe ser recalculada en la geometría bidimensional aquí considerada. Llamamos a esta función  $G_{2D}(R)$ .

## 2. CÁLCULO DE $G_{2D}(R)$

El modelo y la estructura considerada en este trabajo aparece en la figura 1.

Sea C(R) la probabilidad de encontrar a una distancia entre R y R+dR del ión de referencia (en este caso un donador), a un ión de signo opuesto:

$$C(R)dR = 2\pi NR dR + 2N\theta(R-d) 2\pi \rho d\rho \quad (6)$$

con N la densidad planar de impurezas mayoritarias y

$$\theta(R-d) = \begin{cases} 1 & \text{si } R \geq d \\ 0 & \text{si } R < d \end{cases}$$

Es fácil calcular la contribución  $d\rho$ :

$$d\rho = \frac{RdR}{(R^2-d^2)^{\frac{1}{2}}}$$

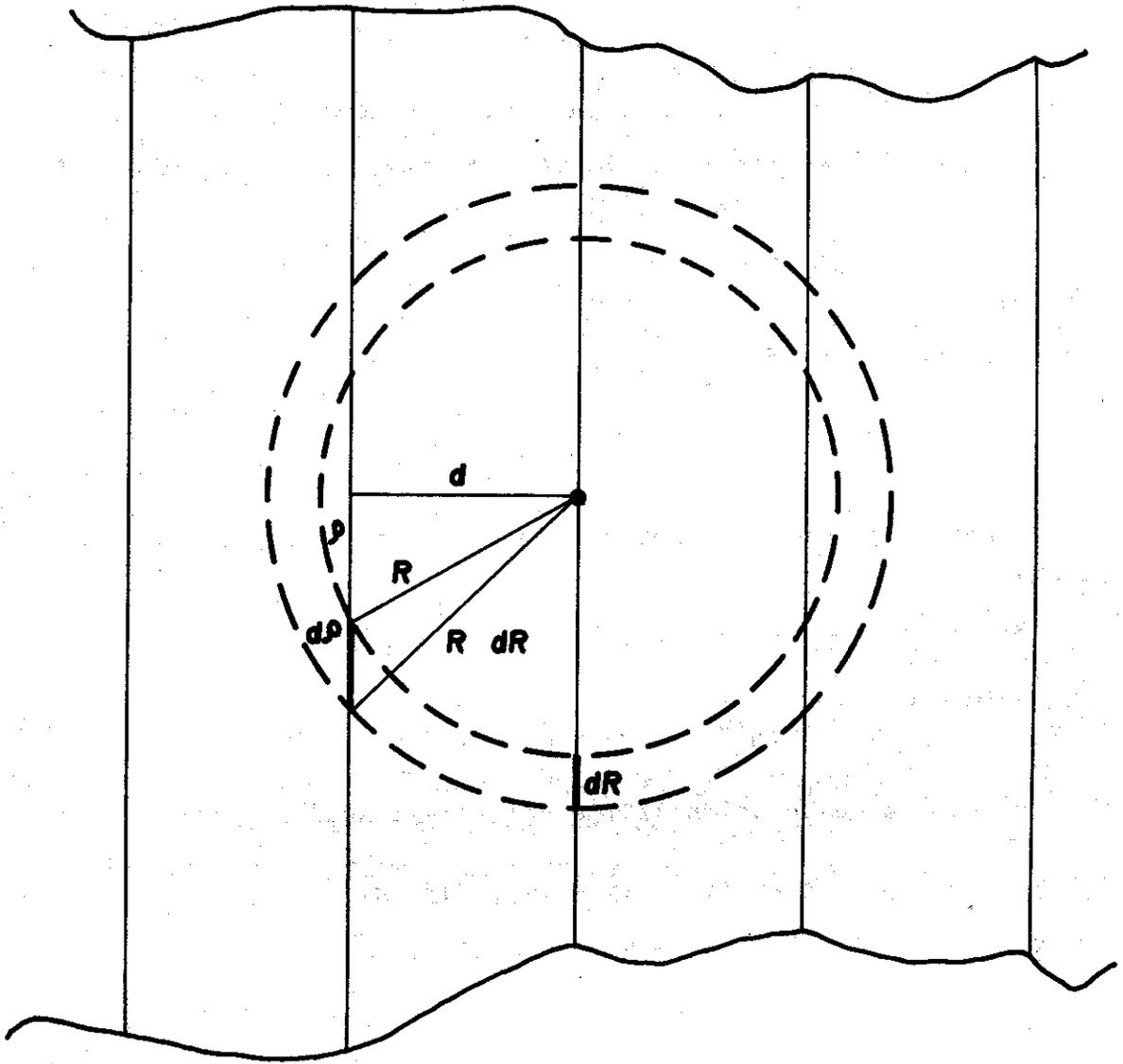


Figura 1. Modelo de multicapas. La separación entre las capas dopadas es  $d$ , que al mismo tiempo determina el grosor de las capas intrínsecas.  $R$  es la separación espacial entre un donador en el origen y el aceptor vecino.

por lo que

$$C(R)dR = 2 \pi NR [1+2\theta (R-d)]dR \quad (7)$$

En el caso más general al considerar  $n$  contribuciones tenemos

$$C_n(R)dR = 2 \pi NR[1+2\theta (R-d)+\dots+2\theta (R-nd)] \quad (8)$$

con

$$\theta(R-nd) = \begin{cases} 1 & \text{si } R \geq (n-1)d, \\ 0 & \text{si } R < (n-1)d, \end{cases} \quad n \geq 2.$$

Dos probabilidades se toman en cuenta en el cálculo de  $G_{2D}(R)$ .

- a) La probabilidad de encontrar un ión de signo contrario en un círculo con radio entre  $R$  y  $R+dR$ , i.e.:  $C(R)$
- b) La probabilidad de que no exista un ión de signo contrario en ese círculo.

La probabilidad b) está dada por:

$$\left[ 1 - \int_0^R G_{2D}(R') dR' \right] \quad (9)$$

La probabilidad de encontrar un ión del mismo signo en esa región es despreciada en este cálculo.

$G_{2D}(R)$  es el producto de a) y b):

$$G_{2D}(R) = C(R) \left[ 1 - \int_0^R G_{2D}(R') dR' \right]. \quad (10)$$

La solución a la ecuación (10) en el modelo aquí considerado es:

$$G_{2D}(R) = 2\pi NR \{ 1 + 2[\theta(R-d) + \dots + \theta(R-nd)] \} \cdot \exp \{ -2\pi N[\frac{1}{2}R^2 + \theta(R-d)(R^2-d^2) + \dots + \theta(R-nd)(R^2-n^2d^2)] \}. \quad (11)$$

En el límite  $d \rightarrow 0$  y un gran número de capas, se llega al resultado tridimensional para  $C(R)$ , lo que muestra la consistencia de nuestro cálculo.

Graficamos la ecuación (11) para diferentes valores  $d$  en la figura 2:  $d = 20 \text{ \AA}$ ,  $d = 40 \text{ \AA}$ ,  $d = 80 \text{ \AA}$ ,  $d = 200 \text{ \AA}$ . Con fines comparativos se grafica también el caso volumétrico.

Como fue mencionado anteriormente, para  $d$  pequeña la función de distribución  $G_{2D}(R)$  concordará con el caso volumétrico. Esto se hace evidente en la gráfica para  $d = 20 \text{ \AA}$ .

Para  $d = 40 \text{ \AA}$  y  $80 \text{ \AA}$ , los efectos de estructura son evidentes, se aprecian discontinuidades en  $G_{2D}(R)$  cuando comienza la contribución de nuevas capas.

Para  $d = 200 \text{ \AA}$  efectos de estructura aparecen a esa distancia. Puesto que la probabilidad de recombinación entre IDA decrece exponencialmente con la distancia, nuestra discusión subsiguiente será para distancias menores que  $200 \text{ \AA}$ .

De la figura 2 es evidente que existe un número mayor de pares cercanos. De esta distribución se esperan corrimientos del pico de emisión principal hacia la región de altas energías comparados con el caso volumétrico.

Para los cálculos se ha considerado una densidad volumétrica de carga  $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . La densidad bidimensional de carga se calculó arbitrariamente multiplicando esa cantidad por la correspondiente separación entre capas.

#### 4. ANÁLISIS DE FORMA DE LÍNEA EN EL MODELO CUASI BI-DIMENSIONAL

##### 4.1. EXCITACIÓN CONTINUA

Las ecuaciones (1), (3), (4) y (5) son válidas en este caso. Para el análisis bidimensional, en lugar de la ec. (5), consideramos la ec. (11).

La gráfica de la ec. (1) se muestra en la figura (3). De las múltiples curvas que hemos calculado, mostramos para su análisis, las que corresponden a  $d = 40, 80$  y  $200 \text{ \AA}$ , además de mostrar el caso volumétrico.

Los parámetros utilizados corresponden al GaAs asignándose al radio de Bohr de la impureza menos profunda el valor de  $100 \text{ \AA}$ .

Como en la figura 2, efectos de estructura aparecen para  $d = 40$  y  $80 \text{ \AA}$ . También es evidente un corrimiento del pico de emisión principal hacia la región de altas energías, que fluctúan entre 5 y 10 meV, comparado con el caso volumétrico.

Para  $d = 200 \text{ \AA}$ , debido a la modificación de la función de distribución de los PDA, ocurren corrimientos mayores hacia la región de altas energías del pico de emisión principal respecto al caso  $d = 40 \text{ \AA}$ ,  $d = 80 \text{ \AA}$  y volumétrico.

Completando el análisis, hemos calculado las variaciones en la forma de línea respecto a la densidad de excitación. La figura 4 muestra el resultado para  $g = 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ,  $g = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$  y  $g = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

Además de los defectos anteriormente señalados, se observan aumentos en la intensidad y corrimientos del pico de emisión principal de la transición entre PDA hacia altas energías.

##### 4.2. EXCITACIÓN POR PULSOS

Desde el punto de vista experimental, el análisis de la forma de línea en dependencia del tiempo, es un criterio importante para la identificación de la transición entre PDA. Un estudio detallado de esta transición en dependencia del tiempo para el volumen de un semiconductor fue realizado por Thomas et al. en los años sesenta /14/.

Bajo la condición de que, en la estructura cuasi-bidimensional considerada en este trabajo, la constante dieléctrica no tiene variaciones apreciables respecto al caso volumétrico, hacemos uso del formalismo descrito en la referencia /14/ introduciendo la función de distribución dada en la ec. (11), para calcular esa dependencia en el tiempo.

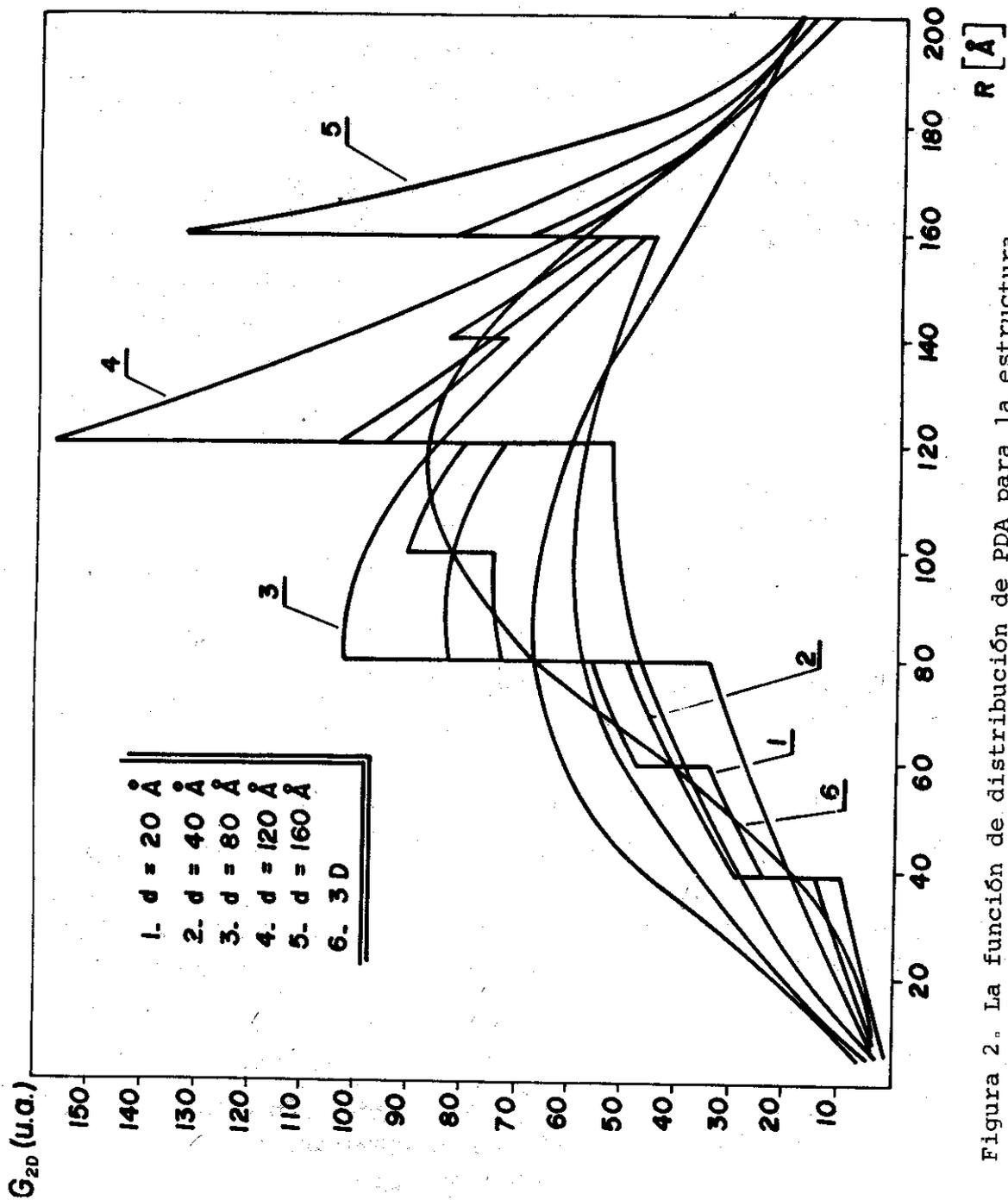


Figura 2. La función de distribución de PDA para la estructura de multicapas sobre la distancia de separación entre PDA, para la estructura de multicapas sobre la distancia de separación entre PDA, R. Las diferentes curvas corresponden a diferentes valores  $d$ , dado en la figura.

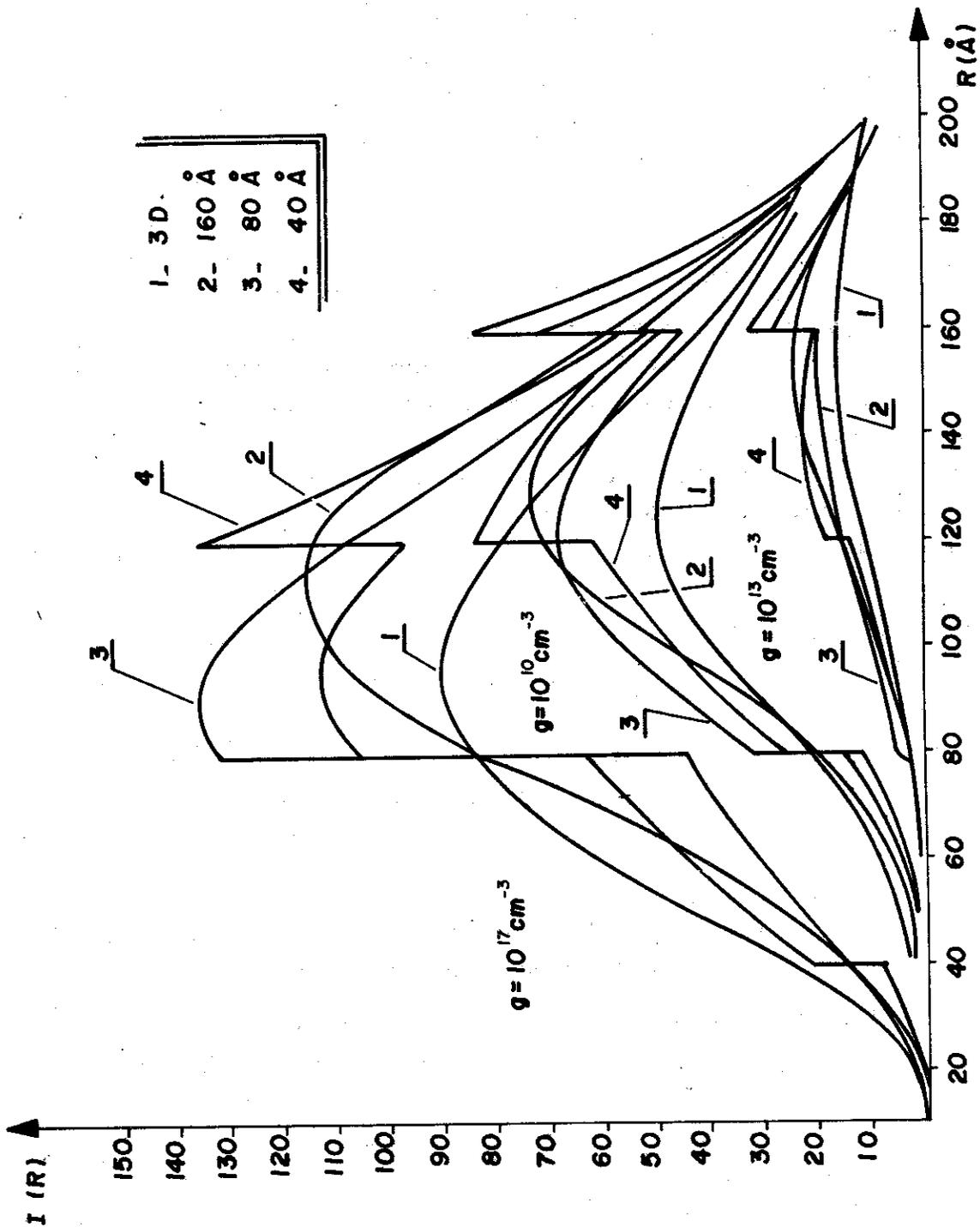


Figura 3. La banda de emisión principal de la radiación entre PDA en estructuras según Figura 1, sobre la distancia de separación entre PDA, R. Parámetro de los tres grupos de curvas para diferentes valores d es la razón de generación, g.

La figura 4 muestra la dependencia en el tiempo de la transición entre PDA. Al caso volumétrico se comparan los casos cuasi-bidimensionales con  $d = 40 \text{ \AA}$  y  $d = 200 \text{ \AA}$ . El característico corrimiento del pico de emisión principal hacia la región de bajas energías con tiempo creciente, se manifiesta en cada caso.

Se observa también una disminución de la distancia energética entre los picos del caso volumétrico y aquel con  $d = 200 \text{ \AA}$ .

Al igual que en casos anteriores, los efectos de estructura están presentes en las regiones donde nuevas contribuciones de las películas tienen lugar.

## 5. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

---

El estudio del modelo cuasi-bidimensional aquí presentado, resulta en modificaciones estructurales de la forma de línea. Considerando el hecho de que la constante dieléctrica en el modelo aquí considerado no tiene modificaciones respecto al caso volumétrico y que por lo tanto la función de ocupación de PDA y la probabilidad de recombinación no se ven afectadas, calculamos la nueva distribución de Pares Donador-Aceptor. Esta distribución depende de la estructura del modelo presentándose discontinuidades en las regiones donde nuevas capas dopadas contribuyen con PDA.

Realizamos los cálculos para diferentes separaciones entre capas dopadas, obteniendo como característica general un mayor número de Pares cercanos que en el caso volumétrico.

Lo anterior se traduciría en corrimientos del pico de emisión principal hacia la región de altas energías; resultado que encontramos en la figura 3 al graficar la forma de línea.

Una prueba de consistencia del presente modelo es la reproducción en el límite  $d \rightarrow 0$  del caso volumétrico, lo cual es posible haciendo pequeña la distancia de separación entre capas, como puede verse en la figura (2).

Propiedades de la estructura de capas aparecen en la figura (3), además de los corrimientos del pico de emisión principal hacia altas energías en el caso cuasi-bidimensional. Como se argumentó antes, eso es consecuencia de un mayor número de pares cercanos.

En la figura 4 calculamos la dependencia de la forma de la línea respecto a la densidad de excitación. Las siguientes características generales sobresalen de la figura: (i) La primera discontinuidad ocurre a un valor de  $R$  que corresponde a la separación  $d$  del sistema de capas. (ii) Con  $g$  creciente aumenta la intensidad de la discontinuidad y la posición energética permanece estable. (iii) La intensidad de la discontinuidad se satura para  $g$  grande.

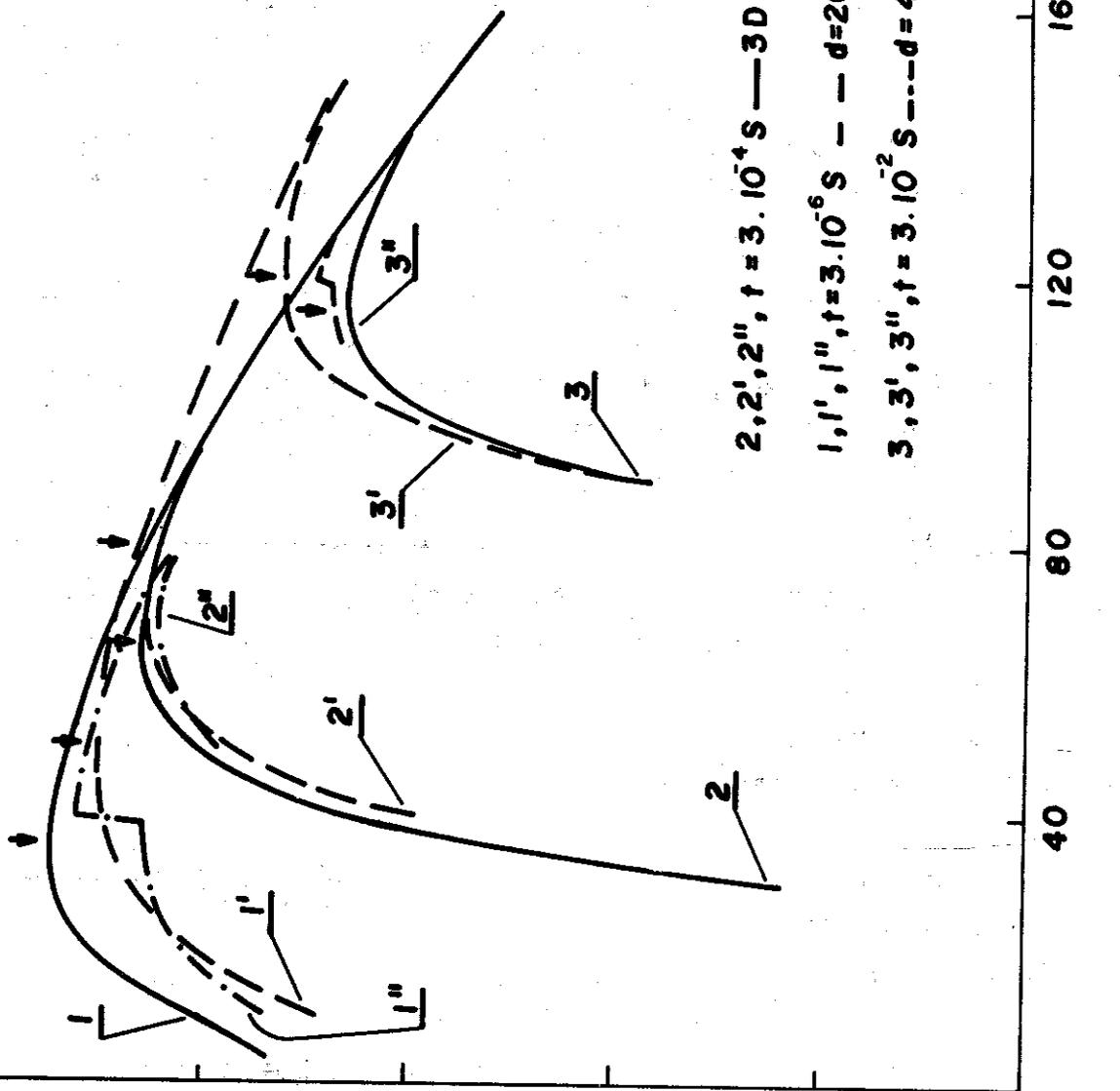


Figura 4. La banda de emisión principal de la radiación entre PDA en estructuras según Figura 1 resuelto en tiempo  $t$  después del pulso de excitación, sobre  $R$ , para el caso volumétrico y una estructura multicapa con  $d=200 \text{ \AA}$  y  $40 \text{ \AA}$ .

Los anteriores comportamientos permitirían la evaluación del grosor de películas intrínsecas delgadas una vez medido el espectro de recombinación. Usando este modelo sería posible observar efectos de recombinación entre PDA en diferentes capas que irían acompañados de tunelamiento cuántico ya observado en este tipo de estructuras.<sup>17</sup>

El análisis de la dependencia en el tiempo de la forma de línea tendría como objetivo la comprobación del tipo de transición de que se trata, aunque también se esperarían efectos de estructura en los espectros.

#### AGRADECIMIENTOS

---

Agradecemos discusiones valiosas con el Dr. G. Röpke, Universidad de Rostock, así como la ayuda prestada, en la preparación del manuscrito por la Lic. Dilcia de la Cruz, y Teresita Hernández, de la Facultad de Física de la Universidad de La Habana.

#### BIBLIOGRAFÍA

---

- /1/ Gossard, A.C.; J.H. English; P.M. Petroff; G.J. Dolan and S.J. Pearton  
IV. Int. Conf. on MBE, York, England, 1986 en J. Cryst. Growth)  
para publicarse.
- /2/ Zehe, A.; A. Juárez; G. Röpke  
Solid State Communic, para publicarse.
- /3/ Ploog, K.  
IV Int. Conf. on MBE, York, England, 1986 (a publicarse en J.  
Cryst. Growth).
- /4/ Bachrach, R.Z.; R.D. Bringans  
J. Vac. Sci. Technol. 31, 142 (1983).
- /5/ Petrov, A.; G. Weytena; X. Liu; J. Ralston and G. Wicks  
2. Int. Conf. on Superlattices...  
Goteborg, Sweden, 1986 (para publicarse en SL and Microstructures)
- /6/ Weinstein, B.A.; S.K. Hark; C. Marthcot and C.H. Perry  
2 Int. Conf. on Superlattices..., Goteborg, Sweden, 1986  
(para publicarse en Superlattices an Microstructures).
- /7/ Köhler, K.; D.H. Döhler; J.N. Miller and K. Ploog  
2 Int. Conf. on Superlattices...  
Goteborg, Sweden, 1986  
(para publicarse en SL and Microstructures)
- /8/ Simpson, T.B.; B.A. Wilson; A.Y. Eko, R.T. Larcau; L. Yerke and  
D.D. Smith  
2 Int. Conf. on Superlattices...  
Goteborg, Sweden, 1986 (para publicarse en SL and Microstructures)

- /9/ Döhler, G.H.  
Phys. Stat. Sol (b) 52, 533 (1972).
- /10/ Esaki, L.Y. and R. Tsu  
IBM. Res. Develop. 14, 61 (1970)
- /11/ Koteles, E.S. and J.Y. Chi  
2 Int. Conf. on Superlattices...  
Goteborg, Sweden, 1986  
(para publicarse en SL and Microstructures)
- /12/ Moore, K.J.; P. Dawson and C.T. Foxon  
2 Int. Conf. on Superlattices...  
Goteborg, Sweden, 1986  
(para publicarse en SL and Microstructures)
- /13/ Zehe, A.; A. Juárez and G. Röpke  
Physica 134 B, 374 (1985)
- /14/ Thomas, D.G.; J. Hopfield and W.W. Augustiniak  
Phys. Rev. 140, 202 (1965).
- /15/ Hagston, W.E.  
J. Luminiscence 3, 753 (1971).
- /16/ Williams, F.  
Phys. Stat. Sol. 25, 493 (1968).

Recibido: 20 de marzo de 1987