

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

**ESCUELA SUPERIOR DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE CIENCIA DE MATERIALES**



**Correlación de la emisión de luz y características de
difracción de rayos X en pozos cuánticos con puntos
cuánticos embebidos.**

TESIS

Que para obtener el grado de

MAESTRO EN CIENCIAS FISICOMATEMATICAS

Presenta

Roberto Luis Mascorro Alquicira

Director de tesis: Dra. Tetyana V. Torchynska

Codirector de tesis: Dr. Jesús Palacios Gómez

México D.F. 2012



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

ACTA DE REGISTRO DE TEMA DE TESIS Y DESIGNACIÓN DE DIRECTORES DE TESIS

México, D.F. a 23 de Mayo del 2011

El Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de ESFM en su sesión Ordinaria No. 02 celebrada el día 17 del mes de Febrero de 2010 conoció la solicitud presentada por el(la) alumno(a):

Mascorro
Apellido paterno

Alquicira
Apellido materno

Roberto Luis
Nombre (s)

Con registro:

B	0	9	1	2	4	2
---	---	---	---	---	---	---

Aspirante de: **Maestro en Ciencias Fisicomatemáticas**

1.- Se designa al aspirante el tema de tesis titulado:

"Correlación de la emisión de luz y características de difracción de rayos X
en pozos cuánticos con puntos cuánticos embebidos"

De manera general el tema abarcará los siguientes aspectos:

Se anexa hoja

2.- Se designan como Directores de Tesis a los Profesores:

Dra. Tetyana Torchynska y Dr. Jesús Palacios Gómez

3.- El trabajo de investigación base para el desarrollo de la tesis será elaborado por el alumno en:
El Departamento de Física

que cuenta con los recursos e infraestructura necesarios.

4.- El interesado deberá asistir a los seminarios desarrollados en el área de adscripción del trabajo desde la fecha en que se suscribe la presente hasta la aceptación de la tesis por la Comisión Revisora correspondiente:

Directores de Tesis

Dra. Tetyana Torchynska

Aspirante

Roberto Luis Mascorro
Alquicira

Dr. Jesús Palacios Gómez

Presidente del Colegio

Dr. Miguel Tuffino Velázquez
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA
ESTADOS UNIDOS MEXICANOS
MEXICO
SUPERIOR DE
FÍSICA Y MATEMÁTICAS
I. P. N.
SECCIÓN DE GRADUADOS



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

SIP-14-BIS

ACTA DE REVISIÓN DE TESIS

En la Ciudad de México, D. F., siendo las 10:00 horas del día 09 del mes de Diciembre del 2011 se reunieron los miembros de la Comisión Revisora de Tesis, designada por el Colegio de Profesores de Estudios de Posgrado e Investigación de ESFM

para examinar la tesis titulada:

"Correlación de la emisión de luz y características de difracción de rayos X en pozos cuánticos con puntos cuánticos embebidos"

Presentada por el alumno:

Mascorro

Apellido paterno

Alquicira

Apellido materno

Roberto Luis

Nombre(s)

Con registro:

B	0	9	1	2	4	2
---	---	---	---	---	---	---

Aspirante de: **Maestro en Ciencias Fisicomatemáticas**

Después de intercambiar opiniones los miembros de la Comisión manifestaron **APROBAR LA TESIS**, en virtud de que satisface los requisitos señalados por las disposiciones reglamentarias vigentes.

LA COMISIÓN REVISORA

Directores de tesis

Dra. Tetyana Torchynska

Dr. Jesús Palacios Gómez

Dr. José Luis Casas Espínola

Dra. Concepción Mejía Gardía

Dr. Arturo García Bórquez

PRESIDENTE DEL COLEGIO DE PROFESORES

Dr. Miguel Tufiño Velázquez



ESCUELA SUPERIOR DE FÍSICA Y MATEMÁTICAS
I. P. N.
SECCIÓN DE POSGRADOS



INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL
SECRETARÍA DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

CARTA CESIÓN DE DERECHOS

En la Ciudad de México D.F. el día 12 del mes de Enero del año 2012, el (la) que suscribe Roberto Luis Mascorro Alquicira alumno (a) del Programa de Maestría en Ciencias Fisicomatemáticas con número de registro B01242, adscrito a la Escuela Superior de Física y Matemáticas, manifiesta que es autor (a) intelectual del presente trabajo de Tesis bajo la dirección de la Dra. Tetyana Torchynska y el Dr. Jesús Palacios Gómez y cede los derechos del trabajo intitulado Correlación de la emisión de luz y características de difracción de rayos X en pozos cuánticos con puntos cuánticos embebidos, al Instituto Politécnico Nacional para su difusión, con fines académicos y de investigación.

Los usuarios de la información no deben reproducir el contenido textual, gráficas o datos del trabajo sin el permiso expreso del autor y/o director del trabajo. Este puede ser obtenido escribiendo a la siguiente dirección lederniergarou@hotmail.com. Si el permiso se otorga, el usuario deberá dar el agradecimiento correspondiente y citar la fuente del mismo.

Roberto Luis Mascorro Alquicira

Nombre y firma

Agradecimientos

A Dios

A mis Padres:

Roberto Mascorro Ruíz.

María Luisa Alquicira González.

A mi hermano:

Víctor Miguel Mascorro Alquicira.

A toda mi familia quienes siempre han creído en mí.

A mis directores de Tesis por su paciencia y guía.

Dra. Tetyana Torchynska.

Dr. Jesús Palacios Gómez.

Al Instituto Politécnico Nacional (IPN) y a la Escuela Superior de Física y Matemáticas (ESFM) por la educación superior que me han brindado.

A todas aquellas personas, amigos y profesores que contribuyeron a despertar en mí el amor por la ciencia y me han ayudado con un consejo, una llamada de atención, una enseñanza o me han ayudado a relajarme en el momento que lo he necesitado.

Agradezco al pueblo de México por sostener mi educación a través de sus contribuciones.

1. **Proyecto CONACYT- 58358 (2007-2010)**
“Investigación de las propiedades ópticas en estructuras con nanocristales y puntos cuánticos de semiconductores de grupos IV y III-V para dispositivos de nueva generación”. (Directora Dra. T. Torchynska).
2. **Proyecto CONACYT- 130387 (2011-2014)**
“Propiedades ópticas de los puntos cuánticos de semiconductores de grupos III-V y II-VI y el impacto del estrés elástico en puntos cuánticos embebidos en pozos cuánticos”. (Directora Dra. T. Torchynska).
3. **Proyecto SIP-IPN -20110516** “Investigación y simulación numérica de la interacción exciton-polariton en las sistemas nanocristalinos de SiC”. (Directora Dra. T. Torchynska).
4. **Proyecto SIP-IPN -20100103** “Transformación de las propiedades de puntos cuánticos de InAs/InGaAs y CdSe/ZnS en los procesos diferentes”. (Directora Dra. T. Torchynska).
5. **Proyecto SIP-IPN -20090113** “Modificación de las propiedades ópticas de puntos cuánticos de CdSe/ZnS en los procesos de bioconjugación”. (Directora Dra. T. Torchynska).

Índice.

	Página
Nomenclatura.....	9
Lista de tablas	10
Lista de figuras	11
Resumen	17
Abstract	19
Introducción	20
Justificación.....	23
Objetivos.....	25
Capitulo 1 Estado del Arte.....	27
1.1 Reseña histórica	27
1.2 Métodos de crecimiento Epitaxial	28
1.3 Parámetros tecnológicos que influyen en las características eléctricas y ópticas de los QDs.	31
1.3.1 Temperatura de crecimiento.	31
1.3.2 Velocidad de crecimiento de los puntos cuánticos.	34
1.3.3 Cambio en la composición de la capa de recubrimiento $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.	36
1.3.4 Apilamiento de varias capas de puntos cuánticos.....	39
1.3.5 Espesor de la capa espaciadora de GaAs.....	44
1.3.6 La influencia del recocido térmico en las estructuras con puntos cuánticos.	46
1.3.7 Esfuerzos elásticos.	49
1.4 Variaciones no homogéneas en la intensidad de fotoluminiscencia.	52
1.5 Conclusiones de capítulo.	54
Capitulo 2 Muestras y Métodos.....	55
2.1 Muestras de investigación.....	55

2.2 Metodología de Investigación.	59
2.2.1 Emisión de fotoluminiscencia.	60
2.2.2 Difracción de rayos X para la investigación de las características estructurales.	61
2.2.3 Principios de dispersión de rayos X.	61
 Capítulo 3 Fotoluminiscencia en dependencia de la temperatura.	63
3.1. Espectros de fotoluminiscencia (FL) a diferentes temperaturas.	63
3.2 Intensidad de FL y posición de picos de FL en diferentes estructuras con QDs.	67
3.3 Intensidad Integrada de FL y FWHM contra temperatura.	69
3.4 Pico de fotoluminiscencia contra temperatura.	70
3.5 Cambio de la posición de los picos de fotoluminiscencia.	71
3.6 Ajuste de Einstein.	77
3.7 Energía de activación del proceso de Extinción Térmica.	82
3.8 Conclusiones de capítulo.	89
 Capítulo 4 Difracción de rayos X en dependencia de la densidad de QDs.	90
4.1 Parámetros a 300K de los materiales InAs, GaAs, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.	90
4.2 Difractogramas de las estructuras tipo DWELL.	91
4.3 Análisis de picos por grupos.	96
4.3.1 Picos de grupo A.	96
4.3.2 Picos de grupo B.	99
4.3.3 Picos de grupo C.	102
4.3.4 Picos de grupo D.	105
4.4 Deformación elástica.	114
4.5 Conclusiones de capítulo.	121
 Capítulo 5 Conclusiones Generales.	122
Sugerencias para trabajo futuro.	123
Referencias.	124

Nomenclatura

1Es	Primer estado excitado.
2Es	Segundo estado excitado.
DWELL	Puntos dentro de un pozo (del Inglés “Dot-in-a-well”).
E^{QW-QD}	Energía de activación entre el pozo cuántico y los puntos cuánticos.
$E^{GaAs-QW}$	Energía de activación entre la barrera de GaAs y el pozo cuántico.
$E^{GaAs-QD}$	Energía de activación entre la barrera de GaAs y los puntos cuánticos.
E_g^{GaAs}	Banda prohibida del GaAs en bulto.
Gs	Estado base (del inglés Ground State)
FL	Fotoluminiscencia.
FWHM	Ancho medio (del Inglés “Full Width at Half Maximum”).
G_{GaAs}	Razón de foto-generación de excitones en la barrera de GaAs.
G_{InGaAs}	Razón de foto-generación de excitones en los pozos cuánticos de InGaAs.
k	Constante característica de la ecuación de Einstein para la banda prohibida de un semiconductor.
MBE	Epitaxia por haces moleculares (del Inglés “Molecular Beam Epitaxy”).
ML	Monocapa (del Inglés Mono-Layer).
MOCVD	Deposición química en fase vapor de órgano metálicos (del Inglés “Metal Organic Chemical Vapor Deposition”).
N_{QD}	Densidad de estados en los puntos cuánticos.
N_{QW}	Densidad de estados en el pozo cuánticos.
N_{GaAs}	Densidad de estados en la barrera de GaAs.
NR	No radiativo.
QD	Punto cuántico (del Inglés Quantum Dot).
QDs	Puntos cuánticos (plural).
QW	Pozo cuántico (del Inglés Quantum Well).
QWs	Pozos cuánticos (plural).
T	Temperatura.
MFA	Microscopia de fuerza atómica.
ϖ_{QD}	Coeficiente de captura en el punto cuántico.
ϖ_{QW}	Coeficiente de captura en el pozo cuántico
τ_{RQD}	Tiempo de recombinación radiativa en los puntos cuánticos.
τ_{RQW}	Tiempo de recombinación radiativa en el pozo cuántico.
τ_{NR}	Tiempo de recombinación no radiativa en los centros no radiativos.
WL	Capa de mojado (del Inglés “Wetting Layer”).

Lista de tablas

	Pagina
Tabla 1.1 Energía del pico de FL (E_0) del estado base y su FWHM y la separación del nivel discreto de energía $\Delta E = E_1 - E_0$ a temperatura ambiente.	42
Tabla 3.1 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni.	76
Tabla 3.2 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni para la muestra #3 $T_c = 510^\circ\text{C}$.	76
Tabla 3.3 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni para la muestra #4 $T_c = 525^\circ\text{C}$.	76
Tabla 3.4 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni para la muestra #5 $T_c = 535^\circ\text{C}$.	76
Tabla 3.5 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein.	80
Tabla 3.6 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein para la muestra #3 $T_c = 510^\circ\text{C}$.	80
Tabla 3.7 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein para la muestra #4 $T_c = 525^\circ\text{C}$.	80
Tabla 3.8 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein para la muestra #5 $T_c = 535^\circ\text{C}$.	81
Tabla 3.9 Energías de Activación del aniquilamiento térmico de las diferentes muestras.	87
Tabla 4.1 Posiciones de los picos en difractograma.	94
Tabla 4.2 Posiciones de pico para los distintos planos de los materiales de las estructuras DWELL.	94
Tabla 4.3 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 27 - 33^\circ$.	99
Tabla 4.4 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 45 - 55^\circ$.	102
Tabla 4.5 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 57 - 64^\circ$.	105
Tabla 4.6 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 64 - 68^\circ$.	108
Tabla 4.7 Picos recibidos por difracción de K_α .	108

Tabla 4.8 Picos recibidos por difracción de K_{β} . 109

Tabla 4.9 Datos de difracción de rayos X. 115

Lista de figuras

	Página
Figura 1.1 Esquema del modo de crecimiento Strasky-Krastanov.	29
Figura 1.2 Imágenes de TEM de una muestra de puntos cuánticos de InGaAs/GaAs crecidos mediante MBE a) Imagen de campo oscuro. b) Imagen de XTEM	30
Figura 1.3 Imágenes de AFM de estructuras de QDs, crecidas a diferentes temperaturas del sustrato: a) 480 °C; b) 510 °C; y c) a) 530 °C. Tamaño de la imagen es 1 x 1 μm^2 .	32
Figura 1.4 Variación de la densidad tamaño de QDs de $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$ a diferentes temperaturas de crecimiento (a) Densidad de QDs (b) Tamaño de QDs.	33
Figura 1.5 Dependencia del FWHM de Fotoluminiscencia con respecto de la temperatura de crecimiento.	34
Figura 1.6 Densidad de puntos de InGaAs/GaAs como función de la temperatura para dos velocidades de crecimiento diferentes.	35
Figura 1.7 Espectro de InAs cubiertos por una capa de 3nm de espesor de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x=0, 0.1, 0.2, \text{ and } 0.3$) con una intensidad de excitación de 1mW. El inset muestra el ancho de línea del espectro de FL contra el contenido de In.	38
Figura 1.8 Datos calculados (línea discontinua) y experimentales (línea continua), de el cambio en energía de FL contra el contenido de In en la capa cubierta de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.	38
Figura 1.9 Espectro de FL de las muestras con $N(=1, 3, 5, 7)$ capas de QDs bajo una potencia de excitación de 50mW a) a 15K b) a temperatura ambiente.	40

Figura 1.10 a) Espectro de FL de la primera muestra de 5 capas de QDs bajo una excitación de 50mW y de 100mW. b) Espectro de PL de la segunda muestra de 5 capas de QDs bajo una excitación de 200mW. 43

Figura 1.11 Espectro de FL de QDs de InAs embebidos en barreras de GaAs para un periodo de QDs de InAs/GaAs (a), tres periodos de QDs de InAs/GaAs con una capa espaciadora de GaAs de (b) 30 Å, (c) 100 Å, (d) 200 Å y (e) 300 Å. 45

Figura 1.12 Picos de energía de fotoluminiscencia y FWHM de fotoluminiscencia para InAs/GaAs en función del espesor de las capas espaciadoras. 45

Figura 1.13 Imagen de TEM de la sección transversal de las siete capas apiladas de QDs de InAs/InAlGaAs. 47

Figura 1.14 Espectro de FL de QDs de InAs/InAlGaAs sometidos a un proceso de Recocido térmico rápido (rapid thermal annealing RTA). 48

Figura 1.15 Emisión de longitudes de onda con respecto de la temperatura de recocido. 48

Figura 1.16 Geometría del sistema de QDs considerado a) Heteroestructura de QD de InAs/GaAs. b) Isla de QD de InAs donde $B = H = 30\text{nm}$, $d = 0.5\text{nm}$, $b = 12\text{nm}$ y $h = 6\text{nm}$. 49

Figura 1.17 Longitudes de onda de las transiciones de energía calculadas por a) método convencional. b) método propuesto. 51

Figura 1.18 Espectro de fotoluminiscencia medido con una potencia de luz de $300\text{W}/\text{cm}^2$, en la figura se indican diferentes temperaturas. 52

Figura 1.19 Dependencia de la posición del pico de fotoluminiscencia con respecto a la temperatura para el estado base y los estados excitados 1-4. 53

Figura 2.1 Esquema de la estructura DWELL. 56

Figura 2.2 Imágenes de microscopia de fuerza atómica de las muestras crecidas a distintas temperaturas. 57

Figura 2.3 (a).densidad promedio y tamaño promedio de QDs con respecto a la temperatura de crecimiento. (b) Intensidad Integrada promedio y posición del pico de fotoluminiscencia del estado base con respecto a la temperatura de crecimiento. 58

Figura 2.4 Equipo utilizado para hacer las mediciones de fotoluminiscencia. 60

Figura 2.5 Equipo utilizado para hacer las mediciones de difracción de rayos X. 62

Figura 3.1 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #1 con distintas temperaturas. 64

Figura 3.2 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #2 con distintas temperaturas. 64

Figura 3.3 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #3 con distintas temperaturas. 65

Figura 3.4 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #4 con distintas temperaturas. 66

Figura 3.5 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #5 con distintas temperaturas. 66

Figura 3.6 Variación de la intensidad de fotoluminiscencia con respecto de la temperatura de crecimiento. 68

Figura 3.7 Posición del pico de fotoluminiscencia con respecto a la temperatura de crecimiento. 68

Figura 3.8 Variación de la intensidad de fotoluminiscencia para el Gs de las diferentes muestras con respecto de la temperatura. 69

Figura 3.9 Variación de FWHM para el Gs de las diferentes muestras con respecto de la temperatura. 70

Figura 3.10 Variación del pico de FL para el Gs de las diferentes muestras con respecto de la temperatura. 71

Figura 3.11 Variación de la energía de la banda prohibida con la temperatura para el diamante. La curva representa la ecuación de Varshni. 73

Figura 3.12 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni para el Gs con respecto de la temperatura para las diferentes muestras. 73

Figura 3.13 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni para el 1Es con respecto de la temperatura para las diferentes muestras. 74

Figura 3.14 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra crecida a 510°C. 74

Figura 3.15 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra crecida a 525°C 75

Figura 3.16 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra crecida a 530°C. 75

Figura 3.17 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein para el Gs con respecto de la temperatura para las diferentes muestras. 78

Figura 3.18 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein para el 1Es con respecto de la temperatura para las muestras #3, #4 and #5. 78

Figura 3.19 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra #3. 79

Figura 3.20 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra #4. 79

Figura 3.21 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Einstein para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra #5. 80

Figura 3.22 Diagrama de energía de la estructura Investigada a $T = 77K$. 82

Figura 3.23 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #1. 84

Figura 3.24 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #2. 84

Figura 3.25 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica semilogaritmica de $[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #3. 85

Figura 3.26 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #4. 85

Figura 3.27 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #5. 86

Figura 3.28 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de las diferentes muestras. 86

Figura 4.1 Difractograma de la muestra #1. 91

Figura 4.2 Difractograma de la muestra #2. 92

Figura 4.3 Difractograma de la muestra #3. 92

Figura 4.4 Difractograma de la muestra #4. 93

Figura 4.5 Difractograma de la muestra #5. 93

Figura 4.6 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #1. 96

Figura 4.7 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #2. 97

Figura 4.8 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #3. 97

Figura 4.9 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #4.	98
Figura 4.10 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #5.	98
Figura 4.11 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #1.	99
Figura 4.12 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #2.	100
Figura 4.13 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #3.	100
Figura 4.14 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #4.	101
Figura 4.15 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #5.	101
Figura 4.16 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #1.	102
Figura 4.17 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #2.	103
Figura 4.18 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #3.	103
Figura 4.19 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #4.	104
Figura 4.20 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #5.	104
Figura 4.21 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #1.	105
Figura 4.22 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #2.	106
Figura 4.23 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #3.	106
Figura 4.24 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #4.	107
Figura 4.25 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #5.	107
Figura 4.26 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (200) del GaAs de las muestras #1-#5.	109
Figura 4.27 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de las muestras #1-#5.	110

Figura 4.28 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs de las muestras #1-#5. 111

Figura 4.29 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones k_{β} del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de las muestras #1-#5. 111

Figura 4.30 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones k_{β} del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs de las muestras #1-#5. 112

Figura 4.31 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones k_{α} del haz de rayos X para los planos (400) del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de las muestras #1-#5. 113

Figura 4.32 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (200) del GaAs para la radiación k_{α} . 117

Figura 4.33 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs para la radiación k_{β} . 117

Figura 4.34 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del $\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}$ para la radiación k_{α} . 118

Figura 4.35 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs para la radiación $k_{\alpha 1}$. 118

Figura 4.36 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs para la radiación $k_{\alpha 2}$. 119

Figura 4.37 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs y (400) del InGaAs para la radiación $k_{\alpha 1}$. 119

Resumen.

En este trabajo estudiamos la fotoluminiscencia de cinco obleas con puntos cuánticos de InAs embebidos en pozos cuánticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con una concentración de In en los pozos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ igual a 0.15, las muestras fueron crecidas a diferente temperatura en un intervalo desde 470°C hasta 535°C, las muestras son etiquetadas como #1(470°C), #2(490°C), #3(510°C), #4(525°C) y #5(535°C), durante la deposición de los puntos cuánticos. Estas muestras presentan diferentes densidades de puntos cuánticos desde 1.1×10^{11} hasta $1.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ obtenidas mediante la variación de la temperatura de crecimiento de los puntos.

Del estudio de fotoluminiscencia (FL) se observó un corrimiento no monótono con respecto a la temperatura de crecimiento en el cambio de la intensidad integrada de FL emitida así como también un cambio no monótono en la posición del pico de FL ambos como función de la temperatura de crecimiento de los puntos. El análisis de la posición del pico de FL como función de la temperatura se hizo mediante la ecuación de Varshni y de Einstein y de ambos análisis se concluyó que durante el proceso de crecimiento de los puntos se dio lugar a la interdifusión del Ga de los pozos cuánticos con el In de los puntos cuánticos, es decir que átomos de Ga en los pozos sustituyen átomos de In en los puntos. El proceso de interdifusión entre el Ga y el In también tiene una dependencia no monótona con respecto de la temperatura de crecimiento de los puntos cuánticos.

Este efecto se puede explicar como un resultado de los diferentes niveles de esfuerzos elásticos en las cinco estructuras investigadas. Para estimar el esfuerzo elástico se realizó un estudio por difracción de rayos X (XRD) en las estructuras. Del estudio de difracción de

rayos X se observó que el pico de difracción de los planos (400) en los pozos cuánticos de GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sufría un corrimiento no monótono con respecto al pico de XRD de los planos (400) en cristales en bulto de GaAs (o sustrato de GaAs) e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

El estudio de difracción de rayos X reveló que en las obleas #2, #3 y #4 los esfuerzos elásticos son menores en comparación con los esfuerzos elásticos de las obleas #1 y #5 en las cuales los esfuerzos elásticos se incrementaron. El mayor valor de esfuerzos elásticos en las obleas #1 y #5 provoca: i) el decremento en la intensidad de FL, ii) la eficiente interdifusión de Ga-In y iii) el desplazamiento de los picos de FL hacia valores altos de la energía.

Abstract.

This thesis presents the photoluminescence (PL) study of a group of five wafers of InAs quantum dots (QDs) embebed in an $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum well (QWs) with an In concentration about 0.15. These wafers has different quantum dot density from the range $1.1 \times 10^{11} - 1.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ obtained by the QD growth temperature variation in the range $470^\circ\text{C} - 535^\circ\text{C}$.

The photoluminescence study revealed a non monotonous change in the (PL) peak positions and in the (PL) integrated intensities. The peak position analysis has been done using the Varshni and Einstein formulas. From this analysis we concluded that the process of Ga-In interdiffusion has realized at the InGaAs/InAs QD interface. The Ga-In interdiffusion process has a non monotonous behavior versus temperature too. The last effect can be explained as a result of the different elastic stress levels in the wafers. An X-ray diffraction (XRD) study has been done in order to determine the elastic stress in the structures. The XRD study showed that the diffraction peaks of the GaAs and InGaAs QW (400) planes has a non monotonous shift relatively the XRD peak from the (400) planes of the cubic GaAs and InGaAs.

The X ray diffraction study revealed that in the wafers #2, #3 and #4 the elastic deformation (or elastic stress) are minimum in comparation with those levels in wafers #1 and #5. The high values in elastic stress in wafers #1 and #5 enhance i) the decrease of InAs QDs PL intensity ii) the efficient Ga-In interdiffusion at the InGaAs/InAs QDs interface and iii) the shift of the QDs PL peaks to high energy.

Introducción.

En el presente los compuestos de semiconductores proveen materiales básicos para un gran número de tecnologías comerciales, así como para nuevos dispositivos optoelectrónicos, por ejemplo diodos laser, transistores de heteroestructura bipolar y de alta movilidad de electrones, diodos emisores de luz, fotodetectores y moduladores optoelectrónicos.

Las características operacionales de estos dispositivos dependen críticamente de las propiedades físicas de los materiales que los constituyen. Para un material semiconductor de dimensiones macroscópicas uno de los parámetros más importantes es la diferencia en energía entre el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia a esta separación de los niveles de energía se le da el nombre de banda prohibida la cual determina las propiedades de emisión y de absorción de luz del material. Es por lo anterior que la modificación de tal parámetro ha acaparado la investigación de los parámetros de los cuales depende, y en el afán de controlar el valor de la banda prohibida, los esfuerzos en la investigación se volcaron a desarrollar compuestos que permitieran obtener materiales semiconductores para el cual dicho parámetro fuese variable. Estos estudios llevaron a obtener una gama de compuestos semiconductores incluyendo impurezas en su estructura de tal manera que se obtuvieran niveles de energía en el interior de la banda prohibida los cuales permitieran ampliar el rango de transiciones. Tal búsqueda de la manipulación de la banda prohibida se vio altamente beneficiada con el advenimiento de las nanoestructuras o estructuras de baja dimensionalidad.

En gran parte el atractivo de este tipo de estructuras se halla en la aparición del efecto de confinamiento cuántico, en el cual las partículas sienten la presencia de las fronteras a su

alrededor y responden al cambio en tamaño de las mismas ajustando su espectro de energía. Dependiendo de si el confinamiento se da en una, dos o tres dimensiones se pueden distinguir pozos cuánticos (Quantum Wells, QW), alambres cuánticos (Quantum Wires, QWR) y puntos cuánticos (Quantum Dots, QDs) respectivamente.

En el caso de la banda prohibida para estas nanoestructuras se tiene que a diferencia del material de tamaño macroscópico en el cual dicho parámetro es una cantidad fija, en las nanoestructuras el valor de la banda prohibida es una función del tamaño, una cantidad que puede ser variada en la fabricación del material.

Un ejemplo de esto es el caso de un punto cuántico de forma esférica en el cual la dependencia del valor de la banda prohibida como función de su tamaño es:

$$E_g(QD) = E_{g,0} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{eh} R^2} \quad (1)$$

Donde $E_g(QD)$ es el valor de la separación entre el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción en el punto cuántico, $E_{g,0}$ es el valor de banda prohibida del material de dimensiones macroscópicas, m_{eh} es la masa reducida considerando las masas efectivas del electrón menos energético y su correspondiente hueco, R es el radio del punto cuántico.

El estudio de estas nanoestructuras lleva por lo tanto a dos preguntas, la primera es ¿Cómo obtenerlas? y la segunda ¿Cómo caracterizar sus propiedades?

Uno de los métodos para la obtención de las nanoestructuras es la heteroepitaxia, en la cual se deposita un material cristalino A con una constante de red sobre un material B con una constante de red distinta con objeto de crear deformaciones locales, las cuales a su vez

producen esfuerzos residuales. Para reducir la energía de estos esfuerzos se crean localmente partículas nanométricas.

Es de esperarse que diferentes esfuerzos residuales produzcan diferentes densidades y morfologías de nanopartículas. Ambas características seguramente afectarán al espectro de fotoluminiscencia.

Lo anterior se puede obtener mediante diferentes tipos de crecimiento como deposición química en fase de vapor (MOCVD por sus siglas en inglés.) y epitaxia de haces moleculares (MBE por sus siglas en inglés).

La respuesta a la segunda pregunta es que en general, sus propiedades son caracterizadas mediante fotoluminiscencia debido a que la mayoría de los estudios están enfocados a la investigación en las propiedades ópticas. Utilizando otro tipo de técnicas de caracterización como complementarias, tales como la difracción de rayos X para estudiar la estructura, se puede determinar la influencia de la deformación elástica en las propiedades de ese tipo de nanoestructuras.

En este trabajo se busca mediante la técnica de difracción de rayos X, estudiar los esfuerzos debidos al desajuste de red en muestras de puntos cuánticos de InAs inmersos en pozos cuánticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con una concentración fija de In y Ga y correlacionarlos con sus propiedades de fotoluminiscencia cuando los puntos son crecidos bajo diferentes temperaturas.

Justificación.

Diversas aplicaciones con estructuras basadas en puntos cuánticos de InAs/GaAs están siendo desarrolladas pues ofrecen mejores características en comparación con estructuras como los pozos cuánticos como es el caso de algunos láseres en los cuales aun este tipo de estructuras basadas en pozos cuánticos son utilizadas como fuente de luz en sistemas de comunicaciones.

Uno de los parámetros que influye en el espectro de fotoluminiscencia en estructuras con puntos cuánticos es la densidad de puntos cuánticos y se ha mostrado recientemente que la densidad de puntos cuánticos puede ser aumentada de manera significativa creciendo los puntos en pozos cuánticos del tipo $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ en las llamadas estructuras de puntos en un pozo (dot in a well DWELL). En este tipo de estructura se ha mejorado la fotoluminiscencia debido a una mejor calidad del cristal que rodea a los puntos cuánticos así como una mejor captura de excitones dentro de los pozos y los puntos cuánticos. Las propiedades que exhiben este tipo de estructuras se deben en gran medida a los factores tecnológicos de crecimiento pues estos controlan el tamaño, la forma y el arreglo espacial de los QDs y por consiguiente sus propiedades optoelectrónicas.

Aprendiendo a controlar adecuadamente factores como la temperatura del sustrato, temperatura de crecimiento, espesor de la capa espaciadora, etc. se puede llegar a controlar

la densidad de puntos, su forma y tamaño, con esto se puede controlar las propiedades de fotoluminiscencia para su posterior aplicación en dispositivos optoelectrónicos, dispositivos de memoria electrónica, y posiblemente en un futuro dispositivos para computación cuántica.

Además otro parámetro importante son los esfuerzos elásticos debidos al desacople en las constantes de red de los materiales que conforman a los QDs, estudios teóricos recientes muestran que el campo de esfuerzos elásticos alrededor de los QDs intervienen en las propiedades de fotoluminiscencia, pues contribuyen con el potencial de confinamiento afectando los niveles energéticos en los que se desdoblan las bandas de valencia y de conducción.

Es por todo lo anterior que la investigación y caracterización de estructuras tipo DWELL por métodos de fotoluminiscencia y difracción de rayos X es de gran importancia tanto desde el punto de vista del conocimiento físico como del tecnológico.

Objetivos generales

Investigar los cambios en las propiedades ópticas y estructurales en las estructuras con puntos cuánticos de InAs embebidos en pozos cuánticos de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$ en dependencia de la variación en la densidad de puntos cuánticos (desde 1.1×10^{11} hasta $1.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$) obtenida por la variación de temperatura de crecimiento de los puntos desde 470°C hasta 535°C utilizando las técnicas de Fotoluminiscencia y Difracción de rayos X.

Objetivos particulares

- 1.- Investigación del espectro de fotoluminiscencia de cinco estructuras tipo DWELL con puntos cuánticos de InAs embebidos en un pozo simétrico de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ preparadas por MBE con diferentes densidades de puntos cuánticos ($1.1 \times 10^{11} - 1.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$) mediante la variación en la temperatura de crecimiento en un intervalo de $470^\circ\text{C} - 535^\circ\text{C}$.
- 2.- Investigación del cambio en la intensidad integrada así como en la posición del pico de fotoluminiscencia con respecto a la temperatura de crecimiento de los puntos cuánticos y su densidad.
- 3.- Análisis de la variación de la intensidad de FL y de la posición del pico de FL con respecto de la temperatura de medición. Investigación del cambio en la composición química de los puntos cuánticos en base al ajuste utilizando las ecuaciones empíricas de Varshni y de Einstein.

4.- Investigación de la difracción de rayos X en las estructuras tipo DWELL con el objeto de estudiar los valores de los esfuerzos elásticos en dependencias de densidad de puntos cuánticos.

5.- Análisis de los resultados experimentales medidos por ambas técnicas y la estimación numérica de la variación de la deformación elástica como función de la concentración de puntos cuánticos en base a modelos fenomenológicos.

Capítulo 1 Estado del Arte.

1.1 Reseña histórica

La investigación de materiales estructurados artificialmente se inició en 1969 cuando Tsu y Esaki [1] propusieron diseñar una súper red de semiconductores con un potencial periódico unidimensional.

Antes del concepto de súper red, se había examinado la viabilidad de la formación estructural de barreras de potenciales y pozos que fueran suficientemente delgados como para presentar tunelamiento resonante, es decir que para ciertas energías un electrón puede atravesar una barrera doble de potencial como si esta no existiera.

La idea de súper red apareció como una extensión natural de estructuras con doble, triple y múltiples barreras.

Una súper red consiste de un potencial acoplado mediante tunelamiento resonante [1], tecnológicamente se consigue fabricando una estructura periódica artificial alternando capas de dos semiconductores ligeramente diferentes en su constante de red con un espesor de las capas del orden de nanómetros.

El progreso de la física del estado sólido en las últimas décadas se caracteriza por la sustitución de los cristales en bulto por las películas delgadas y estructuras en multicapas como principal objeto de investigación.

El cambio más dramático en las propiedades ocurre en las estructuras de tamaño cuántico (estructuras con el tamaño adecuado para presentar el efecto del confinamiento cuántico)

donde los portadores son confinados en una región con un tamaño característico del orden de la longitud de onda de De Broglie.

El hecho de que este tipo de estructuras se haya convertido en el centro de interés de numerosas investigaciones en el presente se debe en gran parte al surgimiento y desarrollo de la epitaxia de haces moleculares, la cual es la tecnología de más alta calidad para el crecimiento de tales estructuras con precisión de una simple monocapa.

1.2 Métodos de crecimiento Epitaxial.

El tipo de crecimiento de los puntos cuánticos influye fuertemente en sus propiedades puesto que determina parámetros como su densidad, homogeneidad y tamaño, además influye en sus propiedades de fotoluminiscencia.

Se define epitaxia como el crecimiento orientado de una sustancia cristalina sobre un substrato de una diferente sustancia cristalina.

Uno de los métodos más prometedores para la obtención de puntos cuánticos auto ensamblados es el método de crecimiento por deposición de haz molecular (Molecular Beam Epitaxy, MBE) por el modo Stransky-Krastanov (SK).

Básicamente en este modo de crecimiento una película delgada de un cristal es depositada sobre la superficie de otro cristal a través de la incidencia de un haz de iones de la primera sustancia. Los dos cristales pertenecientes al mismo grupo de simetría tienen constantes de red distintas y forman una interface no totalmente coherente cuando la película es lo

suficientemente delgada. El pequeño desajuste en la red forma un campo elástico y al disminuir la energía elástica la película colapsa en islas.

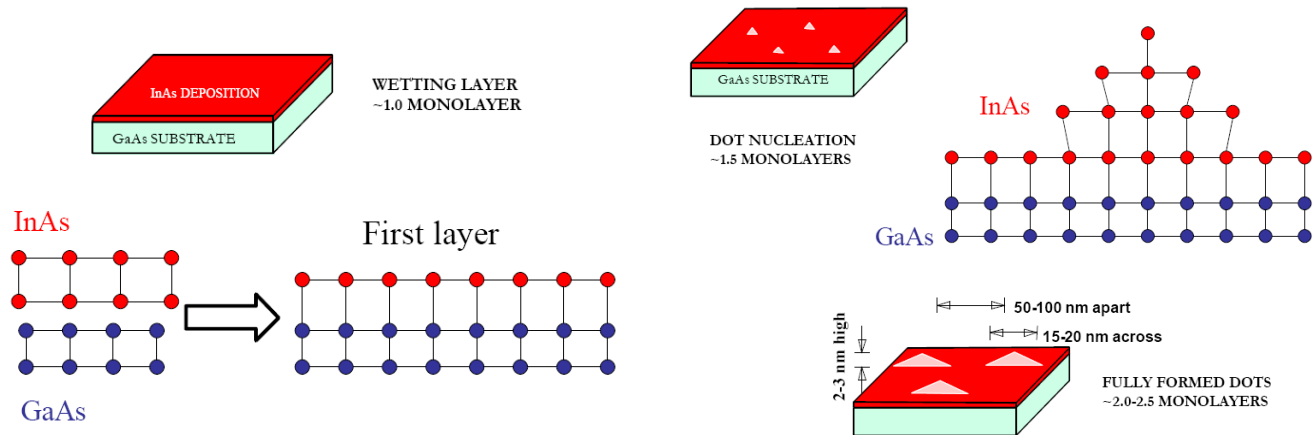


Fig. 1.1. Esquema del modo de crecimiento Stransky-Krastanov [2].

Los puntos cuánticos (QDs) autoensamblados de semiconductores están siendo intensamente investigados en la actualidad debido a su potencial de ser bloques de construcción para nuevas aplicaciones optoelectrónicas.

El crecimiento de puntos cuánticos autoensablados tiene la ventaja en comparación con otras técnicas de que puede abarcar superficies completas sin embargo presenta el inconveniente de que el arreglo de puntos cuánticos obtenido no es periódico y presenta cierta dispersión en el tamaño, además tanto su forma como su composición química pueden cambiar debido a la interdifusión entre los objetos y la capa cubierta que se coloca por encima de ellos.

Distintos grupos de investigación han buscado controlar la uniformidad, tamaño, densidad y localización de los puntos cuánticos autoensamblados y algunos de los métodos utilizados son:

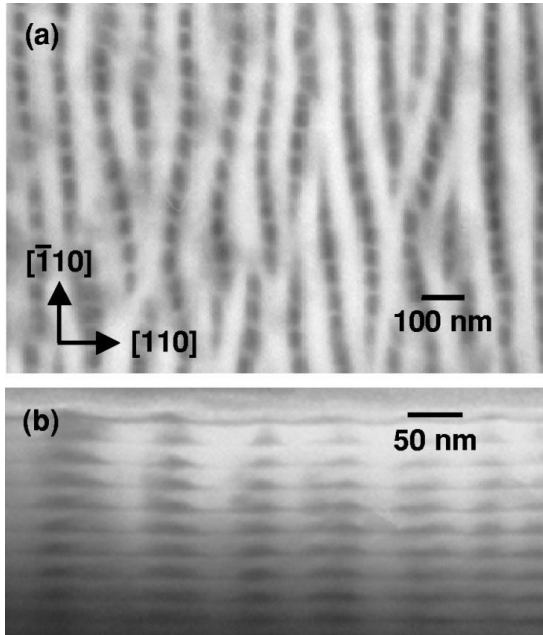


Fig. 1.2. Imágenes de TEM de una muestra de puntos cuánticos de InGaAs/GaAs crecidos mediante MBE a) Imagen de campo oscuro. b) Imagen de XTEM [3]

i. Manipulando la velocidad de deposición de las capas depositando a los puntos con una velocidad de 0.02 mono capas (Mono Layers ML/s) por segundo.

ii. Alternando flujos de materiales del grupo III y del grupo IV, a este método se lo conoce como el método de capas atómicas epitaxiales (Atomic Layer Epitaxy ALE).

iii. Cambiando los parámetros de crecimiento tales como la temperatura del sustrato y la razón del flujo V/III (materiales semiconductores de los grupos III y V).

iv. Interrumpiendo el crecimiento después de la formación de los puntos cuánticos.

En el caso de puntos cuánticos de InAs preparados mediante el método de crecimiento MBE son:

- I. Temperatura de crecimiento de los puntos cuánticos.
- II. Velocidad de crecimiento de los puntos cuánticos.
- III. Cambio en la composición de la capa de recubrimiento $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

- IV. Apilamiento de varias capas de puntos cuánticos.
- V. Espesor de la capa espaciadora de GaAs.
- VI. La influencia del recocido térmico en las estructuras con puntos cuánticos.
- VII. Esfuerzos elásticos.

1.3 Parámetros tecnológicos que influyen en las características eléctricas y ópticas de los puntos cuánticos (QDs).

1.3.1 Temperatura de crecimiento.

En el trabajo de A. Gushterov et. al. [4] dicho autor estudió la influencia de las condiciones de crecimiento sobre las propiedades ópticas y estructurales de QDs de InGaAs crecidos sobre un sustrato de GaAs (100), A. Gushterov et. al. [4] Investigaron el impacto que tienen la temperatura del sustrato, la velocidad de crecimiento y la razón de las concentraciones V/III en el ancho total a la mitad del máximo FWHM (*Full Width at Half Maximum*), y en el espectro de fotoluminiscencia FL así como en la densidad y la altura de los QDs.

Para las investigaciones de la influencia de las condiciones de crecimiento sobre las propiedades ópticas y estructurales de los QDs los autores variaron únicamente un parámetro a la vez manteniendo como constantes todos los demás.

Las muestras analizadas fueron QDs de InGaAs/GaAs con un contenido de In de 60% crecidas por el modo Stransky-Krastanov (SK) en un reactor GenII MBE sobre sustratos de GaAs (100). Estas estructuras se componen de una capa buffer de GaAs de 200nm, los QDs fueron crecidos por deposición de submonocapas, una capa barrera de GaAs de 50nm para

mediciones de FL sin interrupción en el proceso de crecimiento, y una segunda capa de QDs en la cima de la muestra para estudios de morfología. Las estructuras de los QDs de InGaAs/GaAs fueron crecidas a diferentes temperaturas del sustrato en un rango de 480°C a 530 °C con dos velocidades de crecimiento diferentes de GaAs de 0.28 a 0.14nm/s y con velocidades de crecimiento de InAs de 0.07 a 0.035nm/s respectivamente. Los parámetros estructurales de los QDs fueron obtenidos mediante Microscopia de Fuerza Atómica (MFA). En la Figura 1.3, se muestran imágenes de AFM de estructuras de QDs sin recubrimiento crecidas a diferentes temperaturas del sustrato.

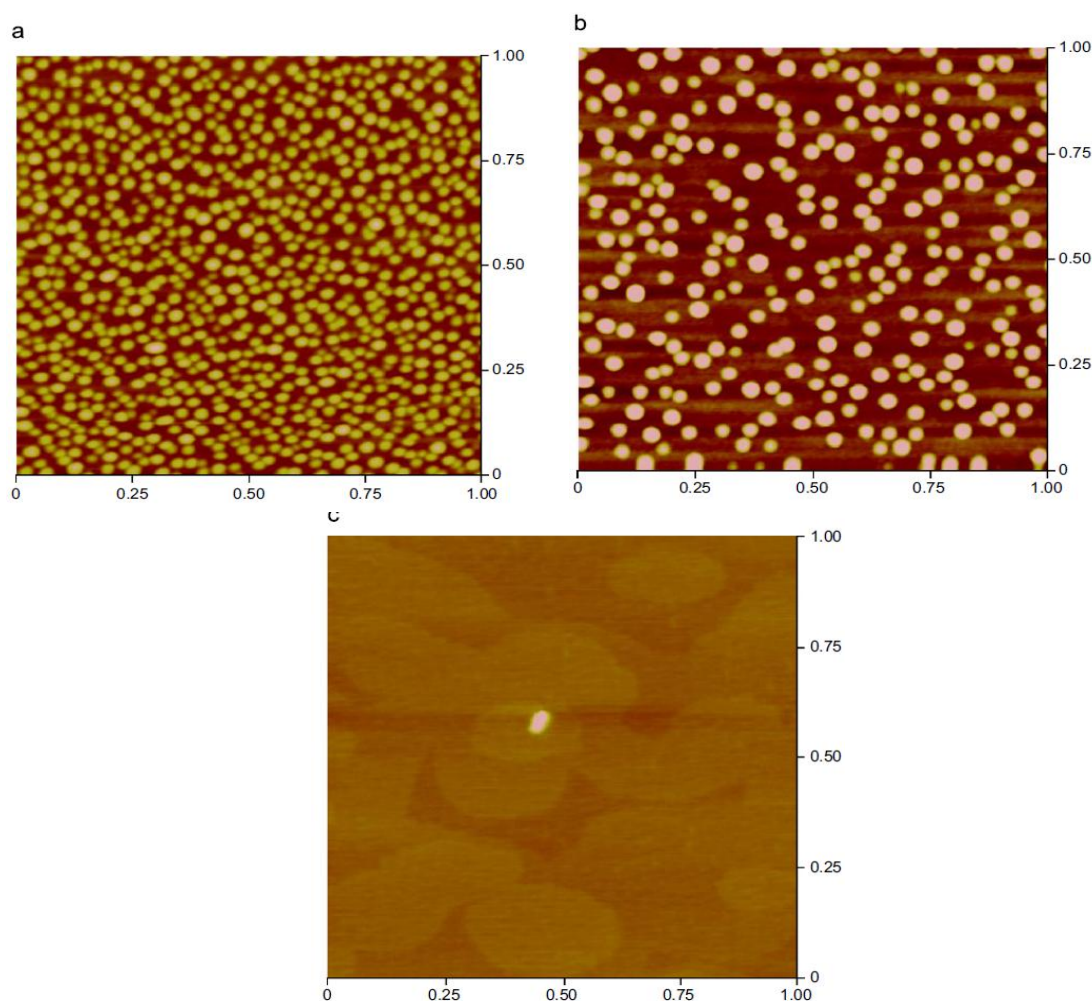


Fig.1.3 Imágenes de AFM de estructuras de QDs, crecidas a diferentes temperaturas del sustrato: a) 480 °C; b) 510 °C; y c) a) 530 °C. Tamaño de la imagen es 1 x 1 μm^2 . [4]

Tal como se muestra en la figura 1.3 con un incremento en la temperatura del sustrato, la densidad de puntos decrece de $6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, a una temperatura de 480°C , a $1 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ a una temperatura de 530°C mientras que su tamaño incrementa.

En la Figura 1.4a se muestra la dependencia de la densidad de los QDs con respecto a las temperaturas del sustrato, en la Figura 1.4b se muestra la dependencia de la altura de los QDs con respecto a las temperaturas del sustrato. De las figuras se observa que con un incremento de la temperatura del sustrato T_{sub} , la densidad de los puntos decrementa pero por el contrario el tamaño incrementa.

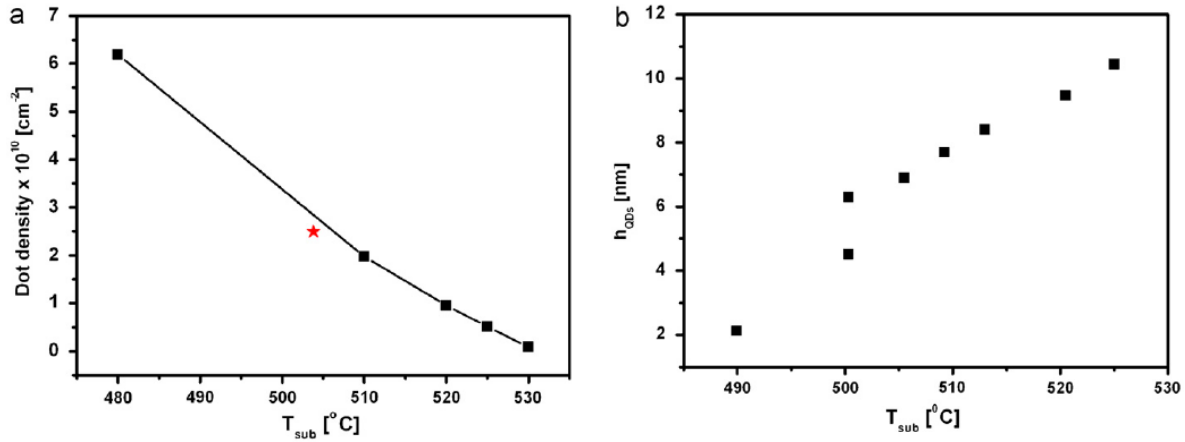


Fig.1.4 Variación de la densidad tamaño de QDs de $\text{In}_{0.6}\text{Ga}_{0.4}\text{As}/\text{GaAs}$ a diferentes temperaturas de crecimiento (a) Densidad de QDs (b) Tamaño de QDs. [4]

La dependencia de la temperatura del sustrato sobre el FWHM del espectro de FL se muestra en la Figura 1.5. Ahí se puede observar que el ancho de línea del espectro de FL decrece conforme la temperatura del sustrato T_{sub} decrece debido a la reducción de las fluctuaciones en los tamaños de los QDs.

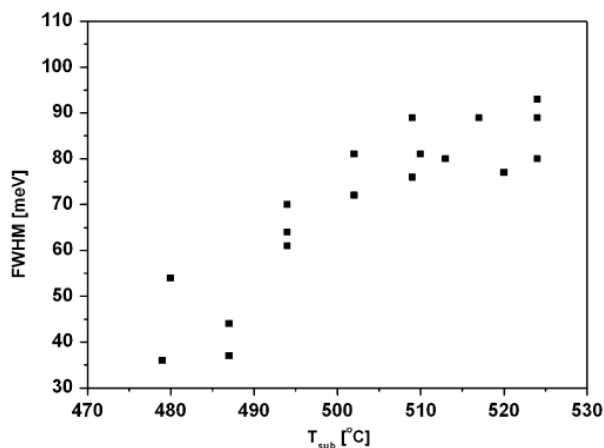


Fig.1.5 Dependencia del FWHM de Fotoluminiscencia con respecto de la temperatura de crecimiento. [4]

Como conclusiones de este estudio se tiene que incrementando la temperatura del sustrato, la densidad de los QDs decrementa mientras que el tamaño de los puntos incrementa, además el FWHM de la señal de FL incrementa debido a la no uniformidad en el tamaño de los QDs, por lo tanto que la densidad de los puntos depende fuertemente de los parámetros de crecimiento, en particular la temperatura de crecimiento juega un papel muy importante en la densidad y tamaño así como en sus propiedades de fotoluminiscencia de los puntos, en otras palabras, manteniendo las condiciones de crecimiento constantes y sólo variando la temperatura del sustrato es posible tener un control directo de la densidad de QDs así como de su altura en más de un orden de magnitud.

1.3.2 Velocidad de crecimiento de los puntos cuánticos.

En el mismo trabajo, A. Gushterov et al. [4] estudiaron la influencia de la velocidad de crecimiento en la densidad de QDs así como su influencia en el FWHM de FL de las muestras. Para esto las muestras fueron crecidas por el procedimiento descrito en la sección

anterior pero con dos velocidades de crecimiento distintas, estas velocidades fueron: 0.28nm/s y 0.14nm/s.

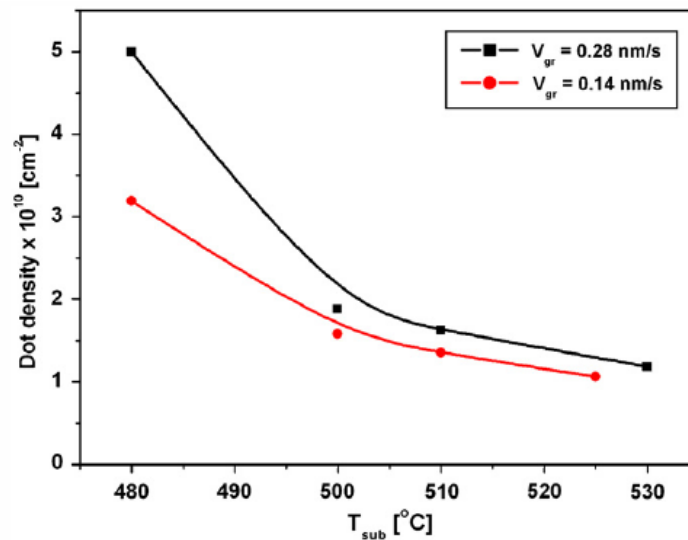


Fig.1.6 Densidad de puntos de InGaAs/GaAs como función de la temperatura para dos velocidades de crecimiento diferentes. [4]

La figura 1.6 muestra la dependencia en la velocidad de crecimiento de la densidad de QDs, se puede ver que la densidad de los puntos a una temperatura de 480 °C es mayor para la velocidad de crecimiento más grande (0.28nm/s) mientras que a temperaturas mayores a 500°C la diferencia de densidades de QDs entre ambas velocidades de crecimiento decrece. Esto significa que con el incremento de la temperatura del sustrato la influencia de la velocidad de crecimiento en la densidad de QDs decrece.

Como conclusión la densidad de los puntos depende de las Velocidades de crecimiento de GaAs e InAs principalmente a bajas temperaturas, mientras que a altas temperaturas esta dependencia decrece.

Con este trabajo se demostró que controlando los parámetros de crecimiento es posible tener QDs con ultra bajas densidades, (del orden de 10^8cm^{-2}) y estructuras con una alta densidad de puntos con picos de fotoluminiscencia estrechos sobre sustratos de GaAs (100).

1.3.3 Cambio en la composición de la capa de recubrimiento $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Zhichuan Niu et al. [5] estudiaron el corrimiento al rojo en la emisión de longitudes de onda de QDs autoensamblados de InGaAs/GaAs cubiertos por una capa de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con tres fracciones molares diferentes de In ($x = 0.1, 0.2$ y 0.3 respectivamente).

Se prepararon dos series de muestras para este estudio; éstas fueron crecidas mediante un sistema VG V80HMKII MBE en un sustrato semiconductor de GaAs (100). Las primeras cuatro muestras fueron QDs de InAs/GaAs, las siguientes tres muestras fueron QDs de $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}/\text{GaAs}$. Las secuencias de crecimiento fueron las siguientes:

Para las primeras cuatro muestras se creció primeramente una capa colchón a una temperatura de 600°C de GaAs, después se depositaron dos monocapas (Mono Layer ML, capa de átomos depositada) de InAs a una temperatura de 450°C para formar los QDs, después de una interrupción de 5 s se creció por encima de los QDs de InAs una capa de 3nm de espesor de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ a una temperatura de 450 °C con diferentes fracciones molares de In ($x = 0$ (i.e. GaAs), 0.1, 0.2 y 0.3) para las cuatro muestras, seguida de una capa cubierta de GaAs de 50nm de espesor.

Para las otras tres muestras las capas epitaxiales fueron las mismas que se describieron anteriormente excepto por las 16 ML de $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ las cuales fueron crecidas por métodos de deposición cíclica de ML. Para cada ciclo de $(\text{InAs})_n/(\text{GaAs})_n$, $n=1$ ML, 1.5 ML y 2.0 ML para las tres muestras respectivamente.

La figura 1.7 muestra el espectro de FL a 10K, en el cual la gráfica insertada muestra el espectro de fotoluminiscencia integrada contra el FWHM, para todas las muestras con diferentes contenidos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en las capas. En el caso de los QDs de InAs, cubiertos con GaAs ($x = 0$), el pico de fotoluminiscencia está localizado en $0.97\mu\text{m}$ (1.27 eV) con un FWHM de 62meV. En todos los casos de QDs cubiertos con una capa de 3nm de espesor de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x \geq 0.1$), con la intensidad integrada se observaron considerables corrimientos al rojo en sus picos de energía de FL.

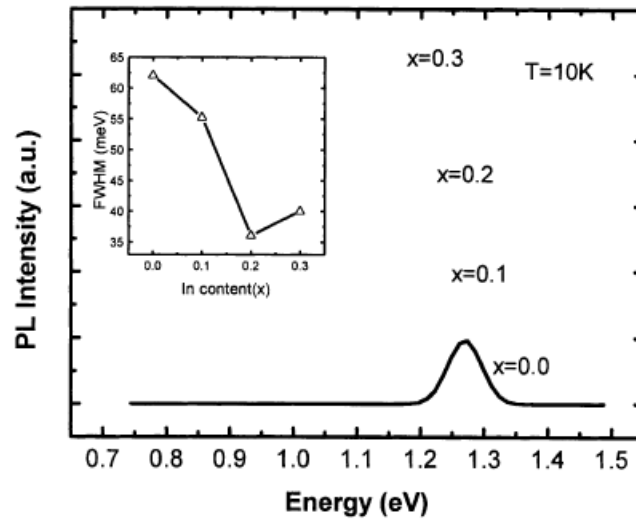


Fig.1.7 Espectro de InAs cubiertos por una capa de 3 nm de espesor de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0, 0.1, 0.2$, and 0.3) con una intensidad de excitación de 1 mW. La grafica insertada muestra el ancho de línea del espectro de FL contra el contenido de In [5].

De sus resultados se estimó que para $x = 2$, el corrimiento al rojo de la energía emitida tenía un valor de 88 meV. Así mismo estimaron todos los corrimientos al rojo de las muestras y los compararon con sus resultados experimentales Figura 1.8.

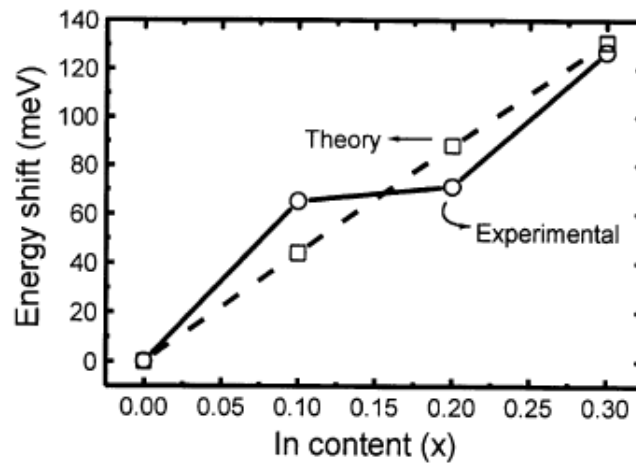


Fig.1.8 Datos calculados (línea discontinua) y experimentales (línea continua), de el cambio en energía de FL contra el contenido de In en la capa cubierta de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [5].

Al comparar los datos teóricos con los experimentales se concluye que la principal causa del corrimiento al rojo en el pico de energía de FL se debe al efecto de las capas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Finalmente Zhichuan Niu et al. [5] explican que el corrimiento hacia el rojo en el espectro de fotoluminiscencia de los QDs cubiertos por capas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con $x \geq 0.1$ se debe a la reducción de esfuerzos distintos al intermezclado de InAs/GaAs en los QDs de InAs.

1.3.4 Apilamiento de varias capas de puntos cuánticos.

X.Q. Meng et al. [6] Investigaron la dependencia de las propiedades ópticas en capas simples y multicapas de QDs autoensamblados de InAs.

Para este estudio se crecieron muestras en un sustrato semiconductor de GaAs(100), las estructuras investigadas consisten de N ($= 1, 3, 5, 7$) monocapas de QDs de InAs seguidas por una capa de 4nm $\text{In}_{0.225}\text{Ga}_{0.775}\text{As}$, y las capas adyacentes de QDs/InGaAs fueron separadas por una capa espaciadora de GaAs de 20nm. La temperatura de crecimiento de los QDs en el sustrato fue de 520°C y la temperatura de crecimiento del GaAs fue de 580°C. Después de la deposición de los puntos cuánticos de InAs, se preparó una capa colchón de GaAs de 100nm, una barrera de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ y otra capa de GaAs de 100nm de espesor.

Una vez crecidas las muestras, se obtuvo los espectros de FL del estado base y del primer estado excitado, la fuente de excitación utilizada fue un láser de iones de Argón con longitud de onda de 514nm.

La Figura 1.9a muestra el espectro de FL para las muestras con diferentes capas de QDs a una temperatura de 15K con una potencia de excitación de 50mW.

Se observa que la muestra con 3 capas de QDs tiene el pico de FL del estado base mucho más grande mientras que la muestra con 5 capas es la segunda en intensidad y la que contiene 7 capas es la tercera teniendo que la muestra con una sola capa es la que tiene el pico de FL más bajo.

El equipo de X.Q. Meng et al. [6] explica lo anterior de la siguiente forma: la fotoluminiscencia aumenta por efecto del aumento en la densidad volumétrica de los QDs cuando el numero de capas aumenta de 1 a 3 capas, pero cuando el numero de capas aumenta de 3 a 7 capas, la densidad volumétrica también sigue aumentando sin embargo también lo hace el número de defectos tales como dislocaciones causando un decremento en el espectro de FL.

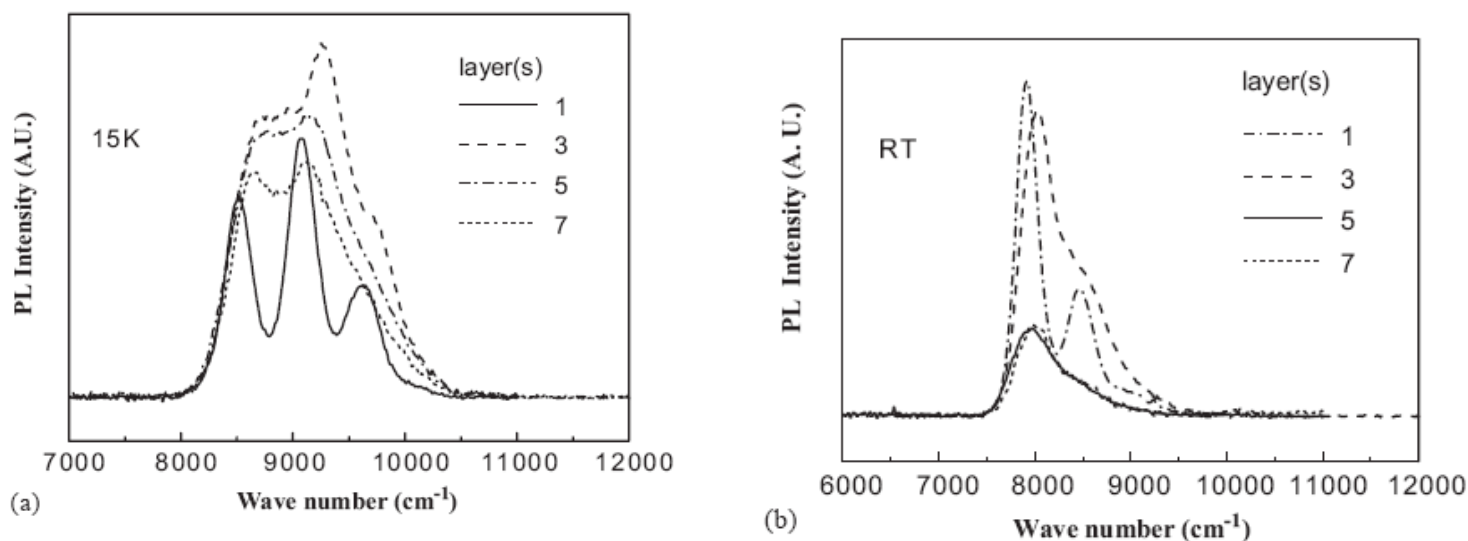


Fig. 1.9. Espectro de FL de las muestras con $N(= 1, 3, 5, 7)$ capas de QDs bajo una potencia de excitación de 50mW a) a 15K b) a temperatura ambiente. [6]

La figura 1.9b muestra el espectro de fotoluminiscencia de las muestras con $N (= 1, 3, 5, 7)$ capas de QDs bajo una potencia de excitación de 50mW a temperatura ambiente. En ella se observa que el espectro de FL de las muestras con multicapa es menor que en la capa simple, esto significa que los electrones en los QDs están siendo capturados en los defectos y emitiendo fonones a temperatura ambiente con mayor facilidad a temperatura ambiente que a 15K. Entonces se tiene que el efecto de los defectos es que actúan como centros no radiativos de recombinación y su influencia es mucho mayor a temperatura ambiente.

X.Q. Meng et al. [6] mencionan que los otros dos picos de FL que aparecen en la Figura 1.9a se deben a el primer estado excitado y al segundo estado excitado, además mencionan que contrario a lo esperado con la distribución de Fermi-Dirac para electrones en la cual el pico de intensidad para los estados excitados debería crecer pero al comparar las figuras 1.9a y 1.9b se observa que sucede lo contrario.

Al comparar la razón entre los picos de FL del primer estado excitado y el estado base en las Figuras 1.9a y 1.9b se encuentra que la intensidad de fotoluminiscencia del primer estado excitado es mayor que aquella en el estado base a 15K. Pero la intensidad de FL del primer estado excitado es menor que aquella del estado base a temperatura ambiente.

Para las muestras con multicapas, la razón entre la intensidad de FL del primer estado excitado y del estado base es menor que la de la muestra con capa simple tanto a 15K como a temperatura ambiente, lo cual es más evidente conforme el numero de capas de QDs crece. Este resultado puede mostrar que en muestras con multicapas de QDs los electrones

en el estado excitado se relajan fácilmente en el estado base, pero otra posibilidad es que los electrones en el estado excitado se relajen en los defectos.

En multicapas de puntos cuánticos se tiene que la densidad de defectos es mucho mayor que en aquellas muestras que contienen una sola capa, esto hace que la velocidad de recombinación no radiativa alrededor de los defectos se incremente, y el numero de electrones que escapan aumente para conservar el balance del proceso.

Tabla 1.1 Energía del pico de PL (E_0) del estado base y su FWHM y la separación del nivel discreto de energía $\Delta E = E_1 - E_0$ a temperatura ambiente. [6]

Energía del pico de FL (E_0) del estado base y su FWHM, y la separación del nivel de energía discreto ($\Delta E = E_1 - E_0$) a temperatura ambiente					
Numero de capas de QD	1	3	Primeras 5	7	Segundas 5
$E_0(meV)$	1.28	1.26	1.26	1.254	1.29
FWHM(meV)	38.1	42.9	46.6	46.7	31.7
$\Delta E(meV)$	66.0	60.4	52.4	45.1	71.1

La Tabla 1.1 [6] muestra la energía del pico de FL del estado base y su FWHM y la dependencia de la separación del nivel discreto en el número de capas. La última columna presenta los mismos datos pero para una segunda muestra con 5 capas de QDs crecidas en las mismas condiciones que las anteriores pero con la diferencia de que la capa espaciadora se creció a una temperatura de 520 °C con el objetivo de estudiar la dependencia en la

temperatura pues se observó que la temperatura del sustrato se incrementaba durante la formación de los QDs de InAs.

De la tabla 1 se observa que un incremento en el numero de capas la energía E_0 tiene un corrimiento hacia el azul y el FWHM se ensancha, esto es causado por el intermezclado del In y Ga entre los QDs y la capa espaciadora.

La Figura 1.10 muestra el espectro de FL de ambas muestras con 5 capas de QDs a temperatura ambiente, se observa una mejora en la calidad de la segunda muestra en comparación con la primera e inclusive con la muestra que contiene solo una capa de QDs. El corrimiento al rojo que se observa se debe a que el crecimiento de la capa espaciadora a una temperatura de sustrato más baja provoca un decremento en la interdifusión de los átomos de In y Ga en gran medida.

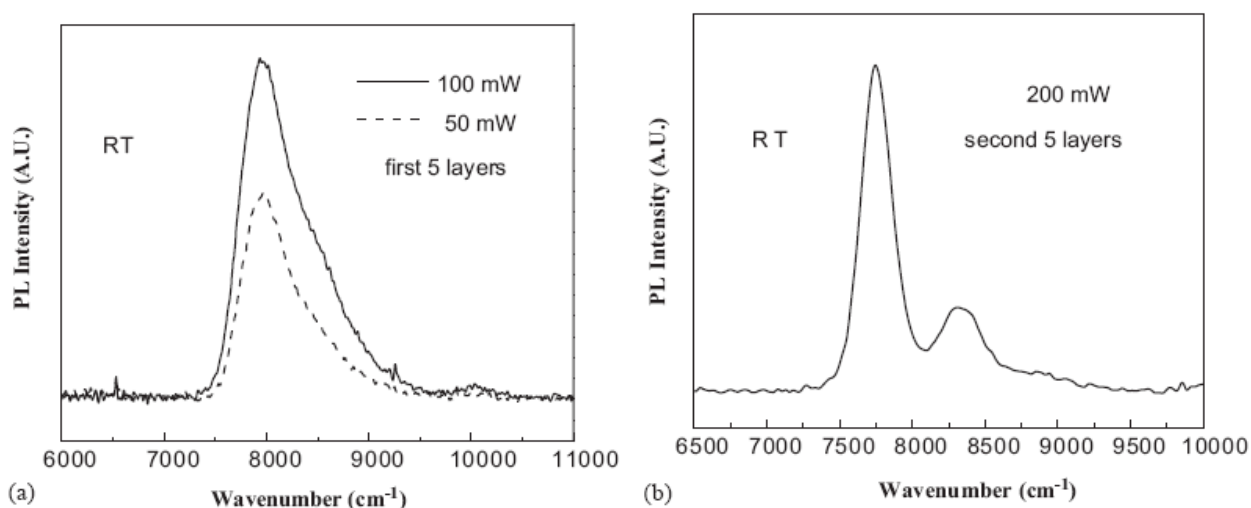


Figura 1.10. a) Espectro de FL de la primera muestra de 5 capas de QDs bajo una excitación de 50mW y de 100mW. b) Espectro de FL de la segunda muestra de 5 capas de QDs bajo una excitación de 200mW. [6]

Finalmente X.Q. Meng et al. [6] proponen que en el caso de aplicaciones tecnológicas como en láseres y fotodetectores las muestras con multicapas tienen un mejor desempeño que las que contienen una sola capa, si es que estos trabajan en temperaturas bajas; por el contrario, a temperatura ambiente las muestras con una sola capa se desempeñan mejor como regiones activas en estos dispositivos.

1.3.5 Espesor de la capa espaciadora de GaAs.

Chang Yun Lee et al. [7] Investigaron la dependencia de las propiedades ópticas de QDs de InAs/GaAs apilados verticalmente en el espesor de la capa espaciadora de GaAs.

Las muestras utilizadas en este estudio se prepararon de la siguiente forma, en un sustrato tipo n de GaAs(100) y mediante MBE se crecieron las siguientes estructuras: una capa cubierta de $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ de $200\text{\AA}$ de grosor, una capa de GaAs de $500\text{\AA}$ uno y tres periodos de 3.34 monocapas de QDs de InAs y una capa espaciadora de 30, 100, 200 o $300\text{\AA}$, una capa barrera de $500\text{\AA}$, una capa barrera de $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ de $500\text{\AA}$ y una capa colchón de $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ de $300\text{\AA}$.

La Figura 1.11 muestra el espectro de FL medido a 10K para (a) un periodo de QDs de InAs/GaAs y (b) tres periodos con capas espaciadoras de 30(c), 100(d), 200(e) y $300\text{\AA}$ (e).

La posición del pico de FL corresponde a las transiciones a una energía mayor con un incremento en las capas apiladas de QDs de InAs/GaAs pero cuando se incrementa el espesor de la capa espaciadora de 100 a $300\text{\AA}$ se observa una transición a energías menores y la intensidad de luminiscencia disminuye.

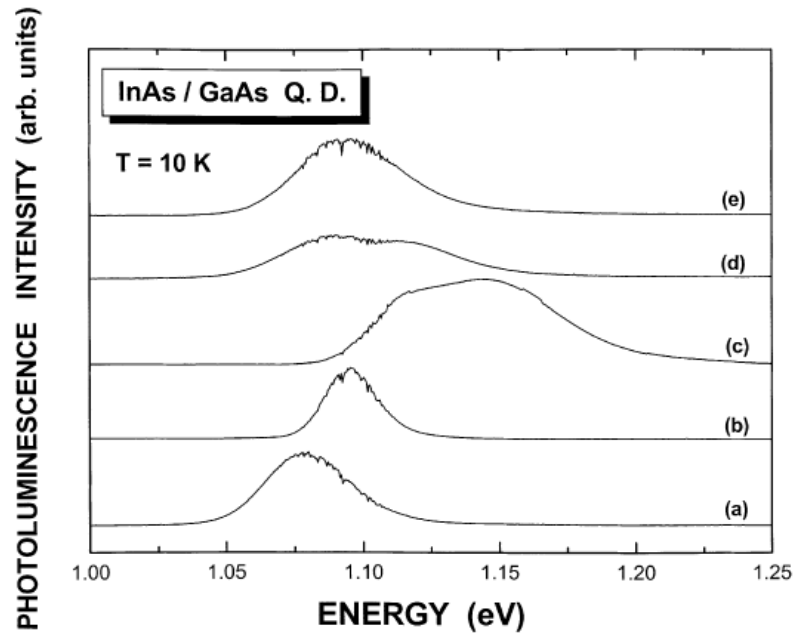


Figura 1.11. Espectro de FL de QDs de InAs embebidos en barreras de GaAs para un periodo de QDs de InAs/GaAs (a), tres periodos de QDs de InAs/GaAs con una capa espaciadora de GaAs de (b) 30 Å, (c) 100 Å, (d) 200 Å y (e) 300 Å. [7]

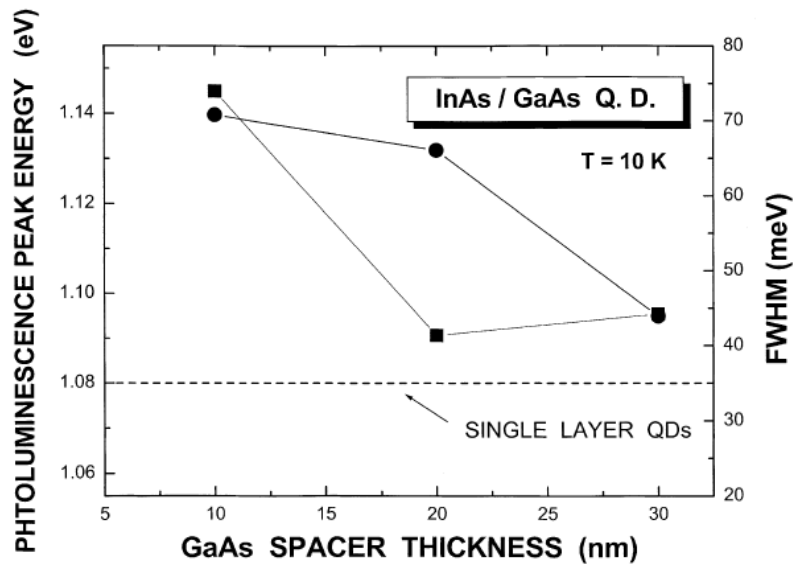


Figura 1.12. Picos de energía de fotoluminiscencia y FWHM de fotoluminiscencia para InAs/GaAs en función del espesor de las capas espaciadoras. [7]

En la Figura 1.12. se muestra como el FWHM decrece conforme el espesor de la capa espaciadora incrementa.

En este trabajo Chang Yun Lee et al. [7] concluyen que el cambio a energías mayores conforme el espesor de las capas disminuye se debe a un fuerte acoplamiento entre los arreglos de QDs de InAs/GaAs y el decremento en el ancho de línea de FL conforme al incremento en el espesor de las capas se debe a un mejoramiento de la homogeneidad de tamaños de los QDs.

1.3.6 La influencia del recocido térmico en las estructuras con puntos cuánticos.

Byounggu Jo et al. [8] estudiaron la cinética de la interdifusión de los elementos del grupo III en la interface entre QDs de InAs y barreras de InAlGaAs mediante un recocido posterior al crecimiento de los QDs y mediante fotoluminiscencia.

Para este estudio se crecieron muestras de QDs en un sustrato tipo n de InP(100) por un sistema V80 de MBE utilizando fuentes solidas. Se crecieron siete capas apiladas de QDs separadas por capas espaciadoras de InAlGaAs de 29.5nm de grosor en el modo de autoensamblado.

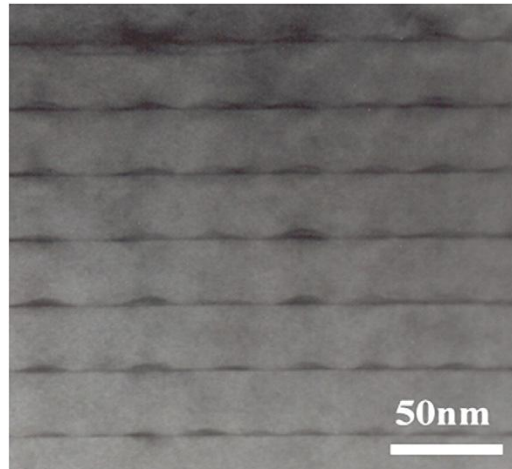


Figura 1.13. Imagen de TEM de la sección transversal de las siete capas apiladas de QDs de InAs/InAlGaAs.

[8]

En la Figura 1.13 se observa una imagen de TEM de la sección transversal de la muestra estudiada, se aprecia que en la formación de QDs no se formaron dislocaciones.

La Figura 1.14 muestra el espectro de FL a diferentes temperaturas de recocido, la emisión de longitudes de onda de la muestra con un recocido a 550 °C muestra un corrimiento hacia el rojo en 57nm comparado con la muestra sin recocido (As-Grown), para la cual se tiene que la emisión de longitudes de onda tiene un corrimiento hacia el azul conforme la temperatura de recocido aumenta hasta 650 °C. Este comportamiento es un poco distinto con respecto a lo que sucede en QDs basados en GaAs para QDs de In(Ga)As en los cuales solo ocurre el corrimiento hacia el azul conforme se aumenta la temperatura del recocido.

Este comportamiento lo atribuyen a la interdifusión de elementos del grupo III en la interface de los QDs de InAs con la barrera de InAlGaAs.

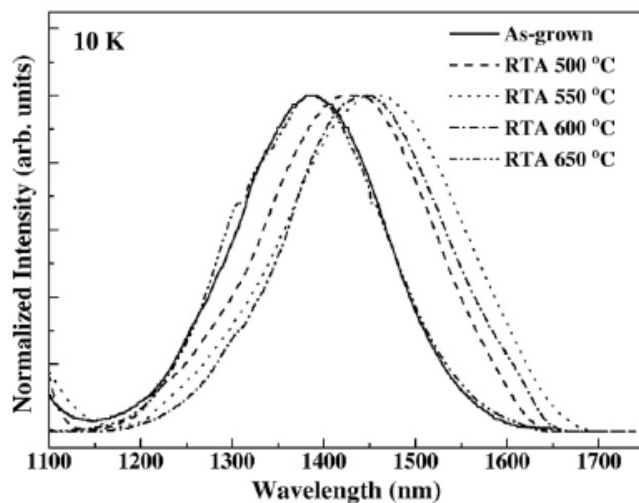


Figura 1.14. Espectro de PL de QDs de InAs/InAlGaAs sometidos a un proceso de Recocido térmico rápido (rapid thermal annealing RTA). [8]

Finalmente la Figura 1.15 muestra la emisión de longitudes de onda como función de la temperatura de recocido. La línea punteada es solo una referencia, claramente se observa un corrimiento al rojo en el rango de temperaturas de 500 °C a 550 °C y un corrimiento al azul en el rango de 600 °C a 650 °C.

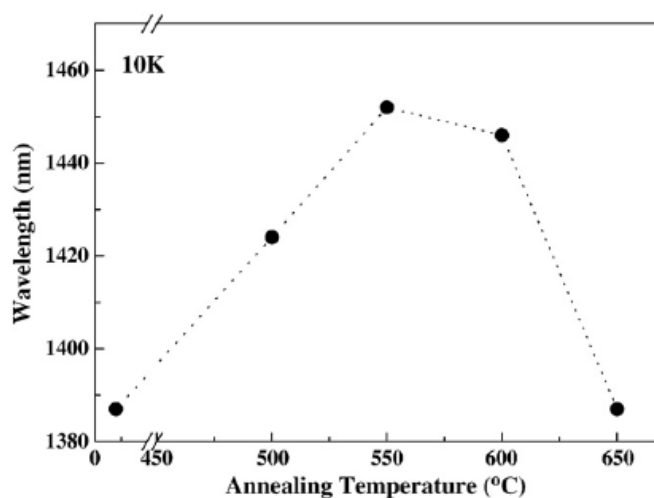


Figura 1.15. Emisión de longitudes de onda con respecto de la temperatura de recocido. [8]

1.3.7 Esfuerzos elásticos.

Los campos de esfuerzos elásticos dentro de heteroestructuras de QDs afectan fuertemente las propiedades electrónicas y optoelectrónicas en la vecindad de los QDs, así que la determinación de estos campos de esfuerzos en los alrededores de los QDs es necesaria.

M.K. Kuo et al. [9] estudiaron este problema de forma teórica, ellos proponen un modelo basado en la teoría lineal de elasticidad el cual desarrollan para analizar un campo de esfuerzos tridimensional.

Para este propósito, proponen un QD de InAs de forma piramidal con base cuadrada embebido en una matriz de GaAs, suponen que el InAs creció en una capa de mojado delgada sobre un sustrato de GaAs(100) por heteroepitaxia seguido por una formación coherente de islas y finalmente las islas de QDs son cubiertas por deposición de material de sustrato.

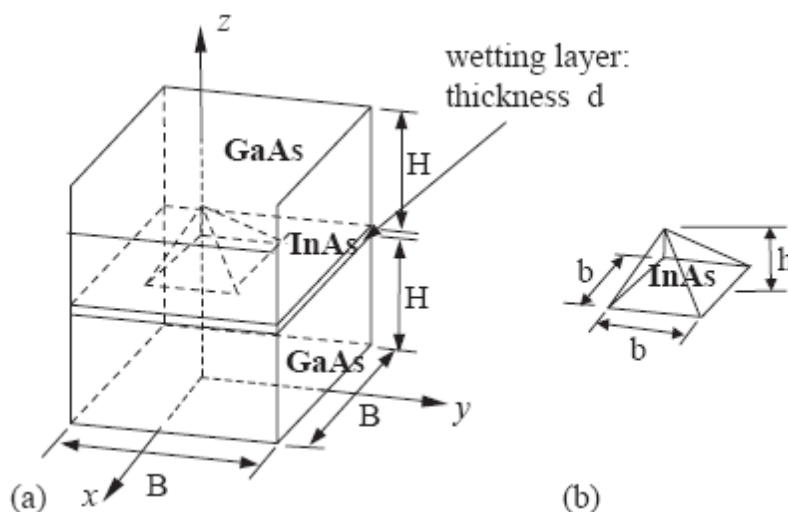


Figura 1.16. Geometría del sistema de QDs considerado a) Heteroestructura de QD de InAs/GaAs. b) Isla de

QD de InAs donde $B = H = 30\text{nm}$, $d = 0.5\text{nm}$, $b = 12\text{nm}$ y $h = 6\text{nm}$. [9]

Entonces definen en el plano de la red de In el coeficiente de desajuste $(\varepsilon_0)_{xx} = (\varepsilon_0)_{yy}$ (mismatch) como:

$$(\varepsilon_0)_{xx} = (\varepsilon_0)_{yy} = \frac{a_s - a_d}{a_d} \quad (1.9.1)$$

Con a_s y a_d las constantes de red del sustrato y del material de que está formado el punto respectivamente.

Además considerando que el esfuerzo fuera del plano es elástico se tiene que:

$$(\varepsilon_0)_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}(\varepsilon_0)_{xx} \quad (1.9.2)$$

En este caso tanto al GaAs como al InAs son tratados como materiales cúbicos con tres módulos de elasticidad independientes, C_{11} , C_{12} , C_{44} . Con ε_0 es el esfuerzo normal inicial en las direcciones x, y, z.

Luego de acuerdo a la teoría lineal de elasticidad la relación entre los esfuerzos σ_{ij} , los esfuerzos totales ε_{kl} y los esfuerzos iniciales puede ser expresada como:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} [\varepsilon_{kl} - (\varepsilon_0)_{kl}] \quad i, j, k, l = x, y, z \quad (1.9.3)$$

Con C_{ijkl} el modulo elástico.

Luego consideran que pueden escribir el potencial de confinamiento como la suma de las energías de compensación de la banda de conducción (o de valencia) V_{band} y el potencial inducido por los esfuerzos.

$$V(r) = V_{band}(r) + V_{strain}(r) \quad (1.9.4)$$

Entonces, debido a que los esfuerzos modifican la estructura de bandas, también modifican las propiedades ópticas de los sistemas de QDs

Finalmente M.K. Kuo et al [9]. calculan las transiciones de energía las cuales quedan en el rango de 836 a 1353nm como se muestra en la Figura 1.17.

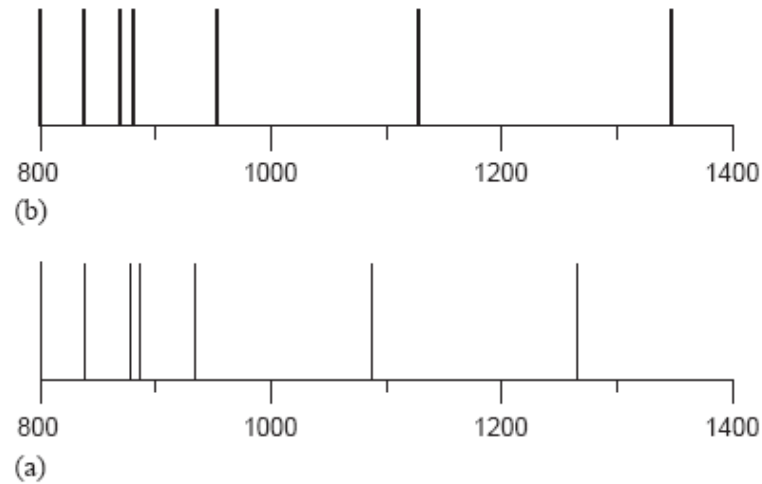


Figura 1.17. Longitudes de onda de las transiciones de energía calculadas por a) método convencional. b) método propuesto. [9]

1.4 Variaciones no homogéneas en la intensidad de fotoluminiscencia.

En estudios anteriores, T. V. Torchynska et al. investigaron el espectro de fotoluminiscencia en QDs inmersos en multi-pozos cuánticos de $\text{In}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$. Los detalles de estas muestras se encuentran en [10, 11]. En [10] se presentan las bandas de fotoluminiscencia conectadas con el estado base (GS) y multiestados excitados en los QDs, además se revelan transiciones ópticas no equidistantes.

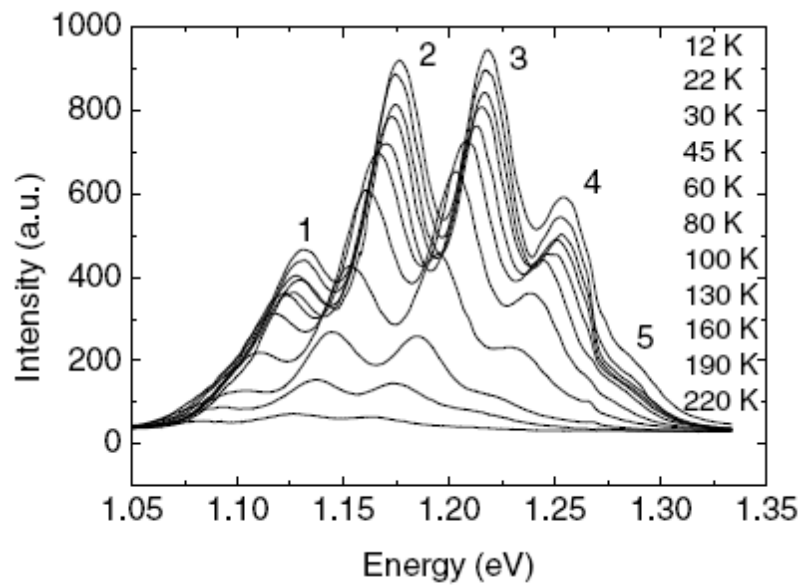


Figura 1.18. Espectro de fotoluminiscencia medido con una potencia de luz de $300\text{W}/\text{cm}^2$, en la figura se indican diferentes temperaturas. [10]

En la figura 1.18 se muestra el espectro de fotoluminiscencia a diferentes temperaturas, obtenido con un nivel de excitación de $300\text{W}/\text{cm}^2$. Se observan cinco bandas de fotoluminiscencia, de las cuales las tres primeras tienen una forma Gaussiana. La banda de

fotoluminiscencia con la menor energía es atribuida a la recombinación de portadores entre el estado base de los QDs mientras que las bandas de mayor energía son atribuidas a transiciones ópticas en los estados excitados [10].

La figura 1.19 muestra el cambio en los picos de fotoluminiscencia con respecto a la temperatura en un rango de 12 a 220K, el corrimiento hacia el rojo es de $\sim 50\text{meV}$ para todas las bandas de fotoluminiscencia.

Se hizo un ajuste para la dependencia del pico de emisión como función de la temperatura utilizando la expresión empírica de Varshni $E(T) = E(0) - \alpha T^2 / T + \beta$, ajustando los parámetros $E(0)$, α y β obteniendo un valor para α cercano al valor del GAP de InAs en bulto y para β cercano al valor del GAP para $\text{In}_{0.21}\text{Ga}_{0.79}\text{As}$ [10].

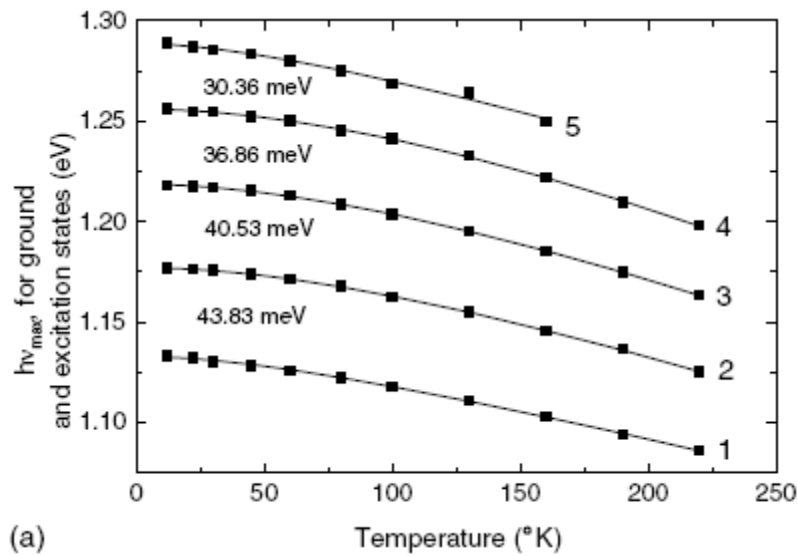


Figura 1.19. Dependencia de la posición del pico de fotoluminiscencia con respecto a la temperatura para el estado base y los estados excitados 1-4. [10]

En estudios posteriores en muestras con diferente composición de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0.10, 0.15, 0.20$ y 0.25) se observó que las estructuras $\text{InAs}/\text{InGaAs}$ sufrían de inhomogeneidades en los parámetros de fotoluminiscencia y se determinó que la fuente principal de estas inhomogeneidades era debida a la variación en el tamaño del QD a lo largo de la oblea, y que un cambio en la posición del pico de fotoluminiscencia era debido a la descomposición parcial de los QDs de InAs en condiciones de esfuerzo elástico muy alto y la relajación parcial del estrés en las estructuras con $x = 0.15$ [12].

1.5 Conclusiones de capítulo.

1.- Los factores tecnológicos de la creación de las estructuras tipo InGa/GaAs InAs QDs tienen una gran influencia en las propiedades de los InAs QDs. Para obtener una estructura con QDs adecuada para la aplicación en optoelectrónica se requiere de un gran control de las condiciones de crecimiento así como del entendimiento de cómo afecta cada uno de los parámetros de crecimiento a la FL en este tipo de estructuras.

2.- El compromiso entre los parámetros de crecimiento tiende a provocar tanto inhomogeneidades estructurales como inhomogeneidades en las propiedades de emisión de luz en las estructuras tipo DWELL (dot in a well).

3. La mayoría de las publicaciones están relacionadas con la investigación de QDs de InAs en pozos cuánticos de GaAs . Sin embargo las propiedades ópticas de puntos cuánticos de InAs embebidos en pozos cuánticos de $\text{InGaAs}/\text{GaAs}$, aun no han sido del todo investigadas.

Capítulo 2 Muestras y Métodos.

2.1 Muestras de investigación.

Las estructuras Dot-in a Well (DWELL) fueron crecidas por una fuente elemental de deposición por haz molecular (MBE) en un reactor V80H, éstas consisten en una capa de QDs autoensamblados de InAs inmersos en un pozo cuántico (QW) de 12nm de espesor de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}/\text{GaAs}$. Sobre un sustrato de 2 in de GaAs SI (100) se creció una capa colchón de 200nm de GaAs, posteriormente se creció una capa colchón de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ de 2nm, luego se depositó una cubierta equivalente a 2.4 monocapas (ML) de QDs de InAs la cual fue confinada por una cubierta de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ de 10nm y por una barrera de GaAs de 100nm como se ve en la figura 2.1.

En la figura 2.1 también se muestra una capa de mojado WL de InAs la cual aparece por la manera en que son crecidas las muestras, esta capa de mojado es pequeña en relación al resto de las capas sin embargo se indica pues su existencia explica parte del comportamiento de las muestras estudiadas como se verá más adelante.

Las estructuras estudiadas se crecieron a cinco diferentes temperaturas: 470 °C (#1), 490 °C (#2), 510 °C (#3), 525 °C (#4), y 535 °C (#5), durante la deposición de las regiones activas de InAs y los pozos de InGaAs; para el resto de las capas de la estructura la temperatura de crecimiento estuvo en un rango de 590 °C – 610 °C. Todas las capas fueron crecidas con una velocidad de crecimiento de 0.30 ML/s, sin embargo durante la formación de QDs el proceso provee una deposición de 2.4 ML con una velocidad de 0.053 ML/s.

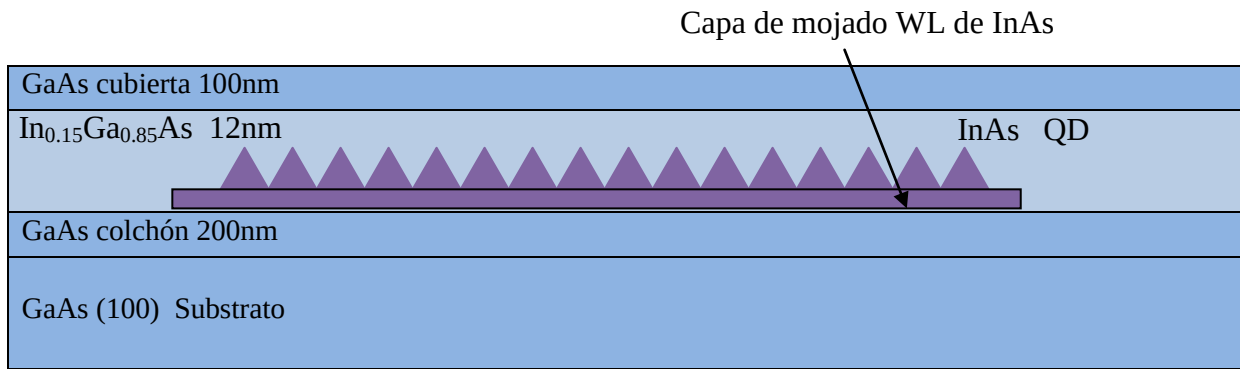


Figura 2.1 Esquema de la estructura DWELL.

Estas estructuras fueron creadas en el Center of High Technology Materials at University of New Mexico en Albuquerque, USA, en el marco del proyecto de CONACYT, México (Proyecto CONACYT 058358 Directora Dra. T. Torchynska).

Mediante un estudio de microscopia de fuerza atómica (MFA) se determinó que la densidad de QDs en las muestras arriba mencionadas decrece monótonamente de 1.1×10^{11} (#1) a $1.3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ (#5) con el incremento de la temperatura de crecimiento, al mismo tiempo el tamaño lateral de los QDs incrementa de 12 a 28nm [13].

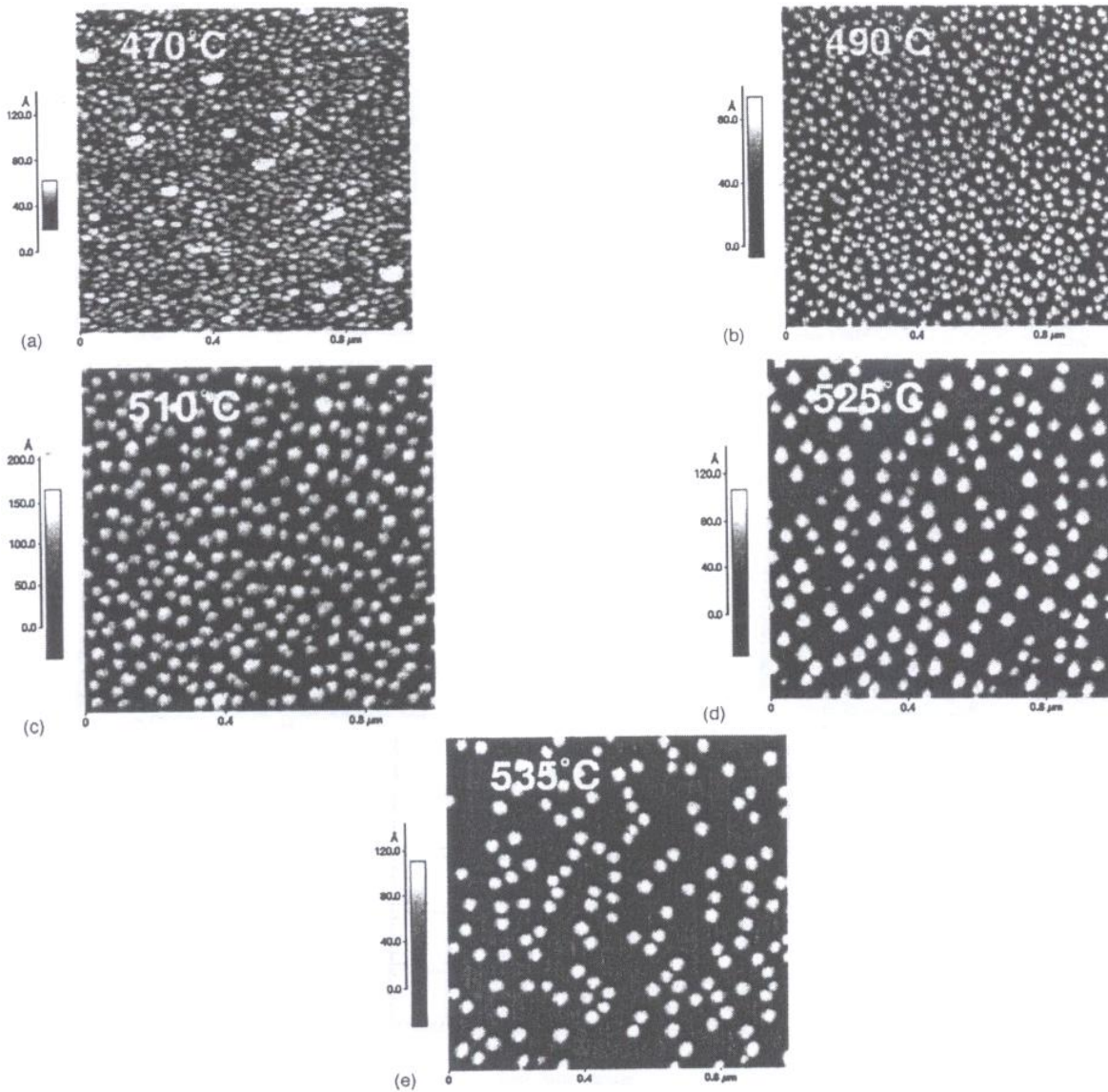


Figura 2.2 Imágenes de microscopia de fuerza atómica de las muestras crecidas a distintas temperaturas [13].

La figura 2.2 muestra el cambio en la densidad superficial de puntos cuánticos con respecto a la temperatura de crecimiento [14]. En la imagen de MFA se observa claramente como disminuye la densidad de puntos cuánticos conforme aumenta la temperatura de crecimiento, también se observa como el tamaño de los puntos aumenta.

Las variaciones en tamaño y densidad cambian de manera monótona conforme a lo reportado en la literatura [14]:

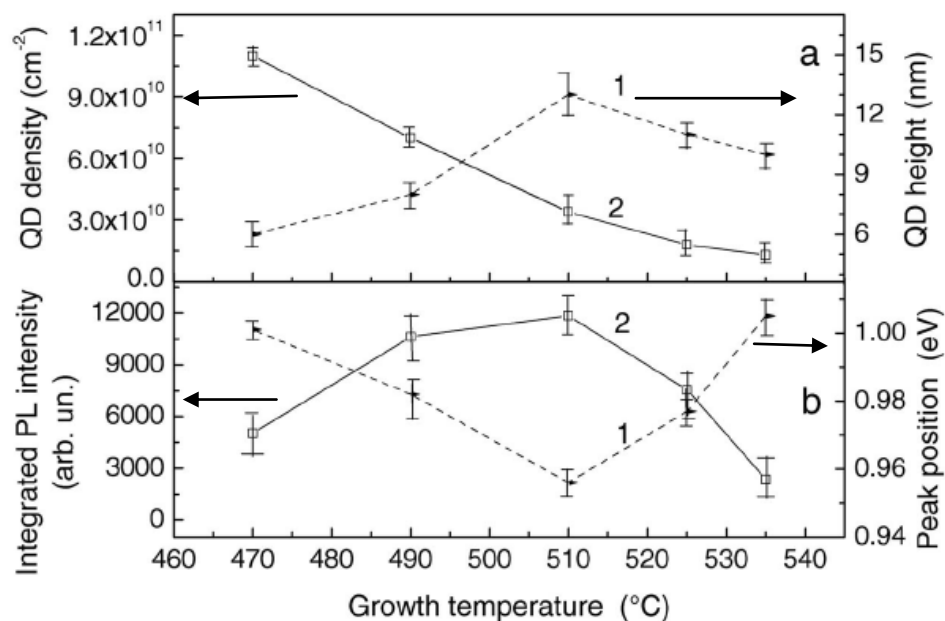


Figura 2.3 (a).densidad promedio y tamaño promedio de QDs con respecto a la temperatura de crecimiento. (b) Intensidad Integrada promedio y posición del pico de fotoluminiscencia del estado base con respecto a la temperatura de crecimiento. [14]

En la figura 2.3 se muestra cómo es el cambio de los distintos parámetros (densidad, tamaño, intensidad integrada de fotoluminiscencia y posición del pico de emisión de los puntos cuánticos) con respecto a la temperatura de crecimiento. Claramente se muestra un comportamiento no monótono de la variación de la intensidad integrada así como de la posición del pico de fotoluminiscencia con respecto de la temperatura de crecimiento de los puntos.

2.2 Metodología de Investigación.

La metodología a seguir es la realización de una serie de experimentos como lo son: i) fotoluminiscencia y su dependencia en la temperatura así como también ii) difracción de rayos X.

La fotoluminiscencia es uno de los métodos ópticos más utilizados en la industria de los semiconductores y puede detectar desde impurezas y defectos en materiales semiconductores hasta determinar el ancho de banda prohibida de los mismos.

Las muestras fueron colocadas en un criostato de He de ciclo cerrado donde la temperatura varia en un rango de 12 – 250 K. El espectro de fotoluminiscencia se obtuvo mediante la línea 514.5 de un láser de Cw Ar⁺- con una densidad de potencia de excitación en el rango de 500 W/cm².

Para la realización de las investigaciones propuestas, el grupo tiene los siguientes equipos en el **Laboratorio de Optoelectrónica de la ESFM –IPN:**

1. Para la investigación de emisión infrarroja, visible y ultravioleta: espectrómetro SPEX: 500M, JOBIN YVON-HORIBA, con dos detectores – Un fotodiodo de Ge y fotomultiplicador (GaAs) para área 200-900nm juntos con preamplificadores.

1. Para la investigación de superficies se cuenta con un Microscopio Electrónico de Barrido modelo, FEG 35-SIRION, con cabeza multimodal – NanoScope III-a. Un Microscopio de Fuerza Atómica de Digital Instrument Co.
2. Para la investigaciones de emisión con bajas temperaturas (8-450K) se cuenta con un Criostato (CCS-450) de ciclo cerrado de He, JANIS RESEARCH COMPANY, INC.



Figura 2.4 Equipo utilizado para hacer las mediciones de fotoluminiscencia.

2.2.1 Principios de Fotoluminiscencia.

Un fotón cuya energía iguale o exceda el valor del GAP de energía de un semiconductor, puede excitar un electrón en la banda de valencia hacia la banda de conducción a través del GAP, si el proceso reciproco es radiativo entonces se emite un fotón cuya energía es la diferencia entre el estado excitado y el estado inicial. Entonces el espectro emitido de FL muestra un pico característico relacionado a la energía de cada nivel excitado

2.2.2 Difracción de rayos X para la investigación de las características estructurales.

La difracción de rayos X es una técnica no destructiva y se utiliza en la determinación de la estructura cristalina, las fases presentes en los materiales, además, para determinar las tensiones internas, el tamaño de dominio en los materiales policristalinos, la orientación de un monocristal la textura en un policristal, etc.

2.2.3 Principios de dispersión de rayos X.

La distribución de las intensidades integradas y la posición de los picos de difracción son utilizados para determinar la estructura del material investigado. Las intensidades integradas de los haces difractados se pueden cuantificar, dependiendo del tamaño del dominio y de los defectos presentes mediante dos tratamientos generales; la teoría cinemática y la teoría dinámica. La teoría cinemática es aplicable en el caso de materiales con dominios pequeños, además se asume que un fotón de rayos X. el cual ha sido dispersado por un electrón, no puede ser dispersado otra vez. La teoría dinámica se aplica cuando los dominios coherentes son grandes y perfectos.

Para los experimentos de difracción de rayos X se utilizó un difractómetro modelo D-8 Advance (Bruker Co.) [figura 2.5] con la línea k_α de una fuente de cobre ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) de la Escuela Superior de Física y Matemáticas del IPN.

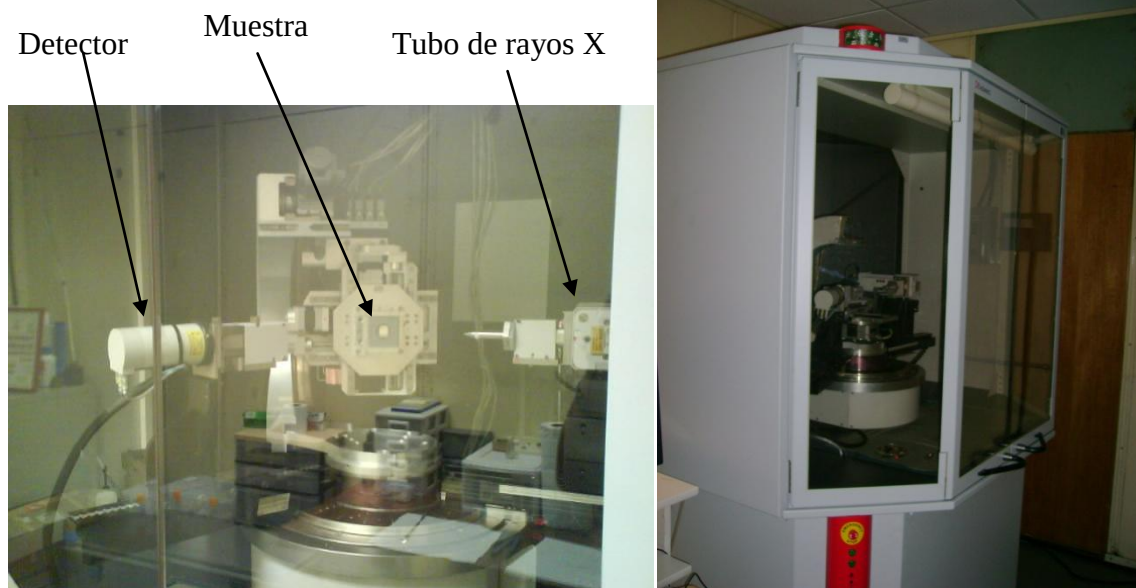


Figura 2.5 Equipo utilizado para hacer las mediciones de difracción de rayos X.

Capitulo 3 Fotoluminiscencia en dependencia de la temperatura.

Las propiedades ópticas que dependen de la temperatura son de suma importancia por sus posibles usos en dispositivos operando a temperatura ambiente [14]. Muchos trabajos han discutido la dependencia de la FL con la temperatura en estructuras que contienen puntos cuánticos de InAs en diferentes matrices. Todos estos trabajos estudian solamente la dependencia de la FL con la temperatura correspondiente sólo con la transición del estado base (Gs por sus siglas en ingles).

3.1. Espectros de fotoluminiscencia (FL) a diferentes temperaturas.

Las figuras 3.1 y 3.2 muestran el espectro de fotoluminiscencia para diferentes temperaturas de las muestras #1 and #2 con puntos cuánticos (QDs) crecidos a 470 y 490°C respectivamente medidos en un rango de temperaturas de 10K a 270K. En ambas se aprecia una banda gaussiana, la cual es típica de la recombinación de portadores entre estados localizados, esta banda es atribuida a la recombinación de excitones localizados en el estado base.

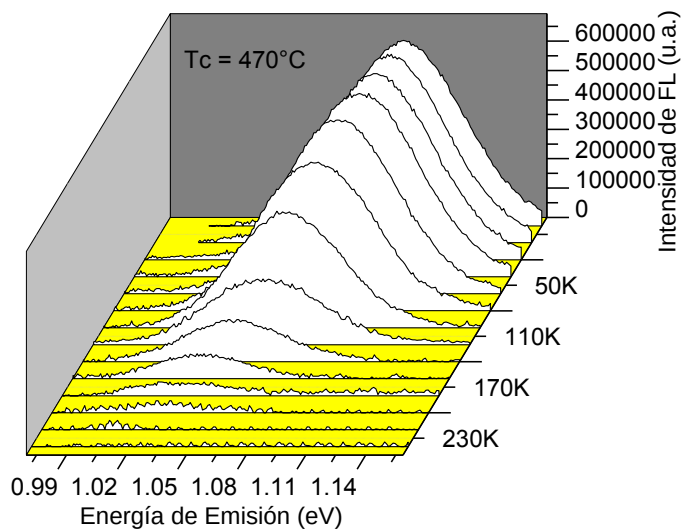


Figura 3.1 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #1 con distintas temperaturas.

En ambas figuras se aprecia un corrimiento hacia valores menores de la energía conforme la temperatura aumenta, además se aprecia un marcado cambio en la intensidad de fotoluminiscencia.

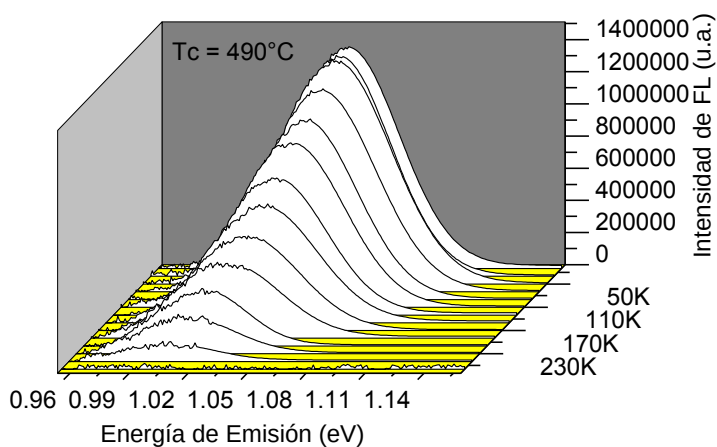


Figura 3.2 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #2 con distintas temperaturas.

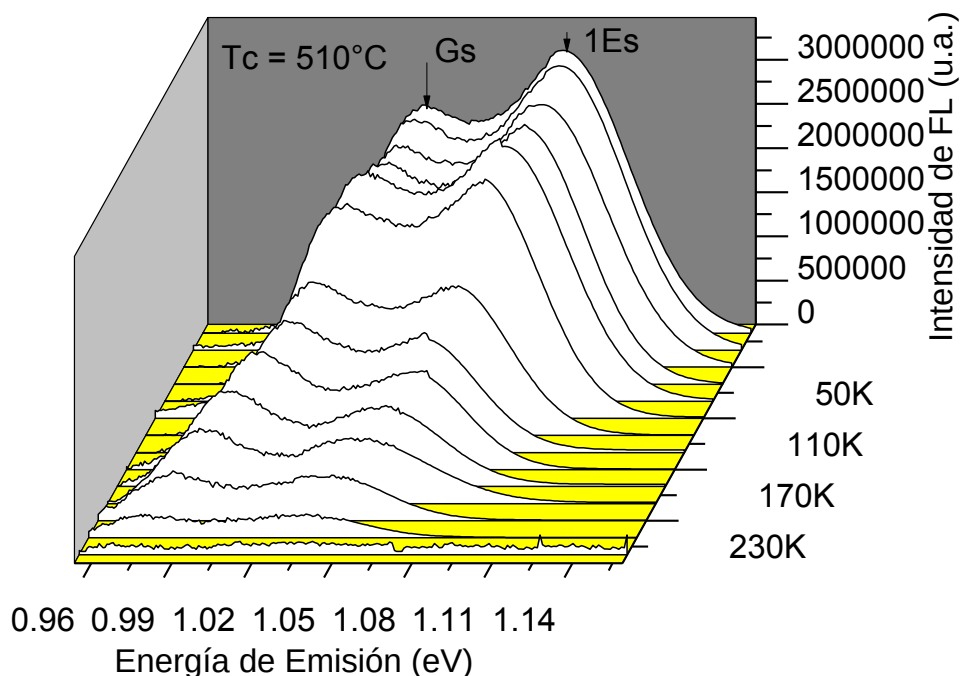


Figura 3.3 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #3 con distintas temperaturas.

La figura 3.3 muestra un espectro de fotoluminiscencia para la muestra #3 con QDs crecidos a 510°C, en este caso se aprecia dos bandas gaussianas, las cuales son típicas de la recombinación de portadores entre estados localizados.

La banda de menor energía es atribuida a la recombinación de portadores entre el Gs. La banda de mayor energía es atribuida a la recombinación de portadores del primer estado excitado (1Es). Como se puede apreciar en la figura 3.3, la posición de los picos del estado base y del primer estado excitado también sufren de un corrimiento hacia el rojo conforme la temperatura aumenta así como de una clara disminución en la intensidad de fotoluminiscencia.

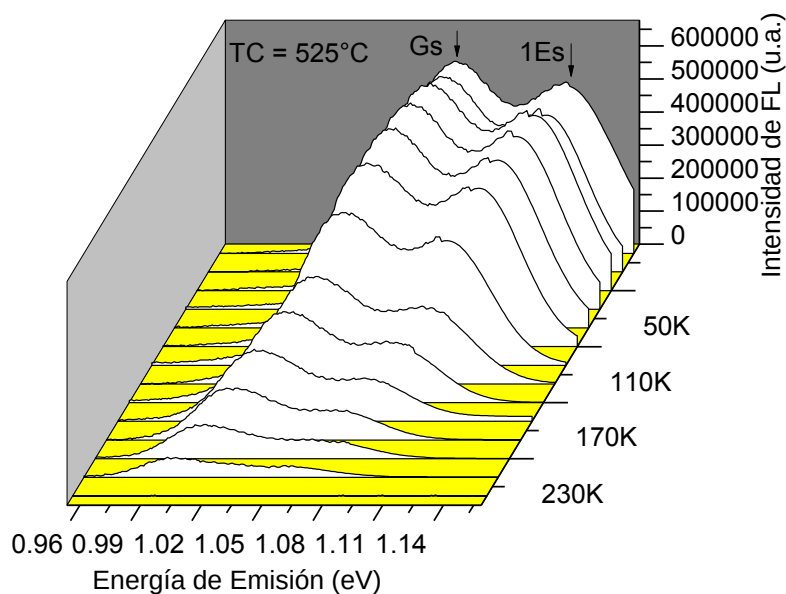


Figura 3.4 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #4 con distintas temperaturas.

En la figura 3.4 se muestra el espectro de fotoluminiscencia de la muestra #4 con QDs crecidos a 525°C, los números indican las bandas correspondientes a los estados Gs 1Es.

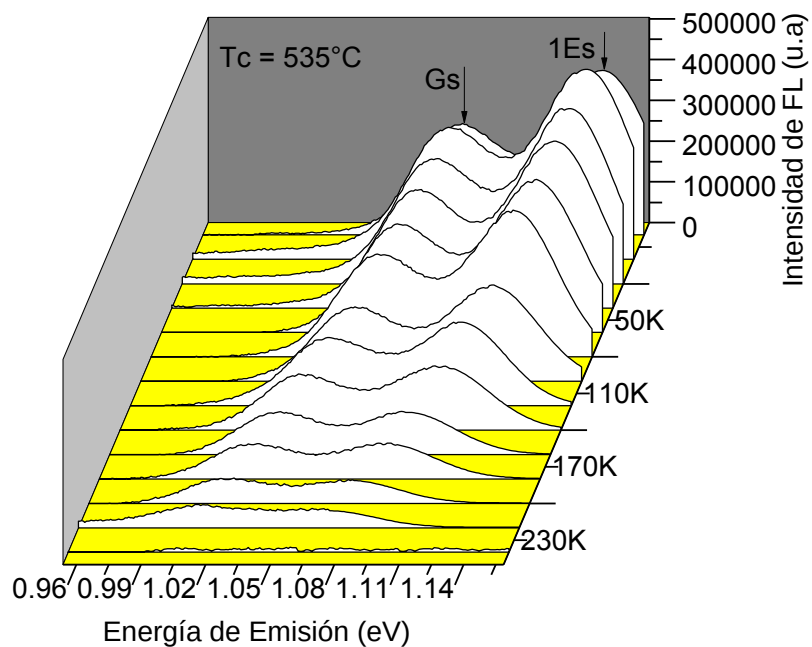


Figura 3.5 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra #5 con distintas temperaturas.

La figura 3.5 muestra un espectro de fotoluminiscencia para la muestra #5 con QDs crecidos a 535°C, en este caso se aprecian dos bandas gaussianas, la banda de menor energía es atribuida a la recombinación de portadores entre el Gs. La banda de mayor energía es atribuida a la recombinación de portadores del primer estado excitado (1Es).

Los espectros típicos de FL se muestran en las figuras 3.1 a 1.5; en las figuras 3.1 y 3.2 se muestra una sola banda debida a la recombinación de excitones localizados en el estado base mientras que las figuras 3.3, 3.4 y 3.5 presentan dos bandas debidas a la recombinación de excitones en el estado base y el primer estado excitado.

Como se mencionó anteriormente, los diámetros de los puntos cuánticos (QDs) incrementan monótonamente de 12 a 28nm junto con el aumento en la temperatura de crecimiento desde 470°C a 535°C. Así que sería posible esperar que la posición del pico de FL correspondiente a las bandas de Gs de FL cambie de manera monótona en las estructuras estudiadas.

3.2 Intensidad de FL y posición de picos de FL en diferentes estructuras con QDs.

A continuación se muestra la comparación de las intensidades integradas de FL y las posiciones de pico de FL para todas las estructuras con QDs de la #1 a la #5 y son presentadas en las figuras 3.6 y 3.7 respectivamente.

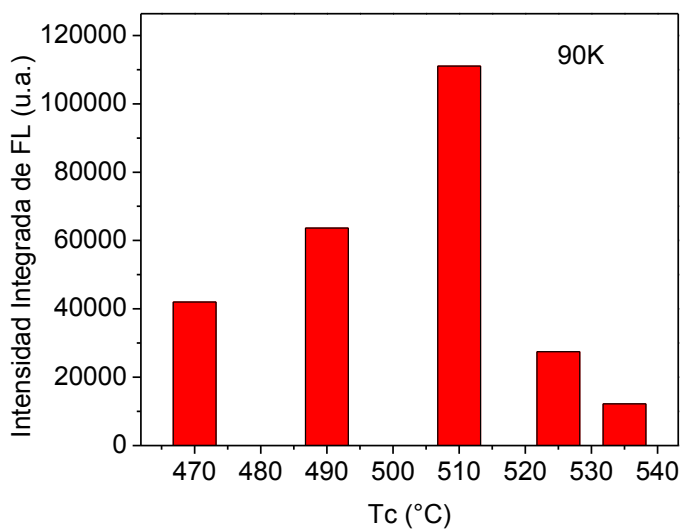


Figura 3.6 Variación de la intensidad de fotoluminiscencia con respecto de la temperatura de crecimiento.

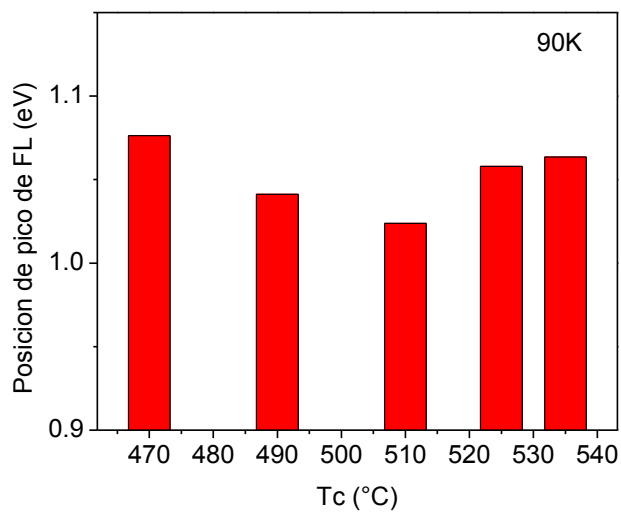


Figura 3.7 Posición del pico de fotoluminiscencia con respecto a la temperatura de crecimiento.

En las figuras 3.6 y 3.7 es claro que en ambos casos, la variación en la intensidad integrada de FL y la posición del pico con respecto de la temperatura de crecimiento no es monótona contrario a lo que se esperaría.

También se observa que el máximo de la intensidad integrada de FL corresponde a la mínima posición del pico de FL.

3.3 Intensidad Integrada de FL y FWHM contra temperatura.

La figura 3.8 muestra el cambio en la intensidad integrada de fotoluminiscencia con respecto de la temperatura de medición.

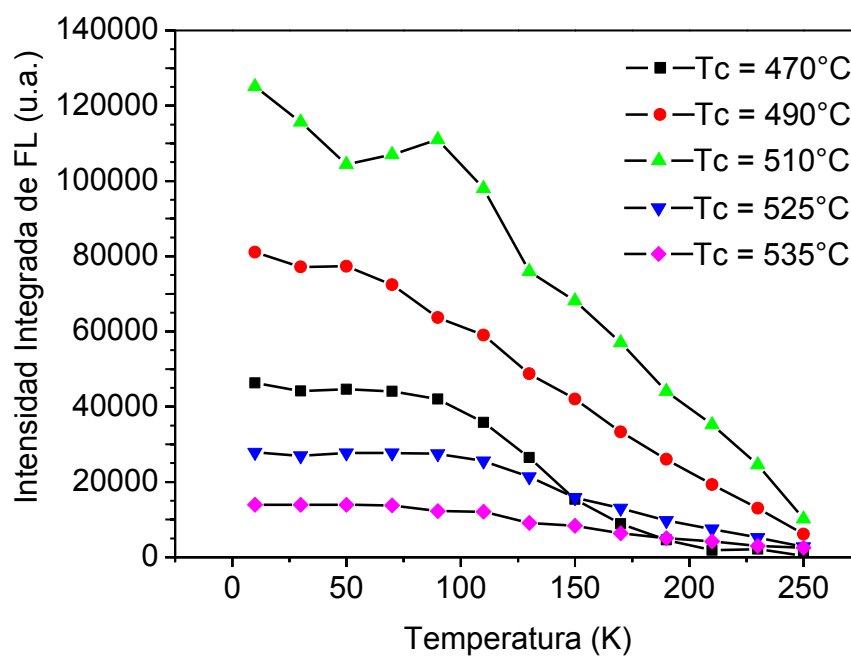


Figura 3.8 Variación de la intensidad de fotoluminiscencia para el Gs de las diferentes muestras con respecto de la temperatura.

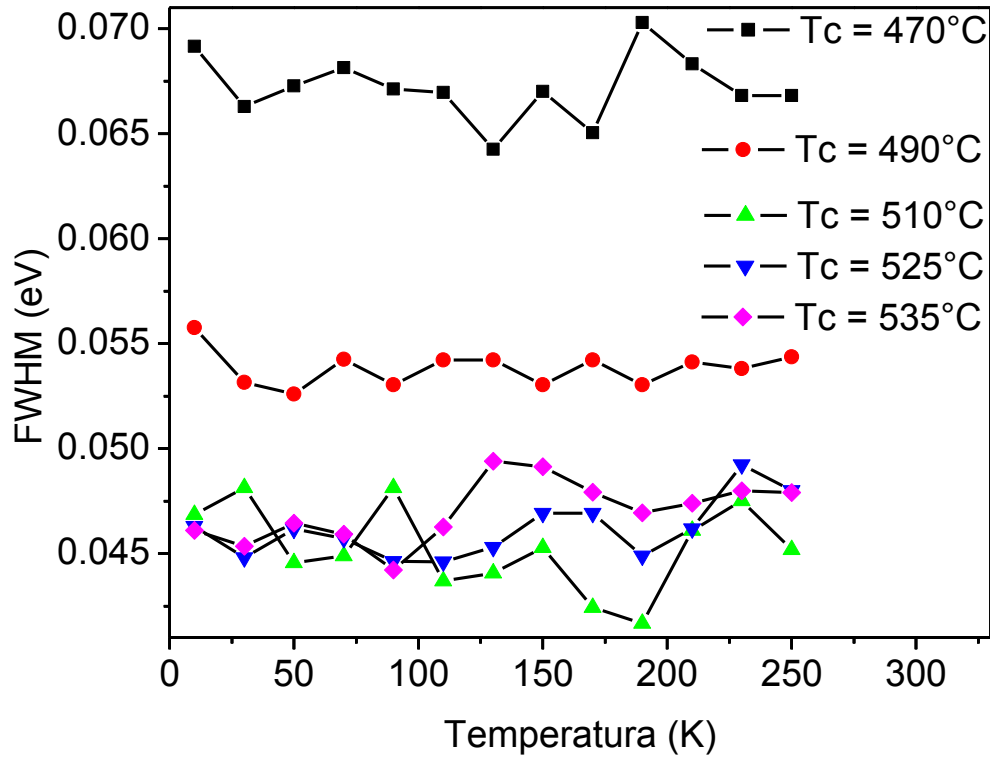


Figura 3.9 Variación de FWHM para el Gs de las diferentes muestras con respecto de la temperatura.

La figura 3.9 muestra el cambio en el FWHM con respecto de la temperatura para el Gs de las cinco muestras.

3.4 Pico de fotoluminiscencia contra temperatura.

La figura 3.10 muestra la variación del pico de emisión con respecto de la temperatura de medición, se observa como a valores mayores de la temperatura, el pico de emisión se corre hacia valores menores de la energía

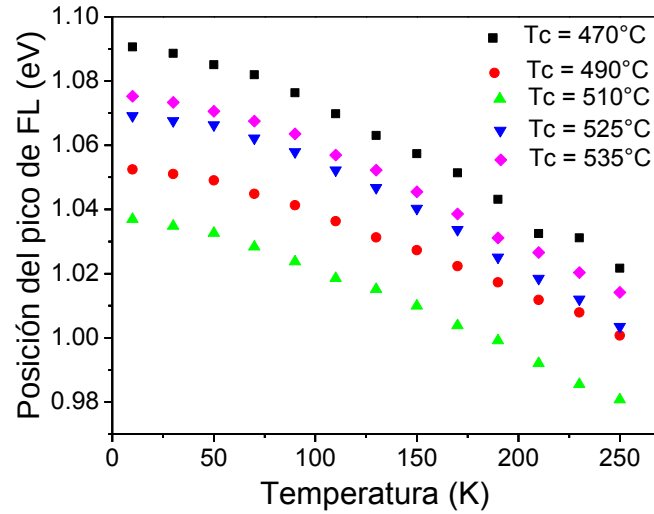


Figura 3.10 Variación del pico de FL para el Gs de las diferentes muestras con respecto de la temperatura.

De la figura 3.10 es claro que la variación de la posición del pico de FL con el aumento de temperatura y el aumento en el diámetro de los QDs no es monótono, además de la figura 3.6 se observa que la menor posición del pico de FL corresponde a la mayor intensidad de FL.

3.5 Cambio de la posición de los picos de fotoluminiscencia.

El análisis de la dependencia en la temperatura de la posición del pico de FL se hizo con base en la relación empírica de Varshni.

Y.P. Varshni [15]. propuso la siguiente ecuación empírica para la variación del ancho de banda de energía prohibida en función de la temperatura para materiales semiconductores:

$$E_g = E_0 - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (2)$$

Donde α y β son constantes del material, E_g es la energía de la banda prohibida la cual puede ser directa o indirecta y E_0 es el valor de la banda prohibida a 0K. Varshni obtuvo que esta ecuación representaba satisfactoriamente los resultados experimentales para el diamante, Si, Ge, 6H-SiC, GaAs, InP e InAs.

Se piensa que la mayoría de las variaciones en el valor de la energía de la banda prohibida con respecto a la temperatura provienen de los siguientes mecanismos:

- 1) Un cambio en la posición relativa de la banda de conducción y la banda de valencia debido a la dependencia en la temperatura de la dilatación de la red. De cálculos térmicos para altas temperaturas se obtiene que el efecto es lineal. Sin embargo en esta región sólo se explica una fracción (alrededor de 0.25) de la variación total de la energía de la banda prohibida con la temperatura. Para bajas temperaturas el coeficiente de expansión térmica es no lineal con respecto a T; inclusive para algunos sólidos con estructura de diamante el coeficiente resulta ser negativo en un cierto intervalo de temperaturas. Correspondientemente el efecto de dilatación sobre la energía de la banda prohibida es también no lineal.
- 2) La mayor contribución proviene de un cambio en la posición relativa de la banda de valencia y la banda de conducción debido a la dependencia en la temperatura de la interacción electrón-red. Algunos tratamientos teóricos muestran que esto lleva a una dependencia de la temperatura de la siguiente forma:

$$\text{si } T \ll \theta \quad \text{entonces } \Delta E_g \propto T^2$$

$$\text{si } T \gg \theta \quad \text{entonces } \Delta E_g \propto T$$

Donde θ es la temperatura de Debye.

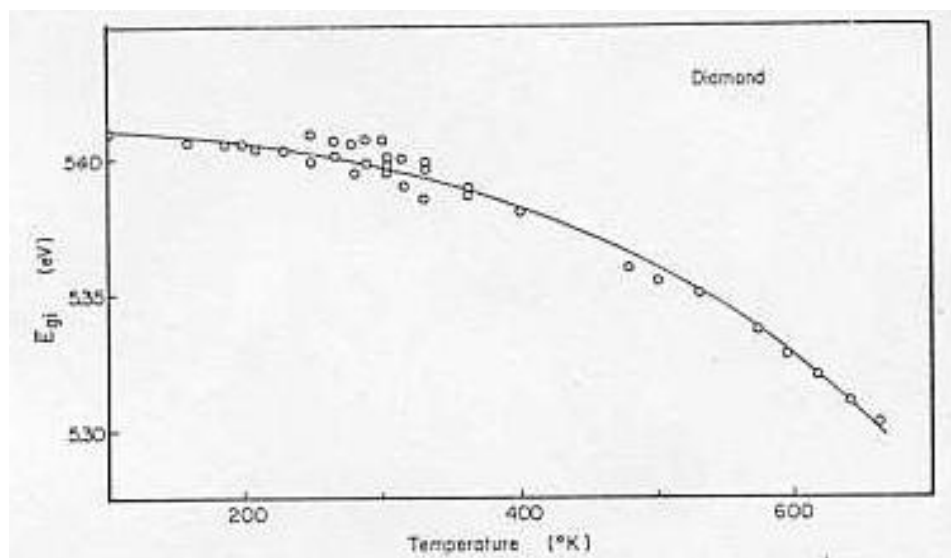


Figura 3.11 Variación de la energía de la banda prohibida con la temperatura para el diamante. La curva representa la ecuación de Varshni. [15]

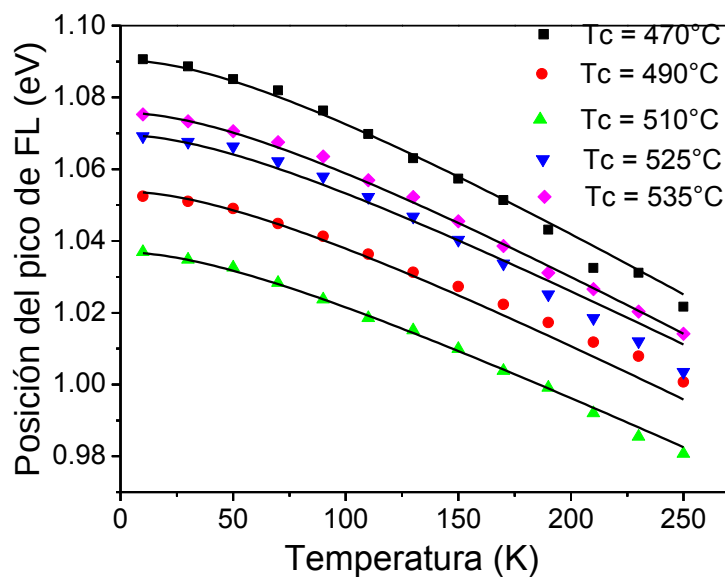


Figura 3.12 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni (líneas continuas) para el Gs con respecto de la temperatura para las diferentes muestras.

La figura 3.12 muestra mediante líneas continuas el ajuste de Varshni de la posición del pico de FL obtenido para las cinco muestras.

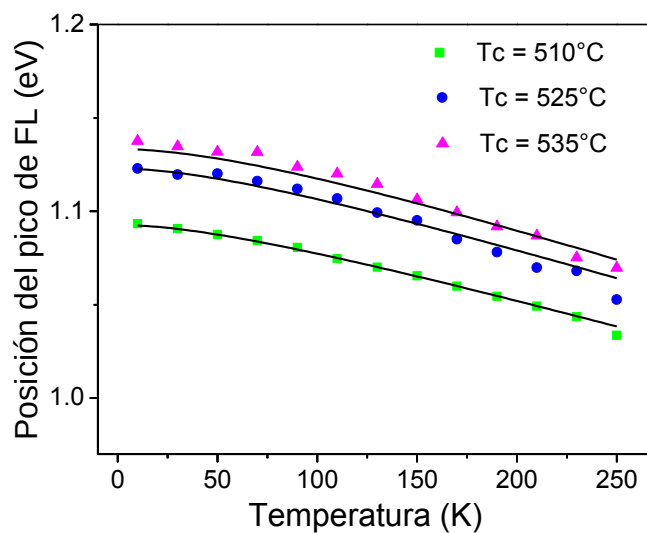


Figura 3.13 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni (líneas continuas) para el 1Es con respecto de la temperatura para las diferentes muestras.

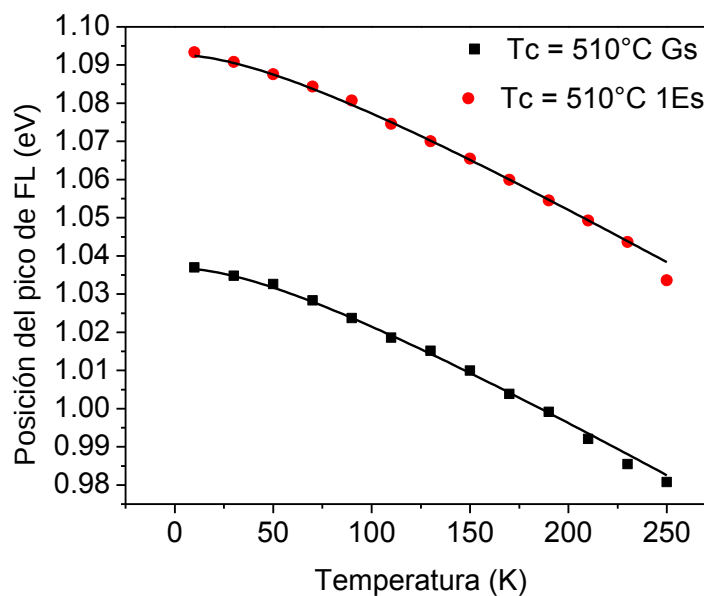


Figura 3.14 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni (líneas continuas) para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra crecida a 510°C.

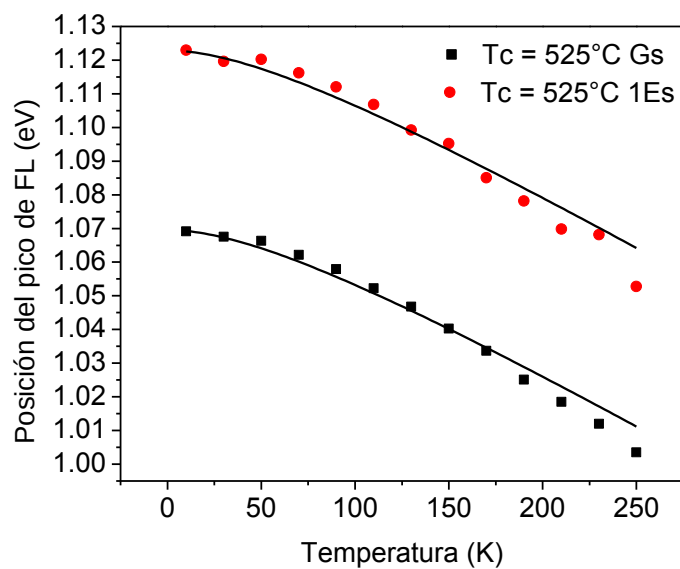


Figura 3.15 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni (líneas continuas) para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra crecida a 525°C.

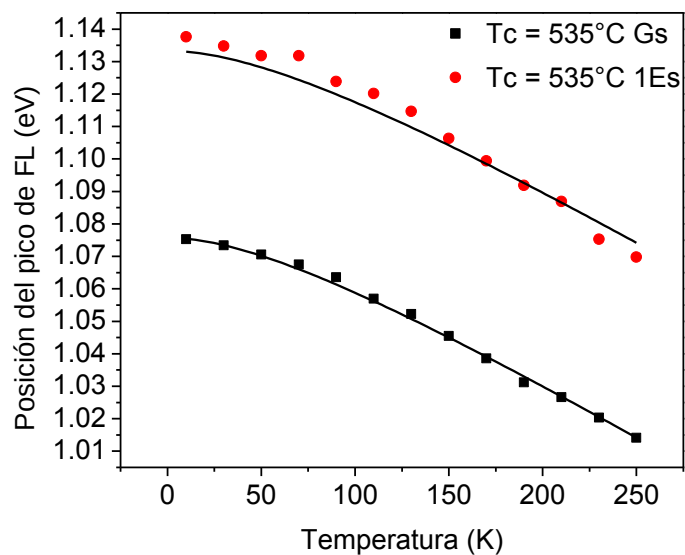


Figura 3.16 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Varshni (líneas continuas) para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra crecida a 535°C.

Del análisis de Varshni se obtuvieron los correspondientes parámetros E_0 , α y β , para los estados Gs y 1Es, los resultados se recogen en las tablas 3.1, 3.2, 3.3 y 3.4.

Tabla 3.1 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni del estado base.

	E_0	α	β
Número de Muestra	eV	meV/K	K
#1	1.090	0.376	110
#2	1.053	0.332	107
#3	1.036	0.300	95
#4	1.069	0.327	100
#5	1.075	0.353	108
InAs [16]	0.415	0.276	93
GaAs [17]	1.519	0.540	204

Tabla 3.2 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni para la muestra #3 $T_c = 510^\circ\text{C}$.

	E_0	α	β
Muestra #3	eV	meV/K	K
Gs	1.036	0.300	95
1Es	1.092	0.300	95

Tabla 3.3 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni para la muestra #4 $T_c = 525^\circ\text{C}$.

	E_0	α	β
Muestra #4	eV	meV/K	K
Gs	1.069	0.327	100
1Es	1.122	0.329	100

Tabla 3.4 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Varshni para la muestra #5 $T_c = 535^\circ\text{C}$.

	E_0	α	β
Muestra #5	eV	meV/K	K
Gs	1.075	0.353	108
1Es	1.133	0.353	123

La comparación de los parámetros del ajuste con la variación del gap de energía contra la temperatura en el cristal en bulto de InAs (Tabla 3.1) revela que en las estructuras estudiadas, los parámetros del ajuste α y β en el rango de temperaturas 10 – 250K son muy cercanos a los valores del cristal de InAs en bulto para la estructura #3. Sin embargo en las otras estructuras los parámetros α y β son un poco diferentes de los valores del cristal de InAs en bulto (Tabla 3.1).

Lo anterior testifica que el proceso de interdifusión Ga/In tuvo lugar en dichas estructuras con QDs, sin embargo, notemos que el proceso de interdifusión de Ga/In en las estructuras estudiadas no sucedió de manera monótona en función de la temperatura de crecimiento de los QDs, lo cual significa que existen otros factores los cuales son esenciales además de la temperatura de crecimiento.

3.6 Ajuste de Einstein.

Para comparar los resultados del ajuste de Varshni se realizó el análisis con base en la ecuación de Einstein para la reducción del ancho de banda prohibida.

La energía de la Banda prohibida también fue determinada con la siguiente expresión empírica [18]:

$$E_g = E_0 - k / (e^{(\theta_E / T)} - 1) \quad (3)$$

En donde k es una constante, y θ_E es la temperatura de Einstein, T es la temperatura y E_0 es la energía del ancho de banda prohibida proyectada a 0K.

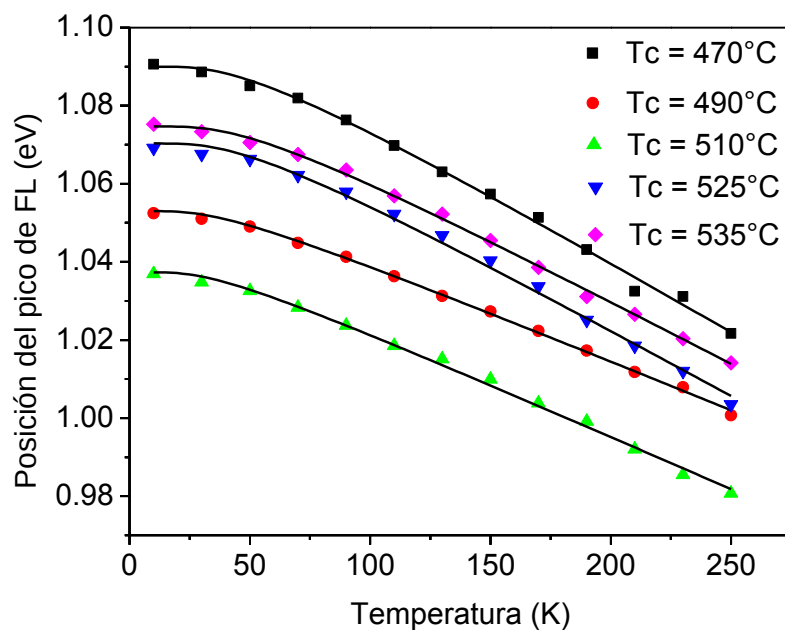


Figura 3.17 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein (líneas continuas) para el Gs con respecto de la temperatura para las diferentes muestras.

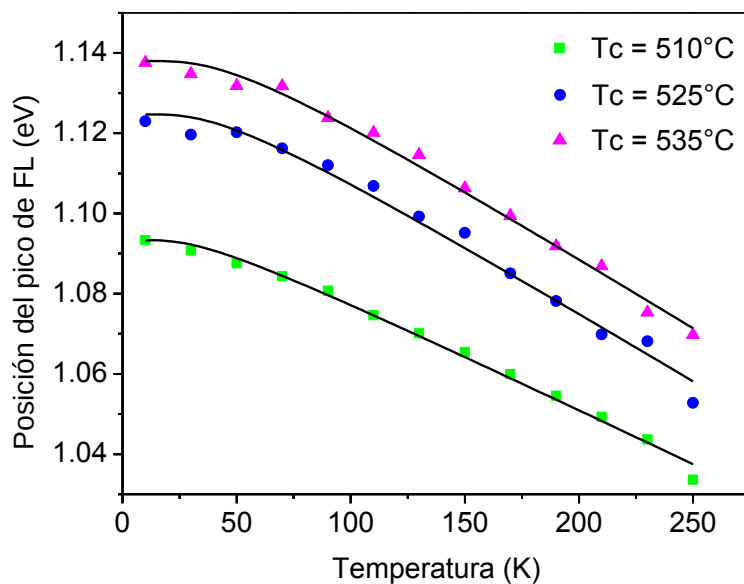


Figura 3.18 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein (líneas continuas) para el 1Es con respecto de la temperatura para las muestras #3, #4 and #5.

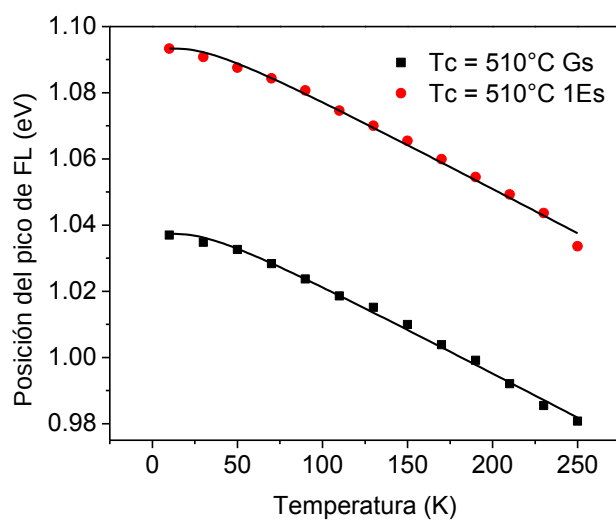


Figura 3.19 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein (líneas continuas) para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra #3.

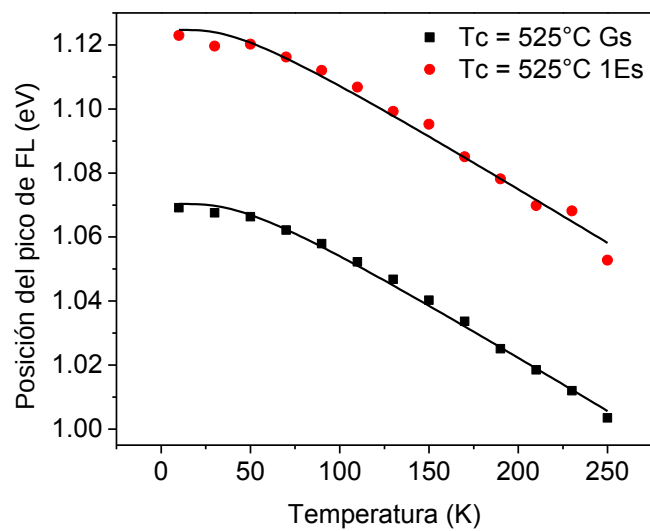


Figura 3.20 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste con la ecuación de Einstein (líneas continuas) para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra #4.

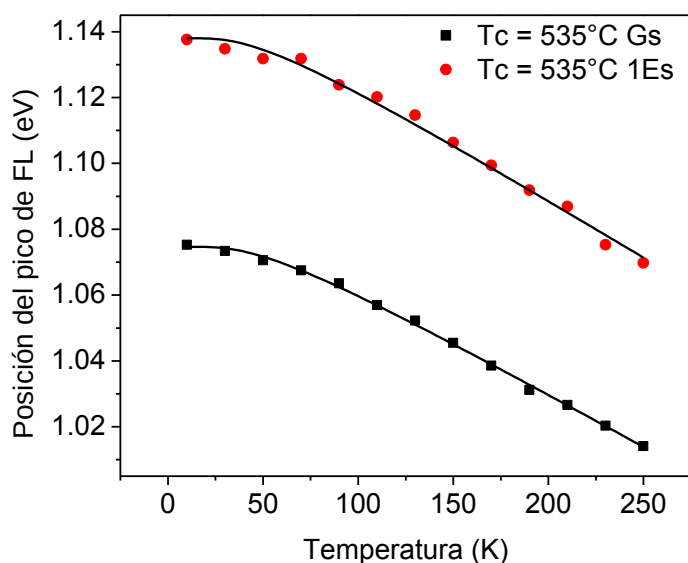


Figura 3.21 Variación del pico de fotoluminiscencia y ajuste de Einstein (líneas continuas) para el Gs y el 1Es con respecto de la temperatura para la muestra crecida a #5.

Tabla 3.5 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein para el estado base.

	E_0	k	θ_E
Número de Muestra	eV	10^{-2} eV	K
#1	1.090	4.88	135
#2	1.053	2.64	104
#3	1.037	2.60	96
#4	1.070	4.55	133
#5	1.074	4.51	138
InAs	0.415	2.24	93

Tabla 3.6 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein para la muestra #3 $T_c = 510^\circ\text{C}$.

	E_0	k	θ_E
Muestra #3	eV	10^{-2} eV	K
Gs	1.037	2.60	96
1Es	1.093	2.61	96

Tabla 3.7 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein para la muestra #4 $T_c = 525^\circ\text{C}$.

	E_0	k	θ_E
Muestra #4	eV	10^{-2} eV	K
Gs	1.070	4.55	133
1Es	1.124	4.19	122

Tabla 3.8 Datos obtenidos del ajuste para la ecuación de Einstein para la muestra #5 $T_c = 535^\circ\text{C}$.

	E_0	k	θ_E
Muestra #5	eV	10^{-2}eV	K
Gs	1.074	4.51	138
1Es	1.138	1.04	133

Al comparar los parámetros del ajuste con la variación del gap de energía contra la temperatura en el cristal en bulto de InAs mediante la ecuación de Einstein (Tabla 3.5) confirma las conclusiones hechas con la ecuación de Varshni es decir en las estructuras estudiadas, los parámetros del ajuste k y θ_E de la ecuación de Einstein en el rango de temperaturas 10 – 250K son muy cercanos a los valores del cristal de InAs en bulto para la estructura #3. Sin embargo en las otras estructuras los parámetros k y θ_E son un poco diferentes de los valores del cristal de In As en bulto (Tabla 3.5).

Tanto el ajuste por la ecuación de Varshni como por la ecuación de Einstein muestran que tuvo lugar el proceso de interdifusión Ga/In en las estructuras con QDs, además se confirma que el proceso de interdifusión de Ga/In en las estructuras estudiadas no sucedió de manera monótona como función de la temperatura de crecimiento de los QDs.

3.7 Energía de activación del proceso de Extinción Térmica de la FL.

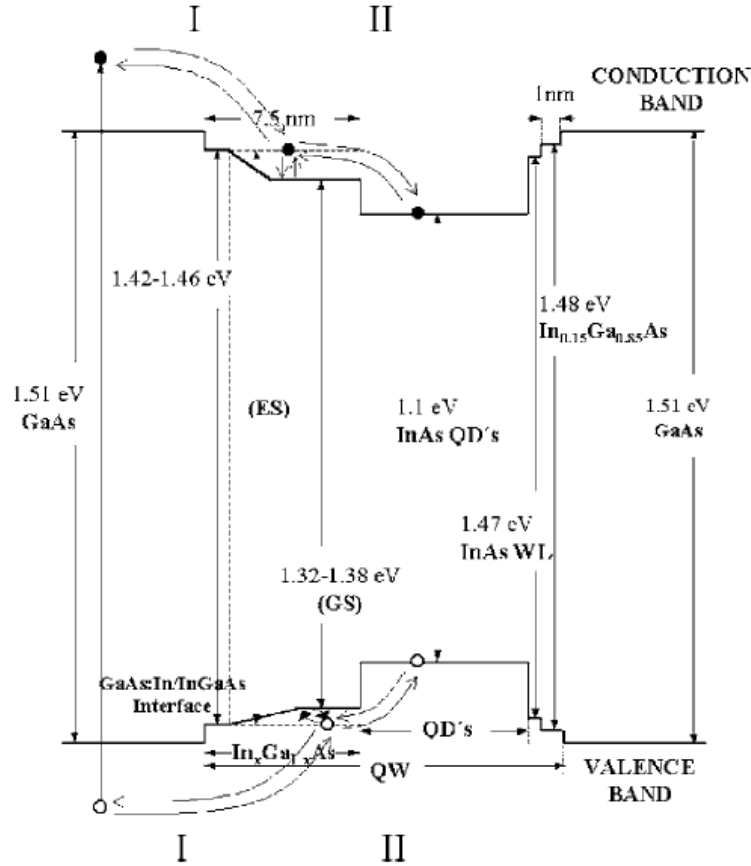


Figura 3.22 Diagrama de energía de la estructura Investigada a $T = 77\text{K}$. [19]

En [19, 20] se propuso el proceso de captura (escape térmico) en dos etapas para explicar la dependencia de la intensidad de FL con la temperatura en estructuras de puntos cuánticos de InAs embebidos en pozos cuánticos de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. Para explicar nuestros resultados experimentales consideramos también el proceso de captura de excitones (escape térmico) en dos etapas.

La extinción térmica de la intensidad de FL de los puntos cuánticos se puede explicar por i) ionización térmica de excitones desde los puntos cuánticos hasta la barrera de GaAs, pozo cuántico o hasta la capa de mojado, seguida de recombinación no radiativa, ii) captura de excitones (térmicamente activada) por centros de recombinación NR en las barreras, capa de mojado o en las proximidades de los puntos cuánticos, iii) pérdida de portadores, foto-generados, en el pozo cuántico o en la capa de mojado, antes de que sean capturados por puntos cuánticos debido a su escape térmico hacia la barrera de GaAs. En la figura 3.22 se muestra el correspondiente diagrama de energías de las estructuras bajo estudio incluyendo la capa espaciadora de GaAs mezclada con átomos de In. Del análisis del diagrama de energía se observa que es posible esperar energías de activación de extinción térmica desde la barrera de GaAs a la capa de mojado (40-50 eV), de la barrera de GaAs al pozo cuántico (120-160 meV), de la barrera a los puntos cuánticos (400-450 meV) o de la capa de mojado a los puntos cuánticos (200-250 meV).

Las figuras 3.23 – 3.27 muestran la dependencia de la intensidad integrada con respecto a la temperatura para las muestras #1, #2, #3, #4 y #5 en las graficas, las líneas continuas representan un ajuste en base a la ecuación de Arrhenius y la correspondiente energía de activación.

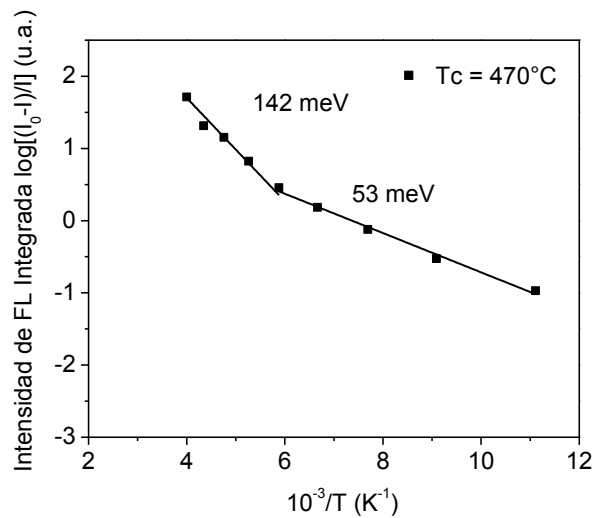


Figura 3.23 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #1.

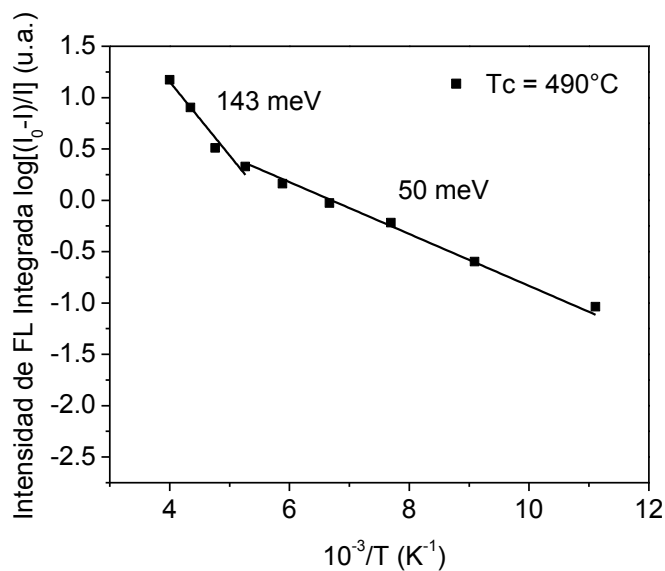


Figura 3.24 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #2.

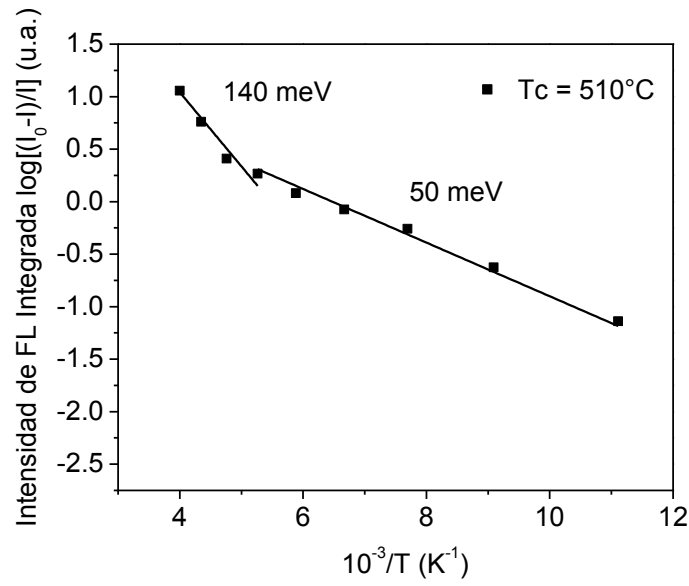


Figura 3.25 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #3.

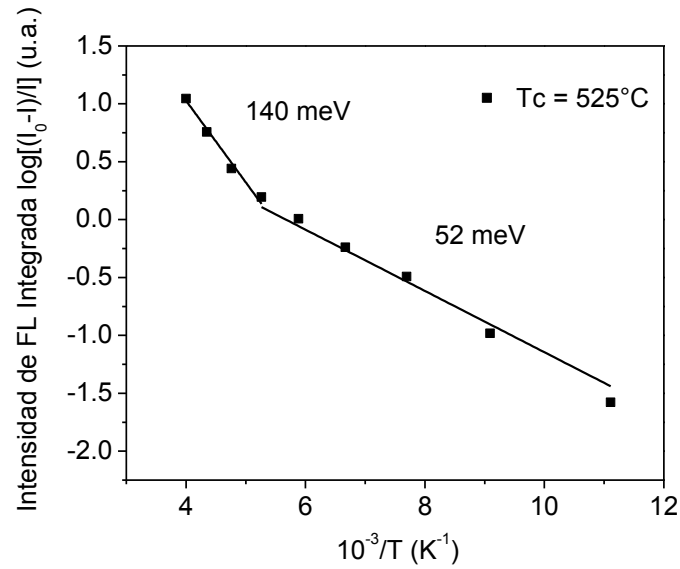


Figura 3.26 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra la temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #4.

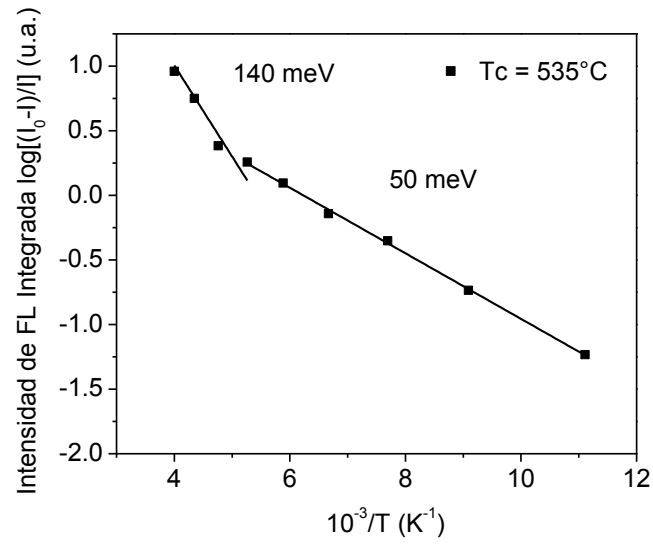


Figura 3.27 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de la muestra #5.

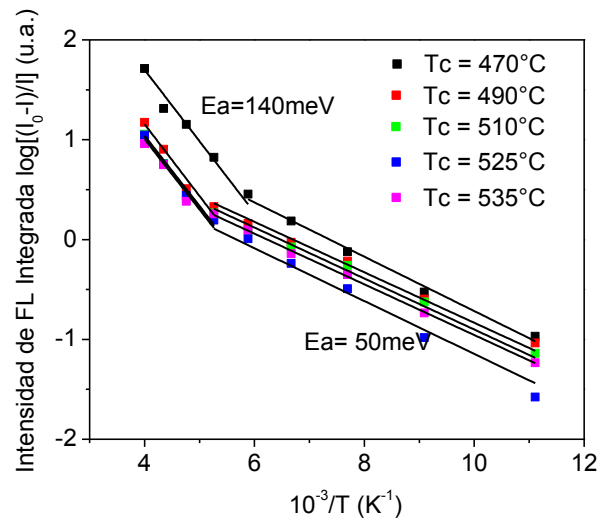


Figura 3.28 Dependencia de la Intensidad de FL integrada contra temperatura en una grafica de $\log[I_0-I/I]$ vs $10^3/T$ para la emisión de Gs en los QDs de todas las muestras.

La figura 3.28 muestra en una sola grafica semilogaritmica la variación de la intensidad integrada con respecto de la temperatura, los resultados del ajuste con la ecuación de Arrhenius se encuentran en la tabla 3.9.

Tabla 3.9 Energías de Activación del aniquilamiento térmico de las diferentes muestras.

Muestra	Energía de Activación (meV)	
	Región I	Región II
#1	53	142
#2	50	143
#3	50	140
#4	52	140
#5	50	140

La extinción térmica de la intensidad en la emisión de puntos cuánticos se puede explicar por el escape térmico de excitones desde los puntos cuánticos hasta la barrera de GaAs y hasta la capa de mojado [19, 20] o hasta la capa recubrimiento y colchón de InGaAs con subsiguiente recombinación no radiativa (NR), al igual que por captura de excitones por centros de recombinación NR (esta captura es activada térmicamente) o por pérdida de portadores fotogenerados en la capa de mojado o en los pozos cuánticos (antes de que sean capturados por los puntos cuánticos) debido al escape térmico hacia la barrera de GaAs.

Para explicar nuestros resultados, hemos considerado el proceso de captura y escape de excitones en dos etapas. En nuestro caso la captura de excitones y la emisión térmica que proviene desde los puntos cuánticos puede ocurrir no sólo a través de los estados de la capa de mojado (WL), sino a través de los estados del pozo cuántico formado por la capa colchón (buffer layer) de InGaAs y por el recubrimiento también de InGaAs (QW). Siguiendo este modelo, las energías de activación de la extinción de la intensidad de FL deben corresponder a $E^{GaAs-QW}$ (o $E^{GaAs-WL}$), E^{QW-QD} , $E^{GaAs-QD}$ en diferentes intervalos de temperatura.

La ecuación con la cual se modela la extinción térmica es [12,19]:

$$W(T) = \frac{G_{InGaAs} + G_{GaAs} \left(1 - \frac{\tau_{NR1}^{-1}}{\tau_{QW}^{-1} + \tau_{NR1}^{-1}} \right)}{1 + \frac{\tau_{RQW}^{-1} + \tau_{NR2}^{-1}}{\tau_{QD}^{-1}} + \frac{\tau_{NR1}^{-1} \tau_{QW}^{-1} N_{GaAs}}{\tau_{QD}^{-1} (\tau_{QW}^{-1} + \tau_{NR1}^{-1}) N_{QW}} \exp\left(-\frac{\Delta E^{GaAs-QW}}{kT}\right) + \frac{(\tau_{RQW}^{-1} + \tau_{NR2}^{-1}) N_{QW}}{\tau_{RQD}^{-1} N_{QD}} \exp\left(-\frac{\Delta E^{GaAs-QW}}{kT}\right) + \frac{\tau_{NR1}^{-1} \tau_{QW}^{-1} N_{GaAs}}{\tau_{RQD}^{-1} (\tau_{QW}^{-1} + \tau_{NR1}^{-1}) N_{QD}} \exp\left(-\frac{\Delta E^{GaAs-QD}}{kT}\right)} \quad (4)$$

Donde τ_{QW}^{-1} y τ_{QD}^{-1} son las razones de termalización excitónica desde la barrera de GaAs hacia el QW y desde el QW hacia los QDs, respectivamente; N_{QD} , N_{QW} y N_{GaAs} son las densidades de estados en los QDs, QW y en la barrera de GaAs, y τ_{RQW}^{-1} , τ_{RQD}^{-1} , τ_{NR1}^{-1} y τ_{NR2}^{-1} son las razones de recombinación radiativas en los QWs y los QDs así como las razones de recombinación NR en la barrera de GaAs y QW, respectivamente.

Los valores $\Delta E^{GaAs-QW}$, ΔE^{QW-QD} y $\Delta E^{GaAs-QD}$ son las diferencias energéticas entre el ancho de banda prohibida del GaAs y el Gs en los QWs, el Gs en los QWs y QDs y el ancho de banda prohibida del GaAs y el Gs en los QDs y G_{GaAs} y G_{InGaAs} son las proporciones de los excitones fotogenerados en las barreras de GaAs y en la barrera de los QWs de InGaAs respectivamente.

Es claro que en diferentes rangos de temperatura, diferentes términos del denominador pueden dominar. Esto depende de los valores de la energía de activación y de los coeficientes preexponenciales.

De la figura 3.27 observamos que se tienen dos regiones en las cuales las curvas presentan dos pendientes distintas, estas pendientes están conectadas con la energía de activación de la extinción térmica de la fotoluminiscencia de las muestras, en la región I todas las

muestras tienen una energía de activación de alrededor de 50meV, mientras que en la región II se tiene una energía de activación de alrededor de 140meV, estas energías de activación corresponden a la recombinación de excitones de la WL (50meV) y de los QW (140meV) hacia la barrera de GaAs.

3.8 Conclusiones de capítulo.

1. Al comparar los resultados de los espectros de fotoluminiscencia de las muestras con QDs obtenidos con diferentes temperaturas se muestra que las estructuras con mayor calidad de QDs fueron obtenidas con las temperaturas de crecimiento de QDs de 490-525°C. Las estructuras con QDs obtenidas a 470 y 535°C tienen una baja intensidad de fotoluminiscencia.
2. La investigación de la dependencia en la temperatura de la fotoluminiscencia y la aplicación del método de Varshni para el análisis de la composición de los QDs muestran que las estructuras arriba mencionadas con QDs obtenidos a 490-525°C tienen parámetros muy cercanos al aquellos del bulto de InAs. Al mismo tiempo la composición del material de los QDs para las muestras con QDs crecidos a 470 y 535°C muestran que en estas estructuras tuvo lugar la interdifusión In-Ga a la temperatura de crecimiento de QDs.
3. Del análisis de la extinción de intensidad de FL presentada en las gráficas semi-logarítmicas se tiene que en las regiones I y II tiene lugar la excitación térmica de excitones de la WL ($E_a=50$ meV) y QW ($E_a=140$ meV) a la barrera GaAs donde se da lugar a la recombinación de excitones no radiativa.

Capitulo 4 Difracción de rayos X en dependencia de la densidad de QDs.

Se aplicó el método de difracción de rayos X con el objetivo de estudiar la variación de los esfuerzos elásticos en las estructuras tipo DWELL con QDs crecidos a diferentes temperaturas.

4.1 Parámetros a 300K de los materiales InAs, GaAs, $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

A continuación se presentan los parámetros de red para los materiales $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con diferentes concentraciones de In, GaAs e InAs.

GaAs

Estructura Cristalina	Blenda [21]
Constante de Red	5.6532 Å

InAs

Estructura Cristalina	Blenda [21]
Constante de Red	6.0583 Å

In_xGa_{1-x}As	
Estructura Cristalina	Blenda
Constante de Red In x= 10	5.6938 Å
Constante de Red In x= 15	5.7140 Å
Constante de Red In x= 20	5.7343 Å
Constante de Red in x= 25	5.7545 Å
Constante de Red in x= 30	5.7748 Å
Constante de Red in x= 35	5.7950 Å
Constante de Red in x= 40	5.8153 Å
Constante de Red in x= 45	5.8355 Å
Constante de Red in x= 50	5.8558 Å
Constante de Red in x= 55	5.8760 Å
Constante de Red in x= 60	5.8963 Å

4.2 Difractogramas de las estructuras tipo DWELL.

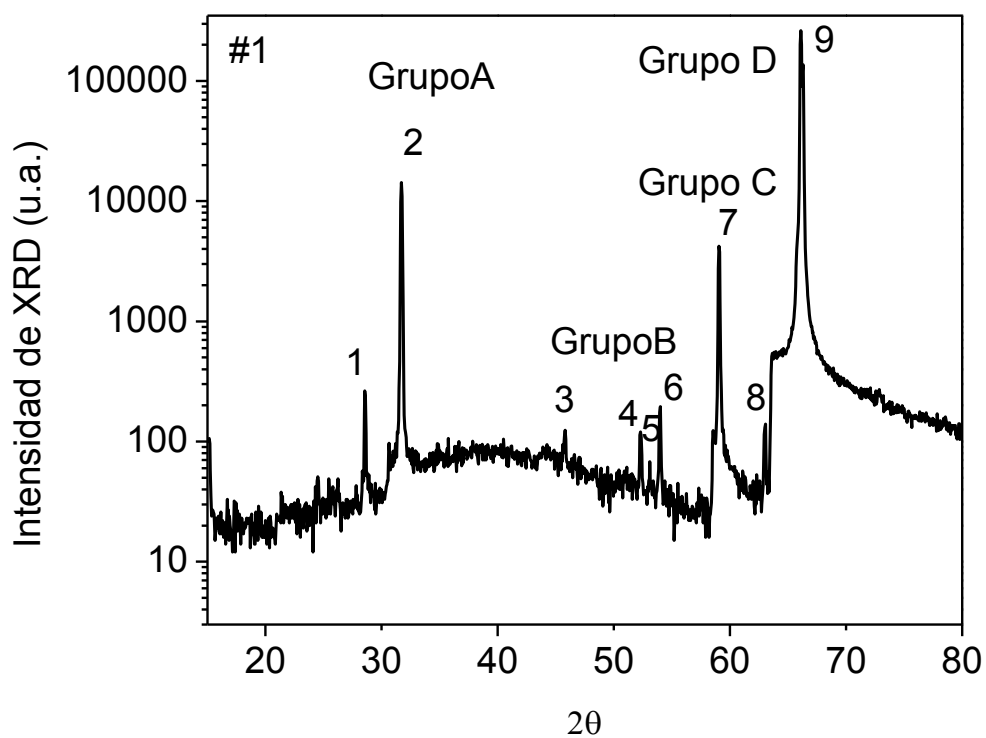


Figura 4.1 Difractograma de la muestra #1.

La figura 4.1 muestra el difractograma de la muestra crecida a 470°C, claramente se observan nueve picos de difracción.

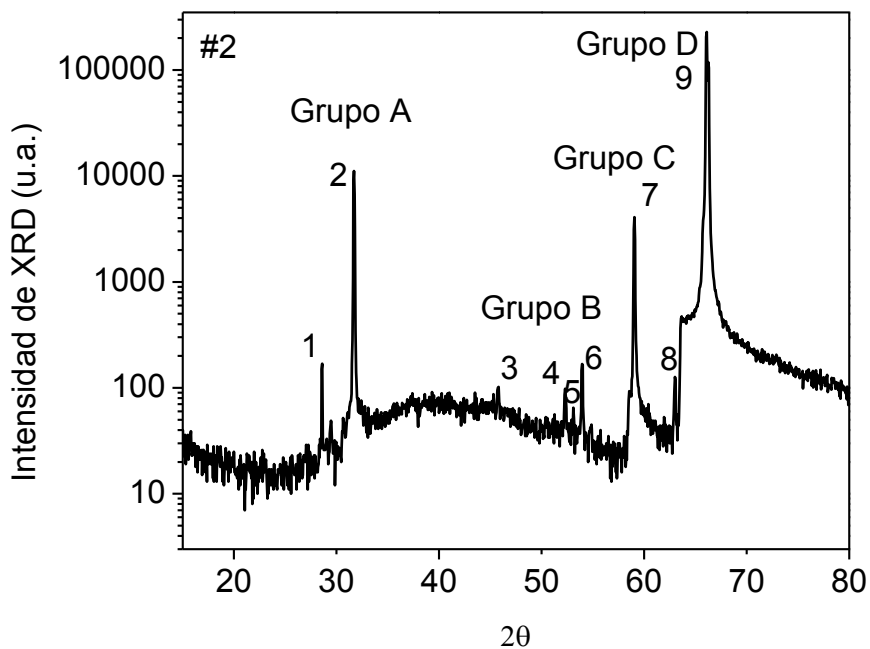


Figura 4.2 Difractograma de la muestra #2.

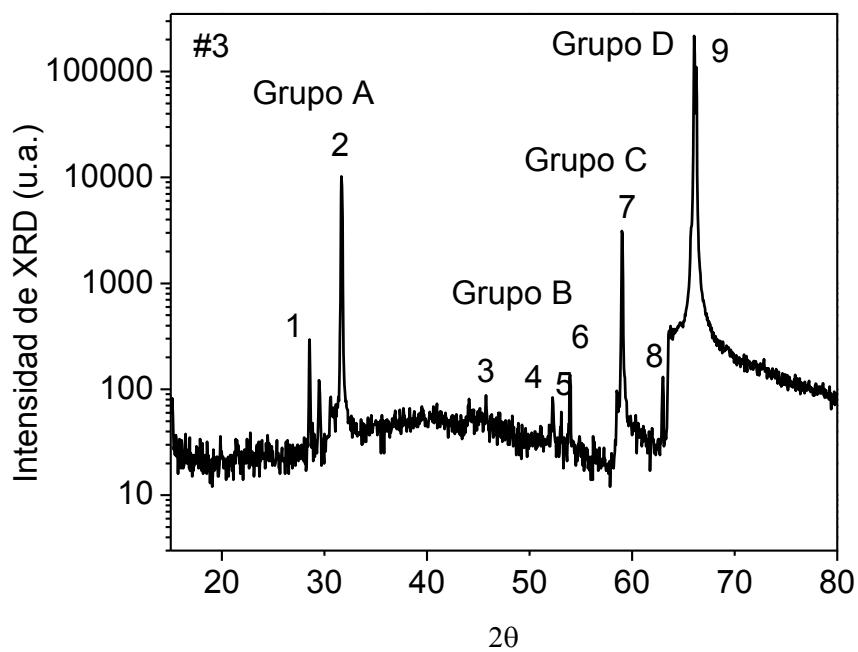


Figura 4.3 Difractograma de la muestra #3.

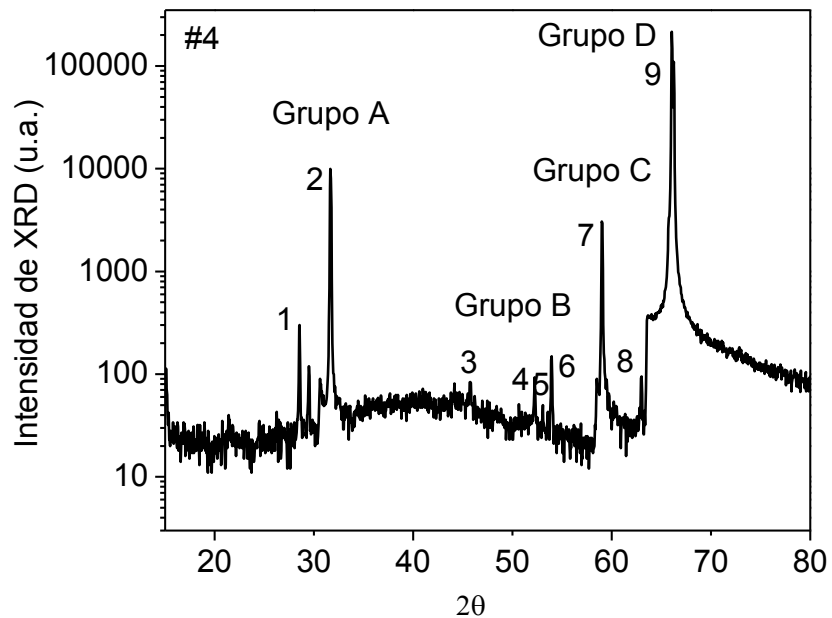


Figura 4.4 Difractograma de la muestra #4.

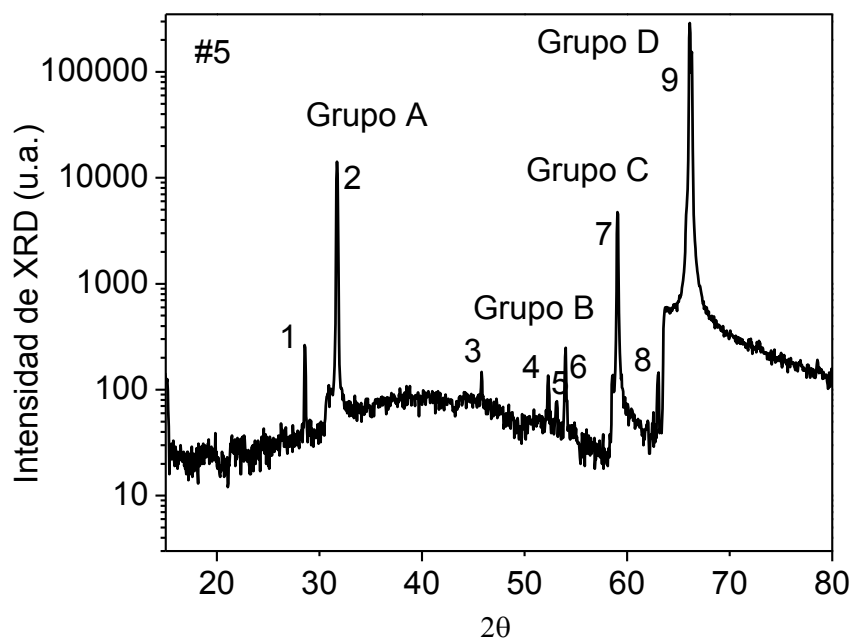


Figura 4.5 Difractograma de la muestra #5.

En las figuras 4.2 a 4.5 se observa a simple vista los mismos 9 picos que en la figura 4.1. Del análisis de los picos, tenemos que los más intensos corresponden a los planos (200) el pico 2 y (400) el pico 9 para la radiación $K\alpha$ del cobre, mientras que el pico 7 pertenece al plano 400 para la radiación $K\beta$ del cobre, para el GaAs en bulto.

Se observa que el pico correspondiente al plano 400 es el más intenso y corresponde en su mayoría al sustrato de las muestras.

Tabla 4.1 Posiciones 2θ de los picos.

#	1	2	3	4	5	6	7	8	9
#1	28.55	31.70	45.80	52.30	53.10	54.00	59.05	63.05	66.10
#2	28.60	31.70	45.80	52.30	53.10	53.95	59.05	63.00	66.10
#3	28.55	31.65	45.75	52.25	53.10	53.95	59.00	63.00	66.05
#4	28.55	31.65	45.75	52.25	53.05	53.95	59.00	63.00	66.05
#5	28.55	31.70	45.80	52.30	53.15	54.00	59.05	63.05	66.10

Tabla 4.2 Posiciones de pico de XRD para de los distintos planos de los materiales de las estructuras DWELL.

Planos		(400)			
Material	Constante de red	Distancia interplanar	$2\theta K_{\alpha 1}$	$2\theta K_{\alpha 2}$	$2\theta K_{\beta}$
GaAs	5.6532	1.4133	66.0536	66.2387	59.0165
In _{0.1} Ga _{0.9} As	5.6938	1.4235	65.5232	65.7064	58.5546
In _{0.15} Ga _{0.85} As	5.7140	1.4285	65.2627	65.4450	58.3276
In _{0.20} Ga _{0.80} As	5.7343	1.4336	65.0032	65.1846	58.1013
In _{0.25} Ga _{0.75} As	5.7545	1.4386	64.7471	64.9276	57.8780
In _{0.30} Ga _{0.70} As	5.7748	1.4437	64.4919	64.6715	57.6554
In _{0.35} Ga _{0.65} As	5.7950	1.4488	64.2401	64.4188	57.4357
In _{0.40} Ga _{0.60} As	5.8153	1.4538	63.9891	64.1670	57.2166
In _{0.45} Ga _{0.55} As	5.8355	1.4589	63.7415	63.9185	57.0004
In _{0.50} Ga _{0.50} As	5.8558	1.4639	63.4946	63.6708	56.7848
In _{0.55} Ga _{0.45} As	5.8761	1.4690	63.2511	63.4264	56.5720
In _{0.60} Ga _{0.40} As	5.8963	1.4741	63.0083	63.1828	56.3598
InAs	6.0583	1.5146	61.1395	61.3076	54.7244

Planos		(200)			
Material	Constante de red	Distancia interplanar	20 K _{α1}	20 K _{α2}	20 K _β
GaAs	5.6532	2.8266	31.6280	31.7086	28.5143
In _{0.1} Ga _{0.9} As	5.6938	2.8469	31.3967	31.4767	28.3067
In _{0.15} Ga _{0.85} As	5.7141	2.8570	31.2828	31.3625	28.2046
In _{0.20} Ga _{0.80} As	5.7343	2.8672	31.1693	31.2486	28.1027
In _{0.25} Ga _{0.75} As	5.7546	2.8773	31.0571	31.1362	28.0020
In _{0.30} Ga _{0.70} As	5.7748	2.8874	30.9452	31.0240	27.9016
In _{0.35} Ga _{0.65} As	5.7951	2.8975	30.8346	30.9131	27.8024
In _{0.40} Ga _{0.60} As	5.8153	2.9077	30.7243	30.8025	27.7034
In _{0.45} Ga _{0.55} As	5.8356	2.9178	30.6154	30.6933	27.6056
In _{0.50} Ga _{0.50} As	5.8558	2.9279	30.5066	30.5842	27.5080
In _{0.55} Ga _{0.45} As	5.8761	2.9380	30.3992	30.4766	27.4116
In _{0.60} Ga _{0.40} As	5.8963	2.9482	30.2921	30.3691	27.3154
InAs	6.0583	3.0292	29.4634	29.5383	26.5714

Planos		(220)			
Material	Constante de red	Distancia interplanar	20 K _{α1}	20 K _{α2}	20 K _β
GaAs	5.6532	1.9987	45.3366	45.4555	40.7649
In _{0.1} Ga _{0.9} As	5.6938	2.0131	44.9955	45.1134	40.4614
In _{0.15} Ga _{0.85} As	5.7141	2.0202	44.8278	44.9452	40.3122
In _{0.20} Ga _{0.80} As	5.7343	2.0274	44.6605	44.7774	40.1633
In _{0.25} Ga _{0.75} As	5.7546	2.0345	44.4953	44.6118	40.0163
In _{0.30} Ga _{0.70} As	5.7748	2.0417	44.3306	44.4466	39.8696
In _{0.35} Ga _{0.65} As	5.7951	2.0489	44.1679	44.2834	39.7248
In _{0.40} Ga _{0.60} As	5.8153	2.0560	44.0057	44.1207	39.5803
In _{0.45} Ga _{0.55} As	5.8356	2.0632	43.8454	43.9600	39.4376
In _{0.50} Ga _{0.50} As	5.8558	2.0703	43.6856	43.7997	39.2953
In _{0.55} Ga _{0.45} As	5.8761	2.0775	43.5277	43.6414	39.1547
In _{0.60} Ga _{0.40} As	5.8963	2.0847	43.3703	43.4835	39.0144
InAs	6.0583	2.1419	42.1543	42.2641	37.9307

Planos		(311)			
Material	Constante de red	Distancia interplanar	2 θ K $_{\alpha 1}$	2 θ K $_{\alpha 2}$	2 θ K $_{\beta}$
GaAs	5.6532	1.7045	53.7334	53.8776	48.2087
In _{0.1} Ga _{0.9} As	5.6938	1.7167	53.3198	53.4627	47.8434
In _{0.15} Ga _{0.85} As	5.7141	1.7229	53.1165	53.2588	47.6638
In _{0.20} Ga _{0.80} As	5.7343	1.7290	52.9138	53.0555	47.4846
In _{0.25} Ga _{0.75} As	5.7546	1.7351	52.7137	52.8548	47.3078
In _{0.30} Ga _{0.70} As	5.7748	1.7412	52.5142	52.6547	47.1314
In _{0.35} Ga _{0.65} As	5.7951	1.7473	52.3173	52.4571	46.9572
In _{0.40} Ga _{0.60} As	5.8153	1.7534	52.1209	52.2601	46.7835
In _{0.45} Ga _{0.55} As	5.8356	1.7595	51.9270	52.0656	46.6120
In _{0.50} Ga _{0.50} As	5.8558	1.7656	51.7336	51.8716	46.4409
In _{0.55} Ga _{0.45} As	5.8761	1.7717	51.5427	51.6801	46.2720
In _{0.60} Ga _{0.40} As	5.8963	1.7778	51.3523	51.4891	46.1034
InAs	6.0583	1.8266	49.8836	50.0160	44.8026

4.3 Análisis de picos por grupos.

Con el fin de estudiar los difractogramas obtenidos, se dividió en grupos A, B, C, D a los picos observados a simple vista y se realizó un acercamiento a la zona de dichos picos.

4.3.1 Picos de grupo A.

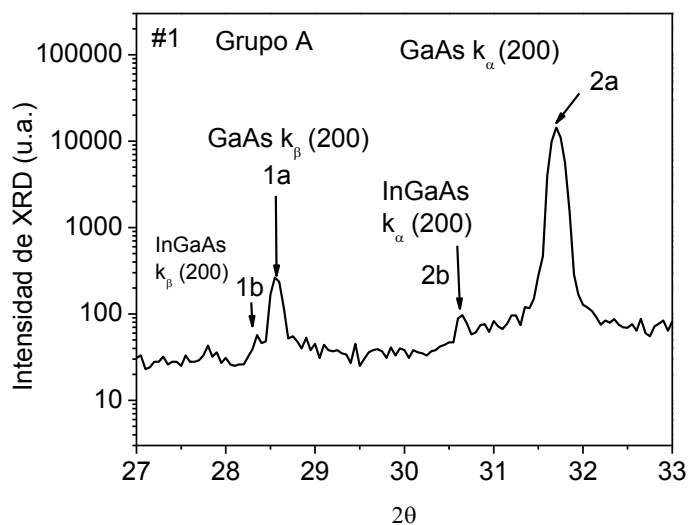


Figura 4.6 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #1.

En la figura 4.6 se observa el acercamiento a los picos de grupo A y se alcanzan a apreciar la aparición de un par de picos no identificados.

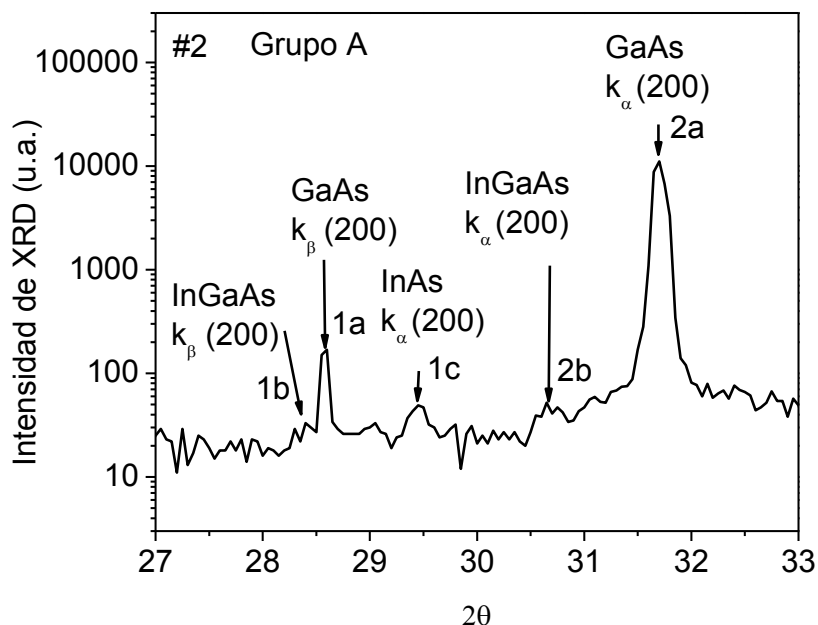


Figura 4.7 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #2.

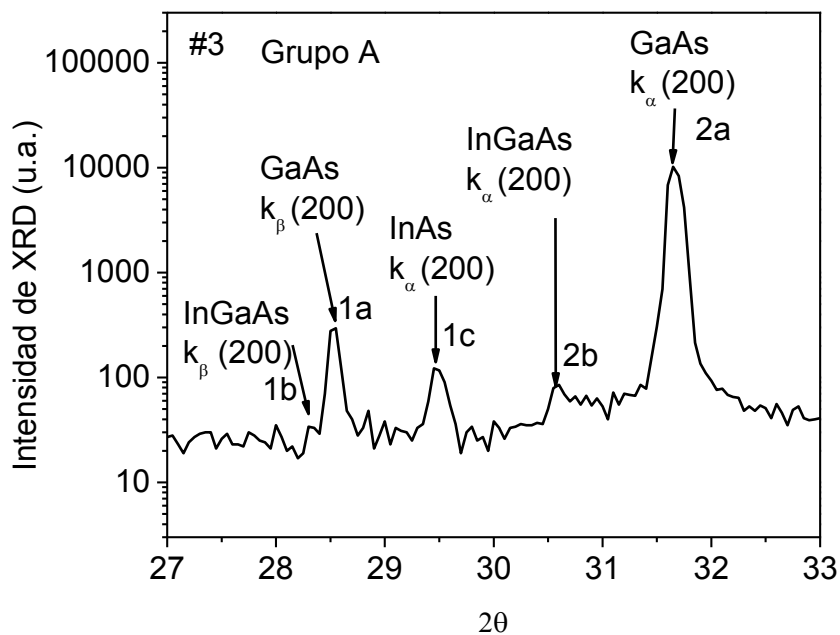


Figura 4.8 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #3.

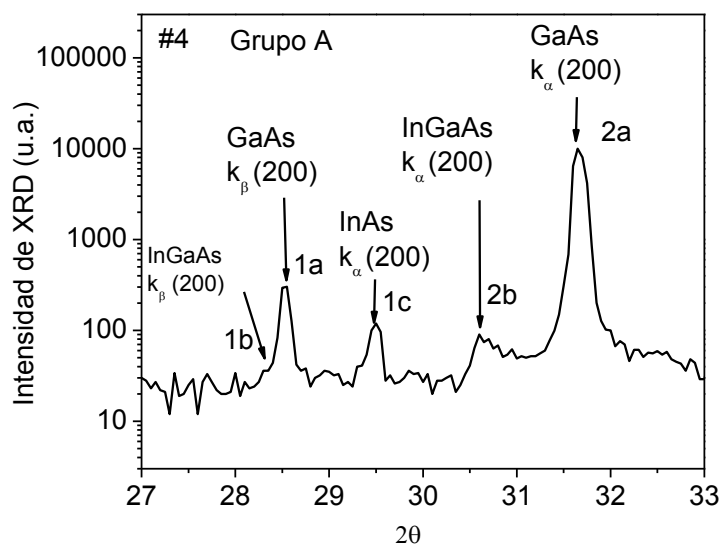


Figura 4.9 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #4.

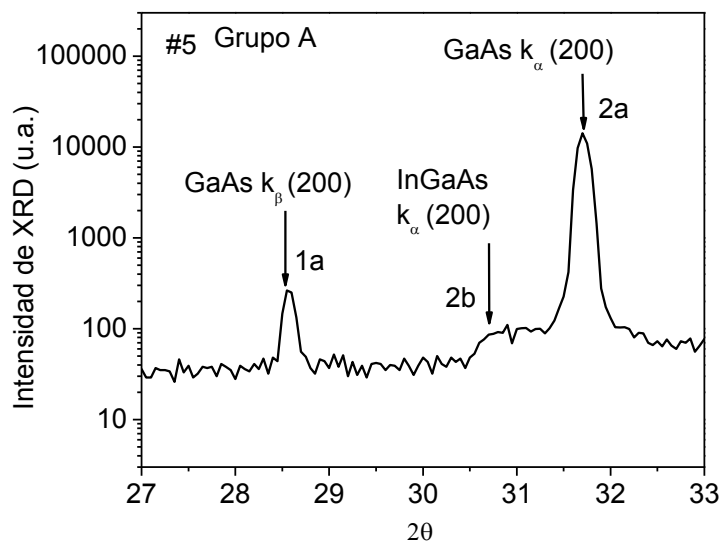


Figura 4.10 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #5.

En las figuras 4.7 -4.10 se observan prácticamente los mismos picos excepto por la muestra #1 en la cual no aparece el pico 1c y la muestra 5 en la que no se aprecian los picos 1b y 1c.

La tabla 4.3 recopila las posiciones de los picos que se observa en el grupo A así como la identificación que se hizo de cada pico.

Tabla 4.3 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 27 - 33^\circ$.

Grupo A	Pico 1a GaAs (200) k_β	Pico 1b InGaAs (200) k_β	Pico 1c InAs (200) k_α	Pico 2a GaAs (200) K_α	Pico 2b InGaAs (200) K_α
#1	28.55	28.35	-	31.70	30.62
#2	28.60	28.40	29.45	31.69	30.62
#3	28.55	28.30	29.45	31.66	30.62
#4	28.55	28.30	29.50	31.66	30.62
#5	28.55	-	-	31.70	30.62

4.3.2 Picos de grupo B.

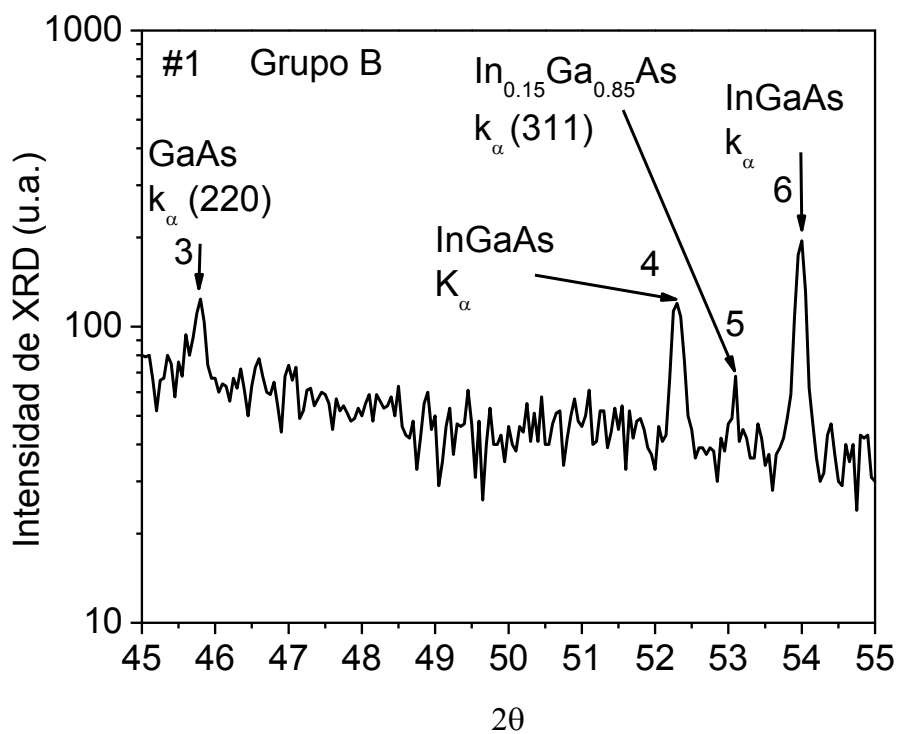


Figura 4.11 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #1.

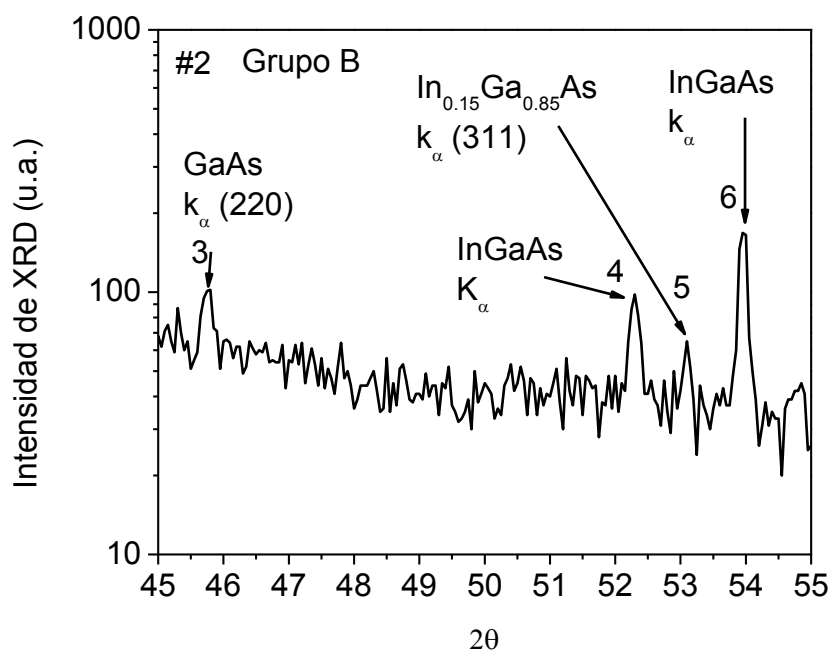


Figura 4.12 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #2.

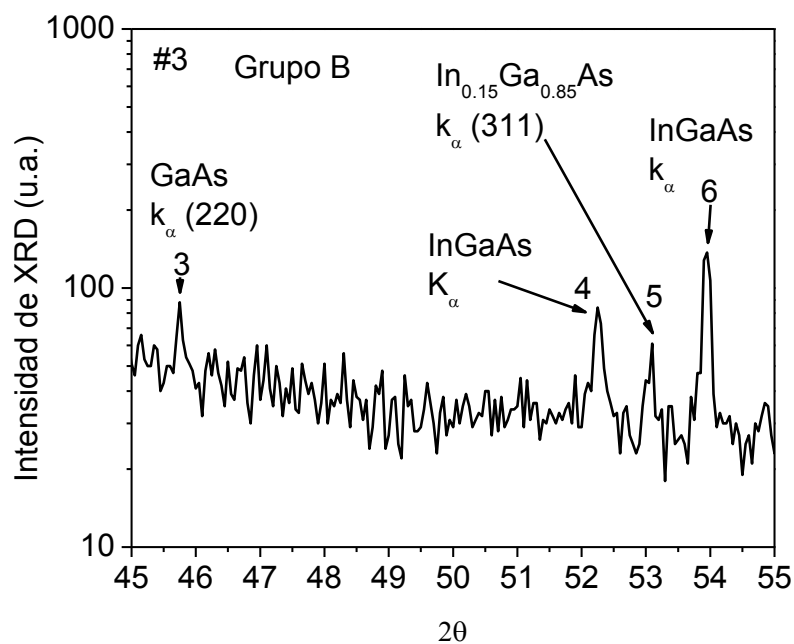


Figura 4.13 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #3.

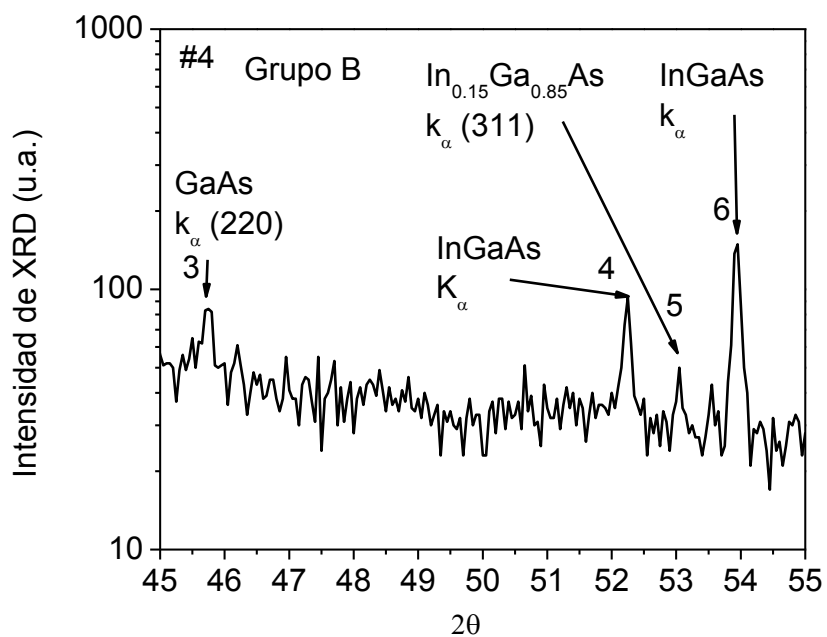


Figura 4.14 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #4.

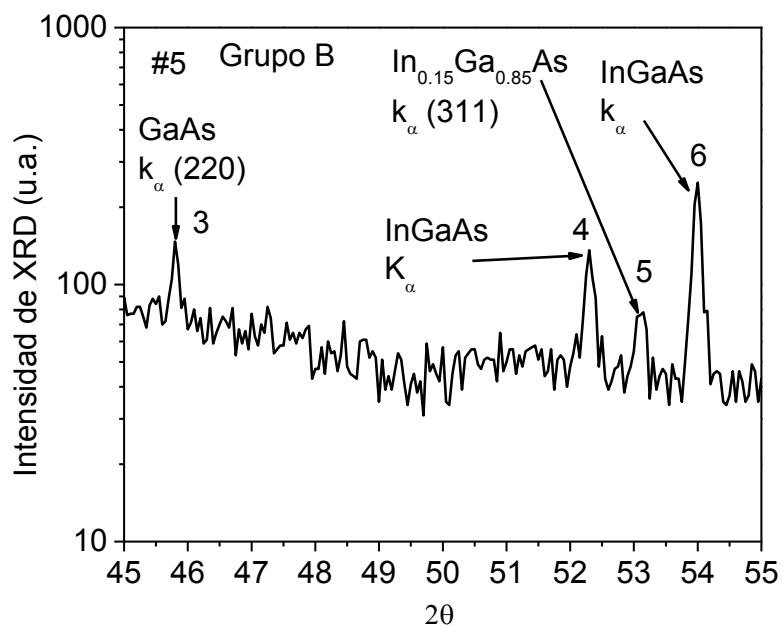


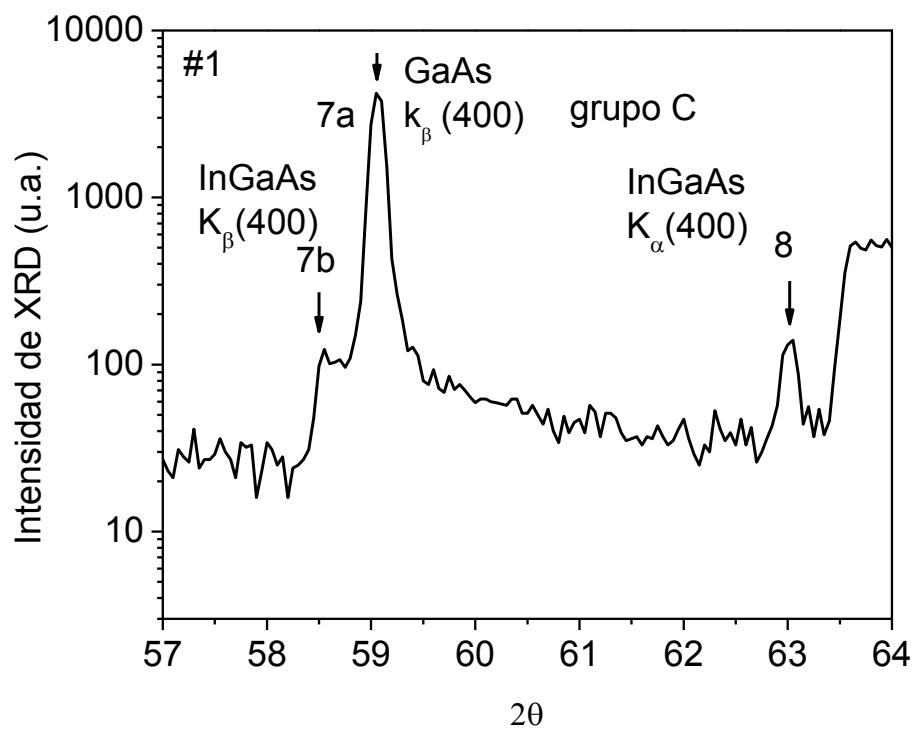
Figura 4.15 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #5.

En las figuras 4.11 - 4.15 no se observa la aparición de ningún pico nuevo, la posición e identificación de los picos se muestra en la tabla 4.4.

Tabla 4.4 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 45 - 55^\circ$.

Grupo B	Pico3 GaAs (220) k_α	Pico4 InGaAs K_α	Pico5 In _{0.15} Ga _{0.85} As (311) k_α	Pico6 InGaAs K_α
#1	45.80	52.30	53.10	54.00
#2	45.80	52.30	53.10	53.95
#3	45.75	52.25	53.10	53.95
#4	45.75	52.25	53.05	53.95
#5	45.80	52.30	53.15	54.00

4.3.3 Picos de grupo C.

**Figura 4.16** Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #1.

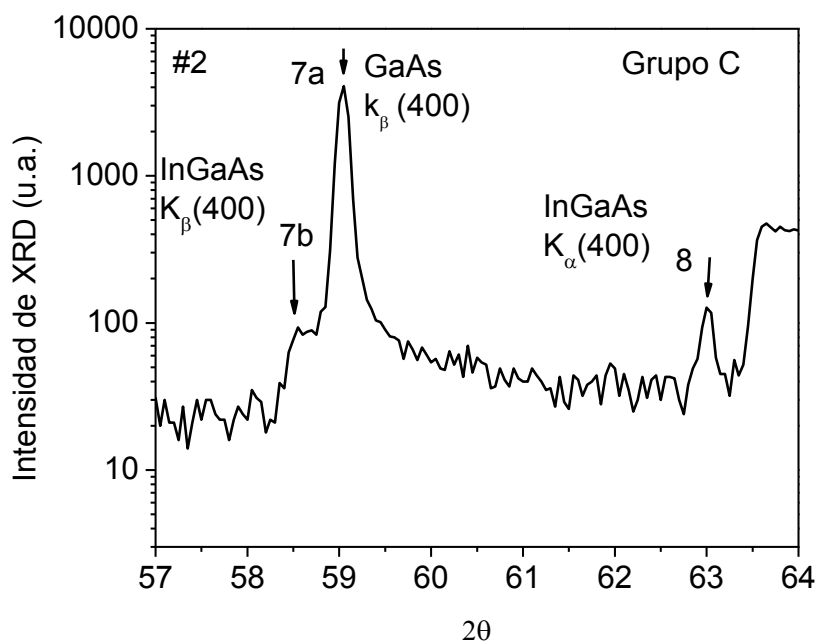


Figura 4.17 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #2.

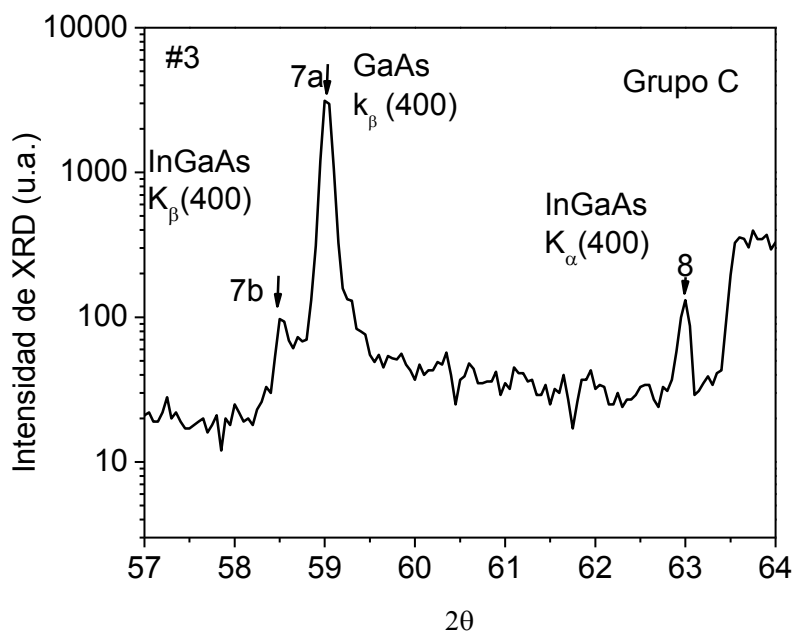


Figura 4.18 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #3.

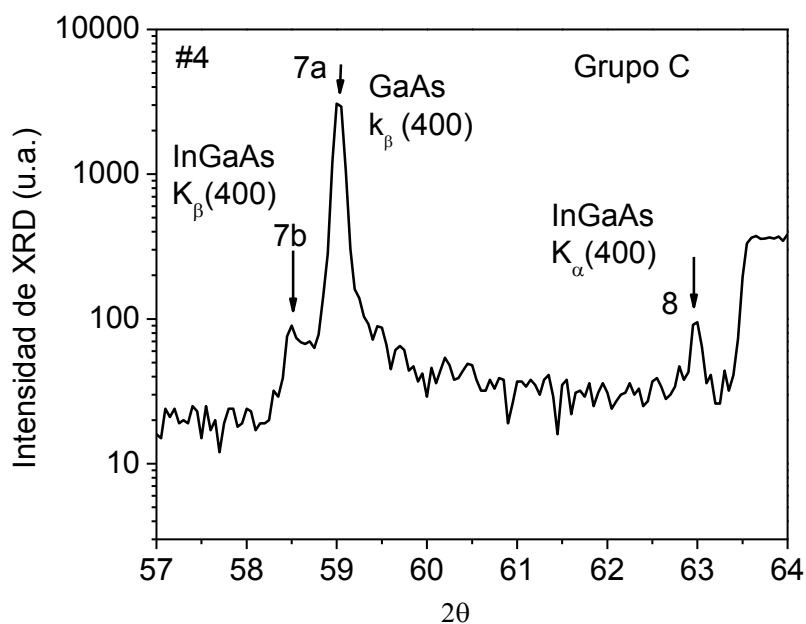


Figura 4.19 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #4.

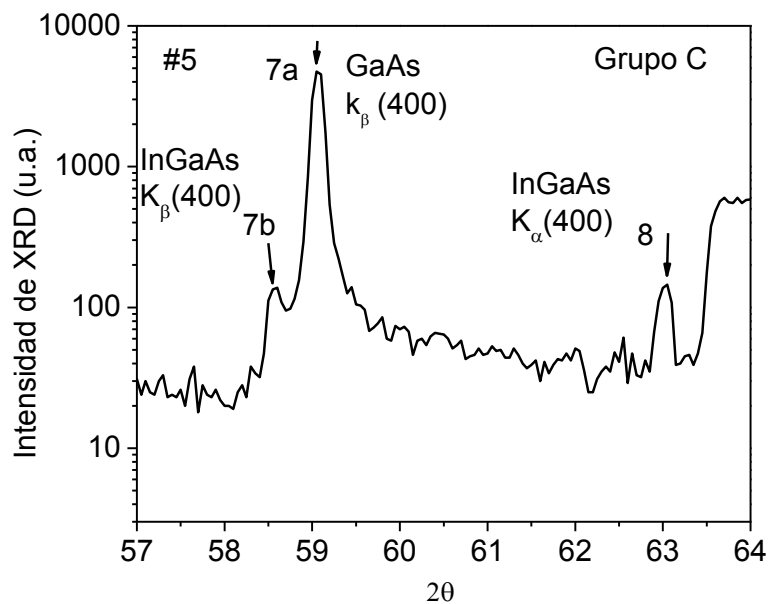


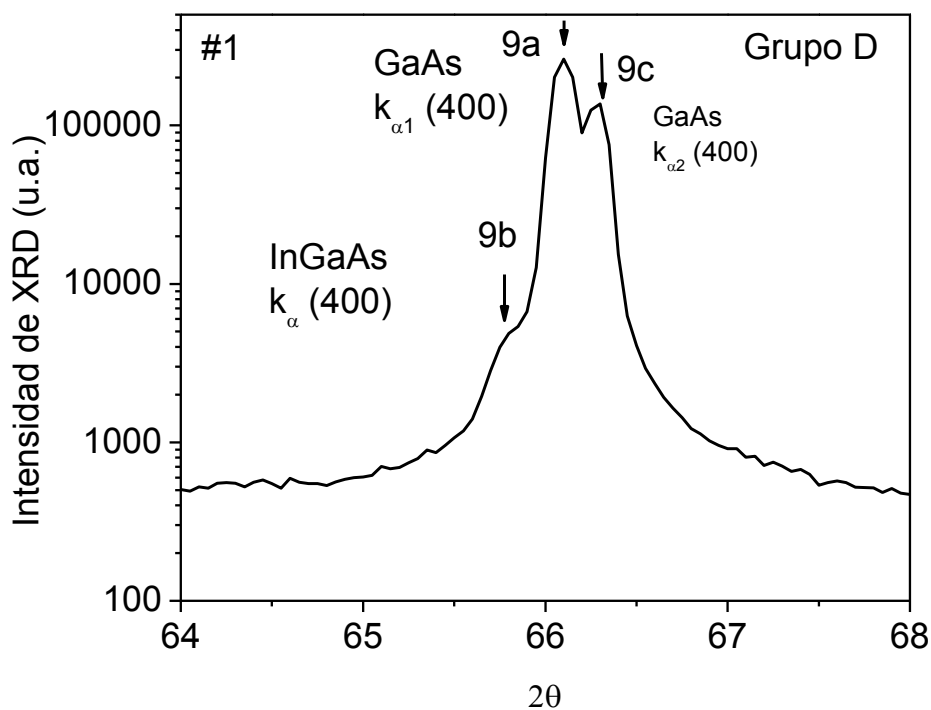
Figura 4.20 Acercamiento de una zona del difractograma de la muestra #5.

En las figuras 4.16 – 4.20 se observan los picos del grupo C, la tabla 4.5 muestra la identificación y la posición de los picos mostrados en este grupo.

Tabla 4.5 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 57 - 64^\circ$.

Grupo C	Pico 7a GaAs (400) k_β	Pico 7b InGaAs k_β	Pico 8 InGaAs k_α
#1	59.09	58.55	63.04
#2	59.08	58.55	63.02
#3	59.04	58.50	63.01
#4	59.04	58.50	63.01
#5	59.09	58.60	63.04

4.3.4 Picos de grupo D.

**Figura 4.21** Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #1.

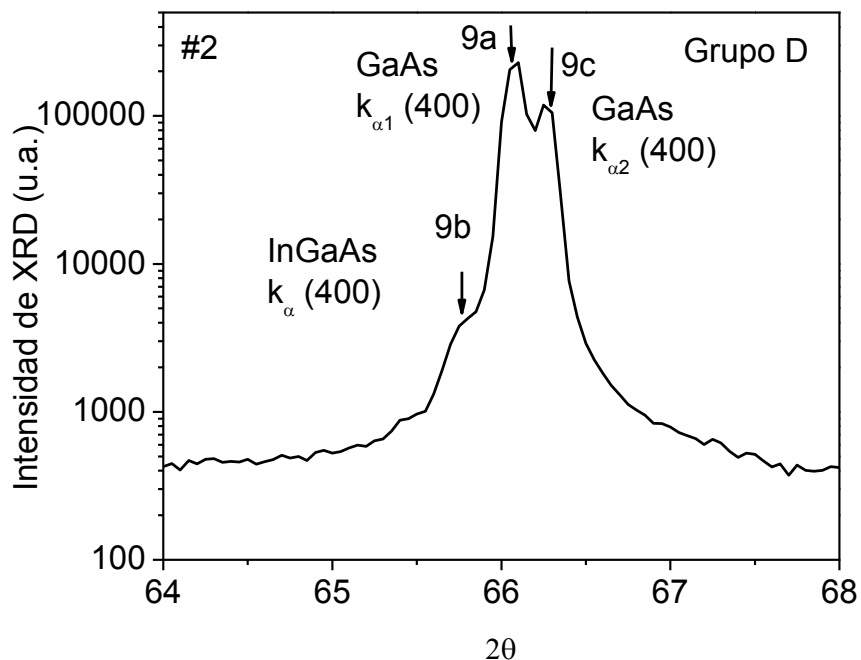


Figura 4.22 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #2.

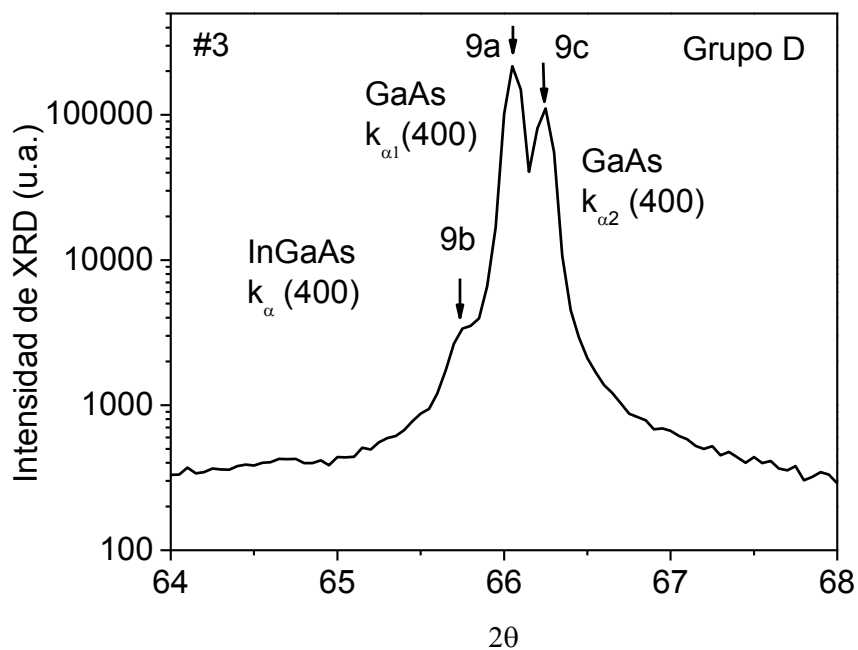


Figura 4.23 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #3.

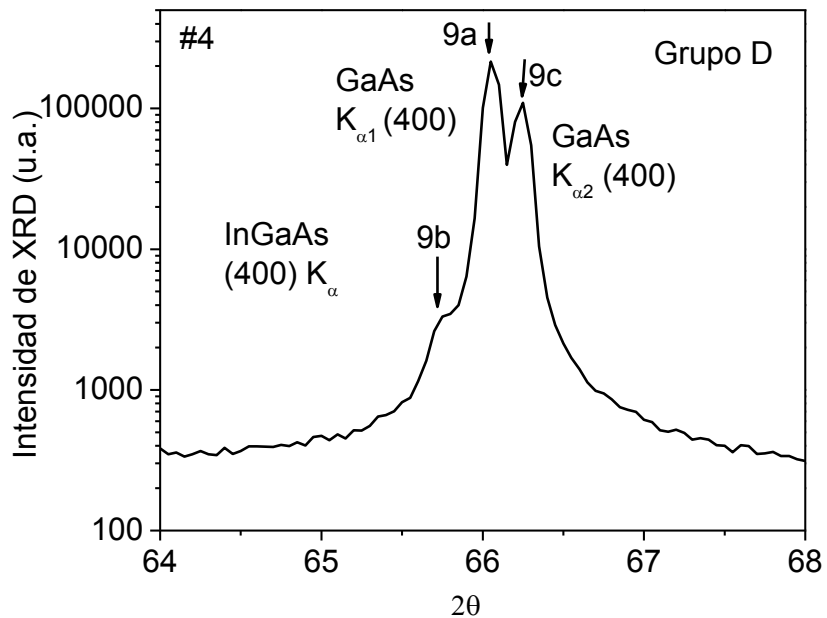


Figura 4.24 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #4.

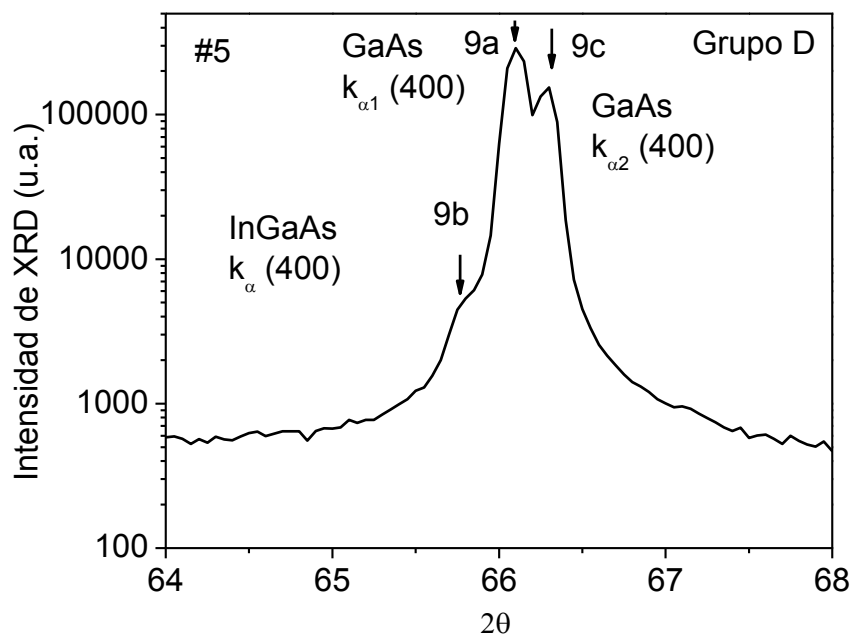


Figura 4.25 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del sustrato de GaAs de la muestra #5.

En las figuras 4.21 – 4.25 se observan los picos pertenecientes al grupo D, su identificación y posición se encuentran en la tabla 4.6.

Tabla 4.6 Posiciones de los picos de difracción en el rango $2\theta = 64 - 68^\circ$.

Grupo D	9a GaAs (400) $K_{\alpha 1}$	9b InGaAs (400) K_{α}	9c GaAs (400) $K_{\alpha 2}$
#1	66.13	65.80	66.31
#2	66.12	65.80	66.30
#3	66.08	65.75	66.26
#4	66.08	65.75	66.26
#5	66.13	65.75	66.31

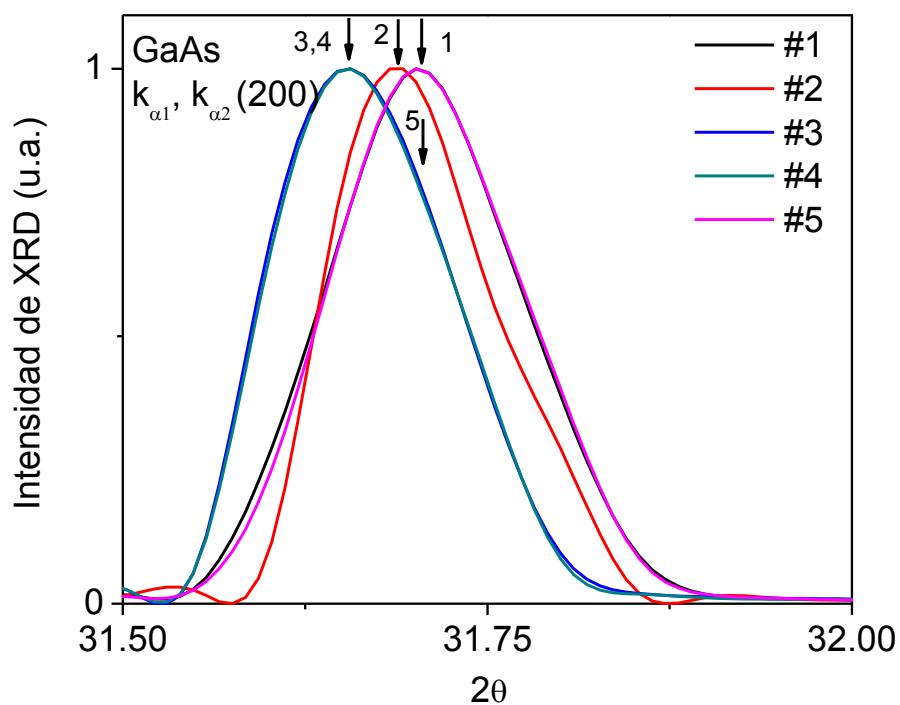
Tabla 4.7 Picos obtenidos por difracción de K_{α} .

#	1c	2a	2b	3	4	5	6	9a $k_{\alpha 1}$	9b	9c $k_{\alpha 2}$
#1	-	31.70 GaAs (200)	30.62 InGaAs (200)	45.80 GaAs (220)	52.30 InGaAs (311)	53.10 InGaAs (311)	54.00 GaAs (311)	66.13 GaAs (400)	65.80 InGaAs (400)	66.31 GaAs (400)
#2	29.45 InAs (200)	31.69 GaAs (200)	30.62 InGaAs (200)	45.80 GaAs (220)	52.30 InGaAs (311)	53.10 InGaAs (311)	53.95 GaAs (311)	66.12 GaAs (400)	65.80 InGaAs (400)	66.30 GaAs (400)
#3	29.45 InAs (200)	31.66 GaAs (200)	30.62 InGaAs (200)	45.75 GaAs (220)	52.25 InGaAs (311)	53.10 InGaAs (311)	53.95 GaAs (311)	66.08 GaAs (400)	65.75 InGaAs (400)	66.26 GaAs (400)
#4	29.50 InAs (200)	31.66 GaAs (200)	30.62 InGaAs (200)	45.75 GaAs (220)	52.25 InGaAs (311)	53.05 InGaAs (311)	53.95 GaAs (311)	66.08 GaAs (400)	65.75 InGaAs (400)	66.26 GaAs (400)
#5	-	31.70 GaAs (200)	30.62 InGaAs (200)	45.80 GaAs (220)	52.30 InGaAs (311)	53.15 InGaAs (311)	54.00 GaAs (311)	66.13 GaAs (400)	65.75 InGaAs (400)	66.31 GaAs (400)

La tabla 4.7 recopila la posición de los picos de difracción pertenecientes a la radiación k_{α} del cobre. Se muestra el material y los planos a los que pertenece dicho pico. La tabla 4.8 presenta la posición de los picos que pertenecen a la radiación k_{β} .

Tabla 4.8 Picos recibidos por difracción de K_{β} .

#	1a	1b	7a	7b
#1	28.55 GaAs (200)	28.35 $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}$ (200)	59.09 GaAs (400)	58.55 InGaAs (400)
#2	28.60 GaAs (200)	28.40 $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}$ (200)	59.08 GaAs (400)	58.55 InGaAs (400)
#3	28.55 GaAs (200)	28.30 $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}$ (200)	59.04 GaAs (400)	58.50 InGaAs (400)
#4	28.55 GaAs (200)	28.30 $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}$ (200)	59.04 GaAs (400)	58.50 InGaAs (400)
#5	28.55 GaAs (200)	-	59.09 GaAs (400)	58.60 InGaAs (400)

**Figura 4.26** Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (200) del GaAs de las muestras #1-#5.

La figura 4.26 muestra la superposición de los picos de difracción correspondiente a la radiación $k\alpha$ de los planos (200). De la figura es claro que las muestras #1 y #5 muestran la mayor deformación.

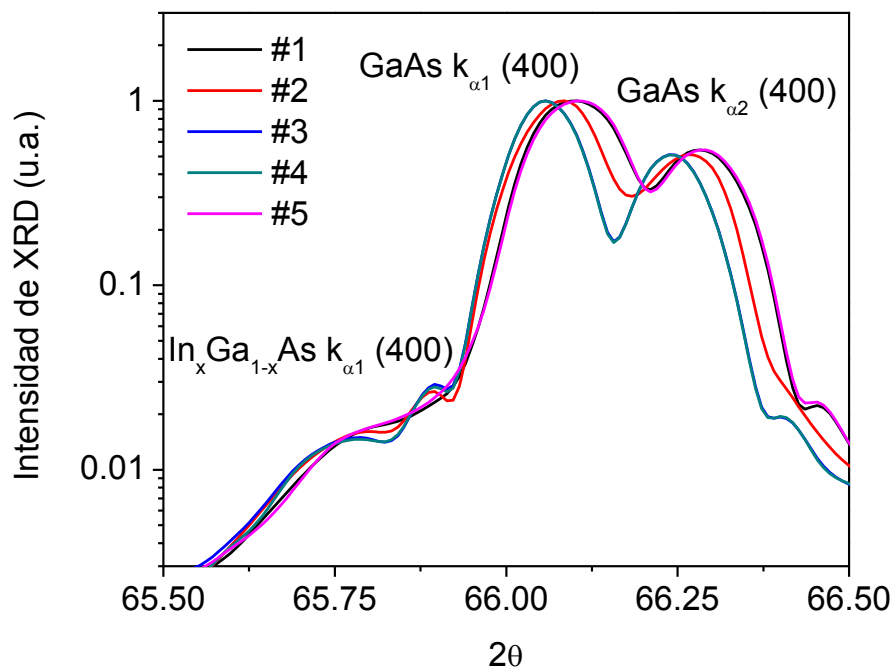


Figura 4.27 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de las muestras #1-#5.

La figura 4.27 muestra la superposición de los picos de difracción correspondiente a la radiación $k\alpha$ de los planos (400) del GaAs, se alcanza a apreciar la separación de las líneas $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$. De la figura es claro que se tiene el mismo comportamiento que en la figura 4.26, es claro que se alcanza a observar un pico más correspondiente a los planos (400) del InGaAs.

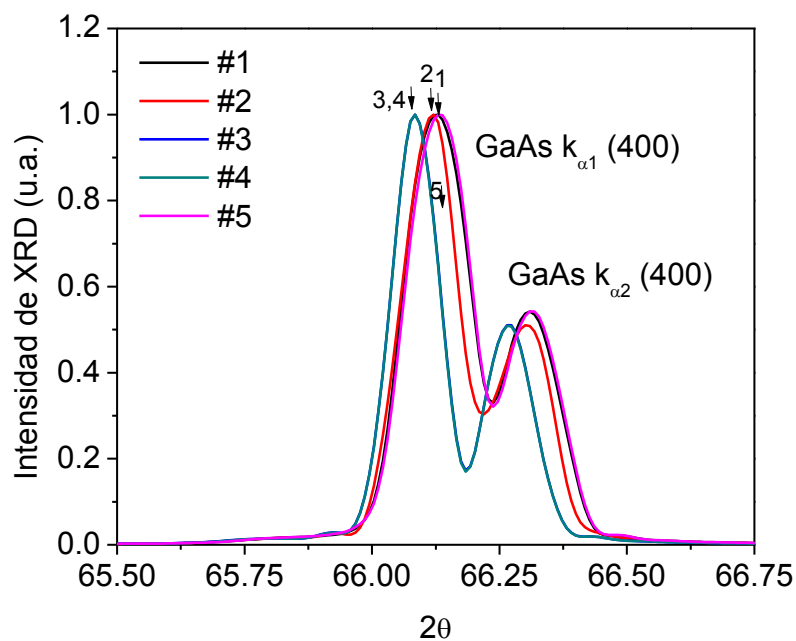


Figura 4.28 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones $k_{\alpha 1}$ y $k_{\alpha 2}$ del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs de las muestras #1-#5.

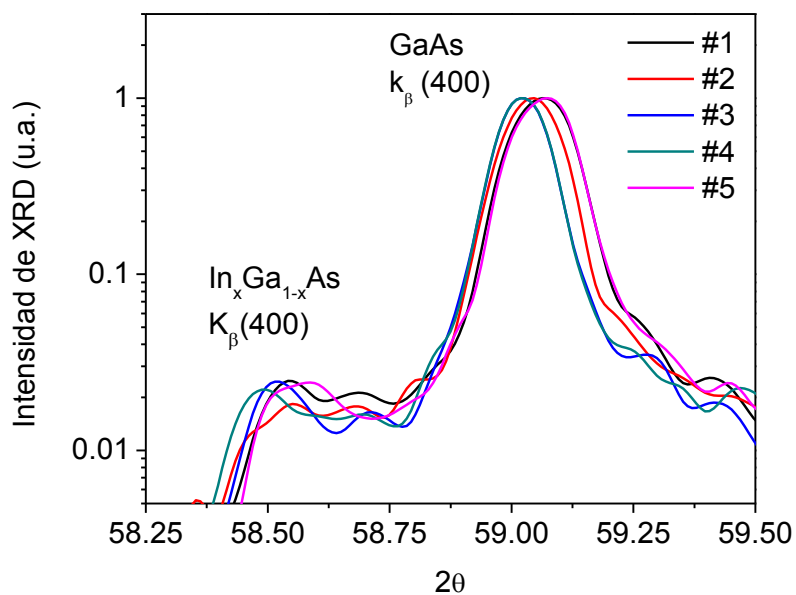


Figura 4.29 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones k_{β} del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs e $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de las muestras #1-#5.

La figura 4.28 muestra un acercamiento a los picos correspondientes a la difracción de las líneas k_{a1} y k_{a2} del cobre para los planos (400) del sustrato de GaAs mientras que la figura 4.29 muestra los mismos planos pero para la línea k_{β} , en la figura 4.29 también se observa un pico correspondiente a los planos (400) de la difracción de la línea k_{β} para el InGaAs. Es claro que en todos los picos correspondientes al sustrato de GaAs se mantiene el mismo comportamiento de los picos en lo que se refiere a su posición relativa como se observa en la figura 4.30, en ésta se observa un acercamiento al pico obtenido por la radiación k_{β} y se aprecia como las muestras #1 y #5 son las que presentan la mayor deformación.

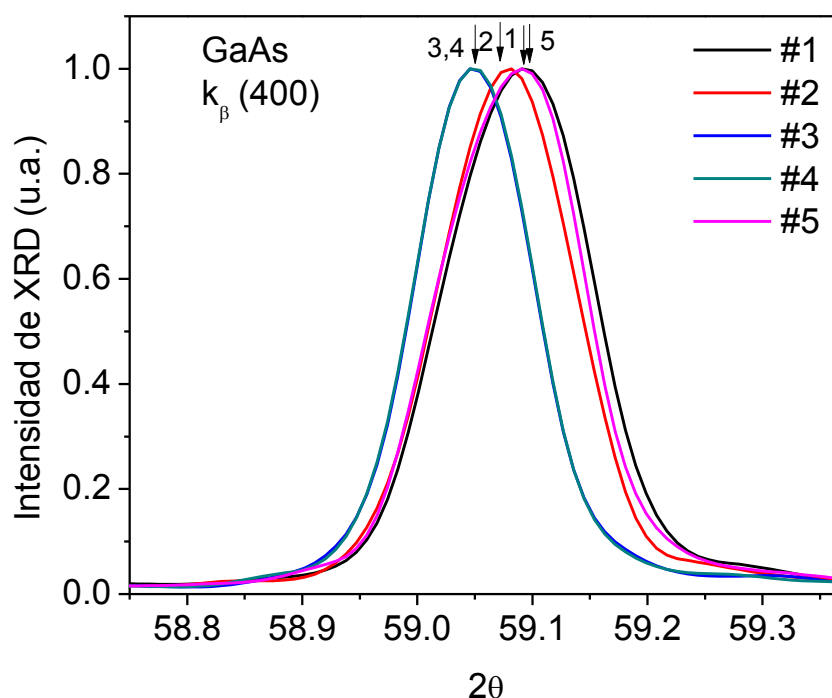


Figura 4.30 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones k_{β} del haz de rayos X para los planos (400) del GaAs de las muestras #1-#5.

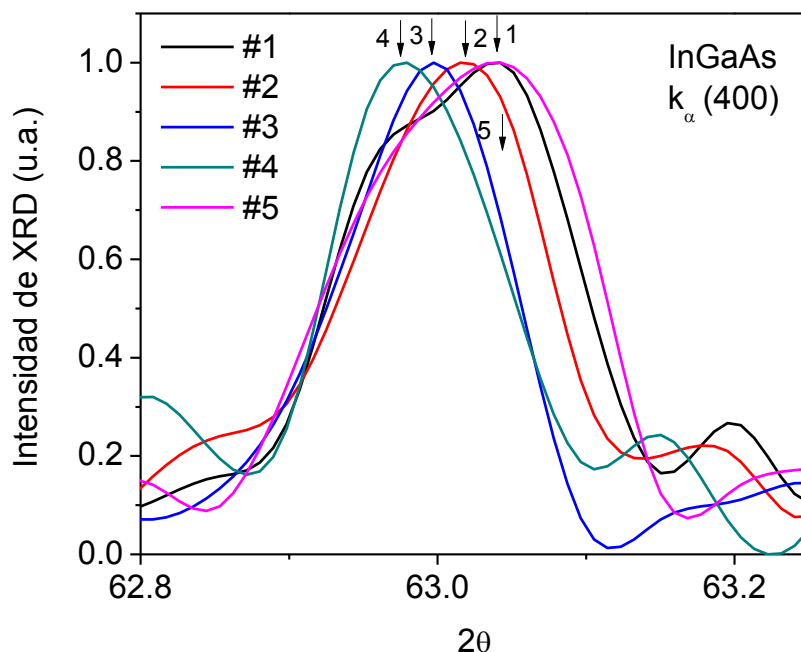


Figura 4.31 Superposición de los picos de difracción correspondientes a las radiaciones k_{α} del haz de rayos X para los planos (400) del $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ de las muestras #1-#5.

Las figuras 4.26 – 4.31 presentan los resultados obtenidos de la XRD de las estructuras con QDs. En las figuras se muestra la superposición de los picos de difracción con la mayor intensidad correspondientes a las líneas $k_{\alpha 1}$, $k_{\alpha 2}$ y k_{β} de una fuente de cobre, de los planos cristalinos (200) y (400) del GaAs, y las figuras (4.11 -4.15 y tabla 4.4) muestran picos de XRD con una menor intensidad los cuales corresponden a la difracción de los planos (311) y (220) del GaAs cubico. Aquí también se detectó un conjunto de picos de XRD de baja intensidad correspondientes a los planos cristalinos (200), (311) y (400) de los pozos cuánticos de $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}$ y de $\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}$, así también se detectó la difracción de los planos (200) de los QDs de InAs. Fue inesperado que los resultados de rayos X testificaran la aparición de dos tipos de capas de InGaAs en las estructuras con QDs (figuras 4.6 -4.25, tabla 4.2) tales como una capa cubierta de $\text{In}_{0.07}\text{Ga}_{0.93}\text{As}$ y de una capa colchón de

$\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}$. La capa colchón de $\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}$ se creó aparentemente a partir del mezclado del material entre las capas de mojado de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ y de InAs a las temperaturas de crecimiento. El pico de XRD en 29.45° está relacionado con la difracción de los planos cristalinos (200) de los QDs de InAs los cuales solo se mostraron de manera clara en las estructuras #2, #3 y #4 (figuras 4.7 – 4.9 y tabla 4.3).

Los picos de XRD con alta intensidad ($31.65 - 31.70^\circ$) relacionados con la difracción de los planos cristalinos (200) en el GaAs se presentan de manera más detallada en la figura 4.26. De los resultados de XRD se sigue que la variación de los ángulos de difracción no mantiene un comportamiento monótono. Los picos de XRD de los planos (200) y (400) en #2, #3 y #4 se encuentran más cerca de los picos de XRD (31.628° , 66.053°) correspondientes del cristal de GaAs en bulto (figura 4.26, tabla 4.2). Este hecho indica que los valores de deformación (y correspondientemente los del estrés compresivo) en los pozos cuánticos de InGaAs/GaAs en las estructuras #2, #3 y #4 son menores que en las estructuras #1 y #5. La variación de los picos de difracción ($28.55\text{-}28.60^\circ$, $59.07\text{-}59.12^\circ$ y $66.05\text{-}66.10^\circ$) relacionados con las líneas k_α y k_β de los planos cristalinos (200) y (400) en las capas de los pozos cuánticos de GaAs (figuras 4.27 -4.30) confirman las conclusiones arriba mencionadas (tablas 4.7 y 4.8).

4.4 Deformación elástica.

La tabla 4.9 se muestran los datos de difracción para algunos picos, a su vez se ha calculado la deformación con base a la ecuación presentada en [20]:

$$\varepsilon = -(\theta - \theta_o) \cot \theta_o, \quad (5)$$

Donde θ y θ_0 son los ángulos de difracción: en la capa de tensión (θ) y en la capa de referencia sin esfuerzo (θ_0). El valor de θ_0 en los casos presentes ha sido elegido como el ángulo de difracción del GaAs en bulto.

Tabla 4.9 Datos de difracción de rayos X.

Pico	Muestra	Posición 2 θ en el bulto	Posición 2 θ en la muestra	$\Delta 2\theta$	Posición θ en el bulto	Posición θ en la muestra	$\Delta\theta$	ε
GaAs (200) Ka1	#1	31.6280	31.70	0.072	15.8140	15.850	0.036	0.064
	#2		31.69	0.062		15.845	0.031	0.055
	#3		31.66	0.032		15.830	0.016	0.028
	#4		31.66	0.032		15.830	0.016	0.028
	#5		31.70	0.072		15.850	0.036	0.064
GaAs (400) Ka1	#1	66.0536	66.13	0.076	33.0268	33.065	0.038	0.058
	#2		66.12	0.066		33.060	0.033	0.051
	#3		66.08	0.026		33.040	0.013	0.020
	#4		66.08	0.026		33.040	0.013	0.020
	#5		66.13	0.076		33.065	0.038	0.058
GaAs (400) Ka2	#1	66.2387	66.31	0.071	33.1194	33.155	0.036	0.055
	#2		66.30	0.061		33.150	0.031	0.048
	#3		66.26	0.021		33.130	0.011	0.017
	#4		66.26	0.021		33.130	0.011	0.017
	#5		66.31	0.071		33.155	0.036	0.055
GaAs (400) Kb	#1	59.0165	59.09	0.074	29.5083	29.545	0.037	0.065
	#2		59.08	0.063		29.540	0.032	0.057
	#3		59.04	0.023		29.520	0.012	0.021
	#4		59.04	0.023		29.520	0.012	0.021
	#5		59.09	0.074		29.545	0.037	0.065
In _{0.60} G a _{0.40} As (400) Ka1	#1	63.0083	63.04	0.032	31.5042	31.520	0.016	0.026
	#2		63.02	0.012		31.510	0.006	0.010
	#3		63.01	0.002		31.505	0.001	0.002
	#4		63.01	0.002		31.505	0.001	0.002
	#5		63.04	0.032		31.520	0.016	0.026

En las estructuras estudiadas, el valor de la deformación es proporcional a la diferencia entre los ángulos de difracción medidos para las capas de los pozos cuánticos de GaAs. Los valores calculados de la deformación ε son presentados en la tabla 4.9. La variación de los valores de la deformación en las estructuras con QDs estudiadas muestra un comportamiento no monótono: ε decrece en las estructuras #1, #2, #3, #4 y aumenta en #5 con el decremento de la densidad de QDs y el incremento en el tamaño de los QDs.

El impacto del alto nivel de estrés compresivo en las estructuras #1, #2 y #5 se relaciona con la estimulación de la interdifusión Ga/In entre los QDs de InAs y las capas de $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$. Esta conclusión es clara del ajuste de la dependencia de los picos de FL (figura 3.12). Nótese que los picos de XRD de los planos (200) relacionados a los QDs de InAs no fueron detectados en las estructuras #1 y #5 (figuras 4.6 - 4.10). Este último hecho en las estructuras #1 y #5 puede deberse a la interdifusión de Ga/In y la relajación parcial del estrés con la aparición de defectos y la transformación del material cristalino de los QDs en una fase amorfa. Los defectos creados aparentemente juegan el rol de centros de recombinación no radiativos los cuales son responsables de la baja intensidad integrada de FL en las estructuras #1 y #5. Además ambos factores: el estrés compresivo y la interdifusión del Ga/In estimulada por el estrés son responsables del corrimiento de pico de FL hacia el rango del espectro de altas energías en las estructuras #1, #2, #4 y #5 en comparación con la #3.

A continuación se muestran las graficas de la deformación contra la temperatura de crecimiento para algunos de los picos observado.

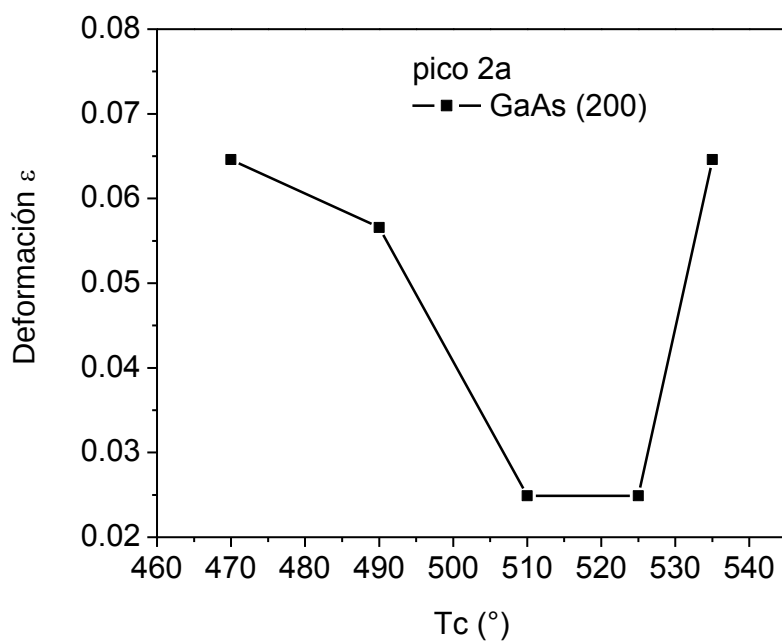


Figura 4.32 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (200) del GaAs para la radiación k_{α} .

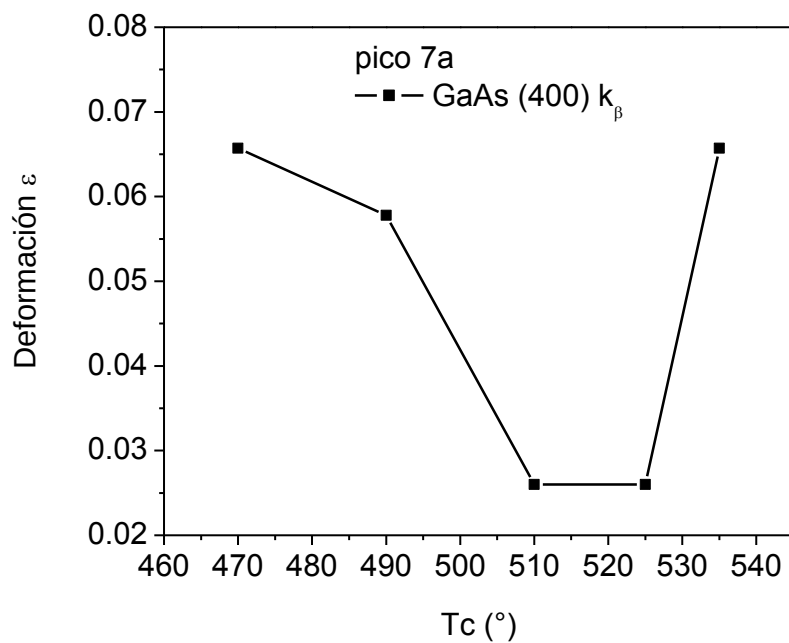


Figura 4.33 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs para la radiación k_{β} .

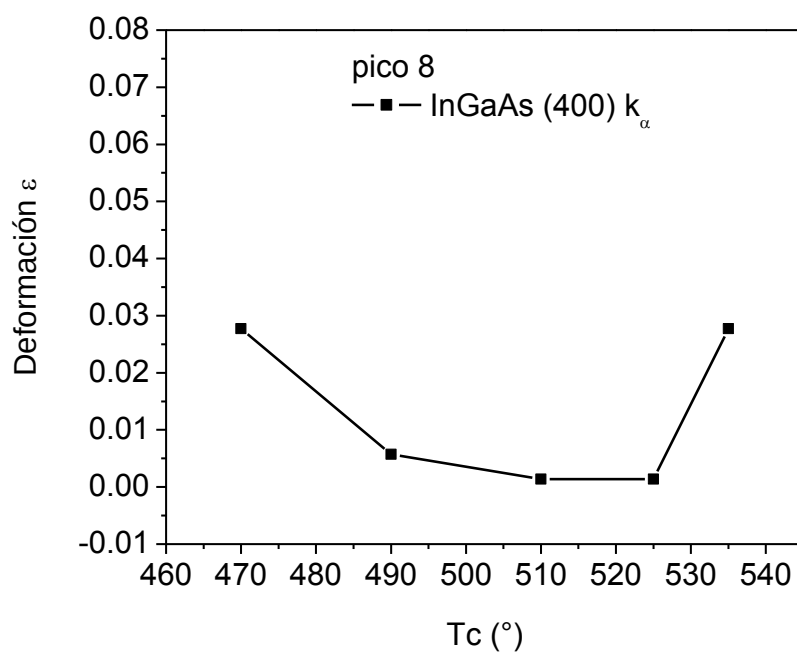


Figura 4.34 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del $\text{In}_{0.60}\text{Ga}_{0.40}\text{As}$ para la radiación k_{α} .

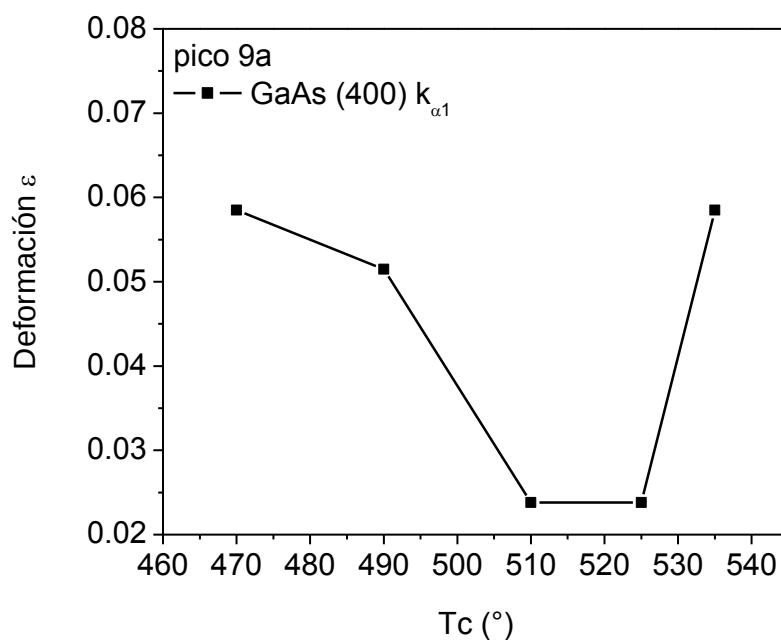


Figura 4.35 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs para la radiación $k_{\alpha1}$.

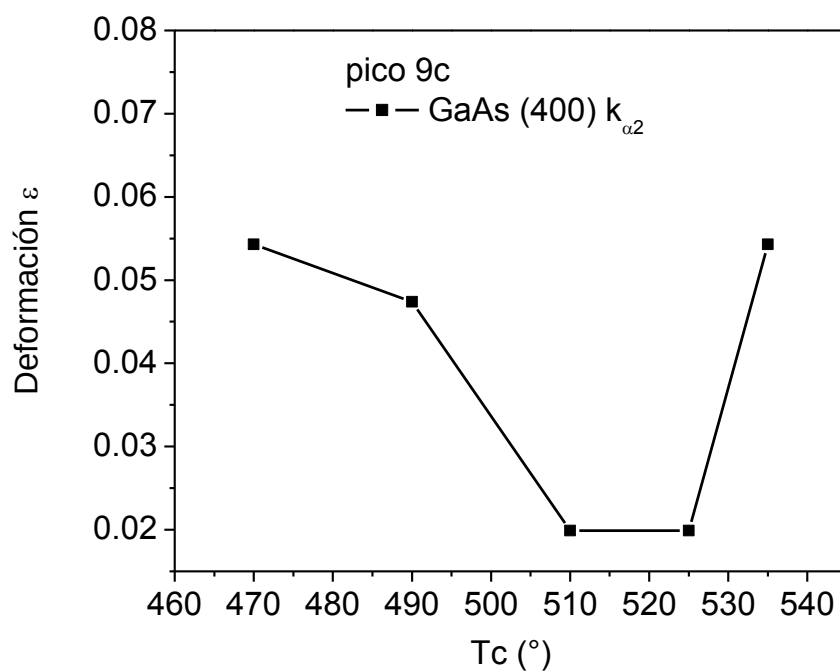


Figura 4.36 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs para la radiación $k_{\alpha 2}$.

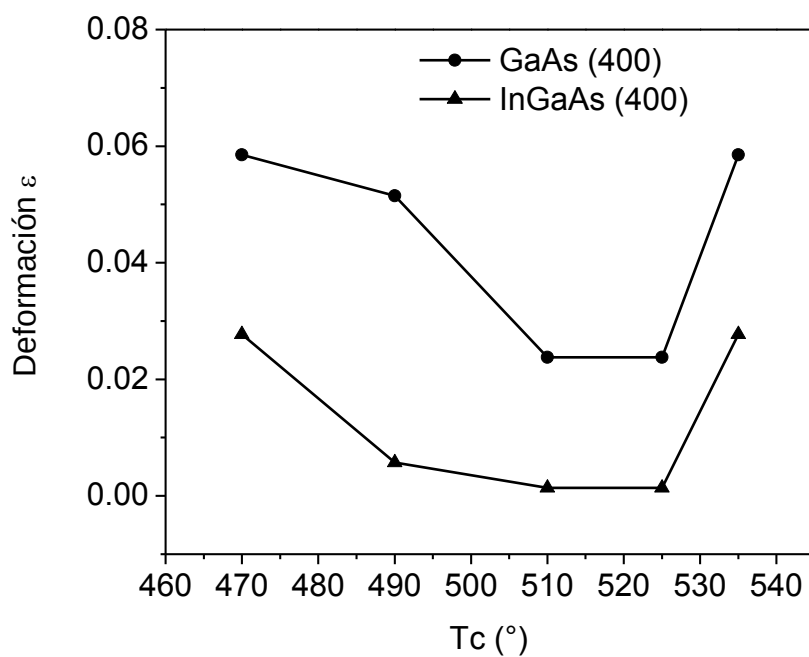


Figura 4.37 Deformación con respecto a la temperatura de crecimiento de las muestras #1-#5 para los planos (400) del GaAs y (400) del InGaAs para la radiación $k_{\alpha 1}$.

Es esencial notar que la aplicación de las capas colchón y cubierta de InGaAs acopladas con los QDs en las estructuras, estimula el desajuste en la red y decrementa la deformación en la vecindad de los QDs y simultáneamente el desajuste en la red y el aumento en la deformación en la interface InGaAs/GaAs para el área superficial entre los QDs. Cuando la densidad de QDs decrementa, el área superficial en la vecindad de los QDs se reduce y el área de la interface InGaAs/GaAs entre los QDs aumenta. La variación no monótona de los valores de la deformación contra la densidad y tamaños de los QDs de InAs en las estructuras de InGaAs/GaAs aparentemente es el resultado de la competición de los dos efectos mencionados.

4.5 Conclusiones de capítulo.

1.- La deformación elástica en las muestras cambió de manera no monótona con respecto de la densidad de los QDs. Los picos de XRD de los planos (200) y (400) en los pozos de GaAs e InGaAs en #2, #3 y #4 se encuentran más cerca de los picos de XRD (31.628° , 66.053° y 63.008°) correspondientes a los planos (200) y (400) de los cristales de GaAs e InGaAs en bulto. Este hecho indica que los valores de deformación elástica (y los del correspondiente esfuerzo elástico) en los pozos cuánticos de InGaAs/GaAs de las estructuras #2, #3 y #4 son menores que en las estructuras #1 y #5.

2.- La variación de los picos de difracción (28.55 - 28.60° , 59.07 - 59.12°) relacionados con la difracción de la línea k_β de los planos cristalinos (200) y (400) en las capas de los pozos cuánticos de GaAs contra la densidad de QDs confirman la conclusión mencionada en 1.

3. Aparentemente la interdifusión del In/Ga entre la capa cubierta del InGaAs e InAs de los QDs (que discutimos en Capítulo 3) no solo está estimulada por la temperatura de crecimiento de los QDs en las estructuras estudiadas sino también por el alto nivel de esfuerzos elásticos en las estructuras #1 y #5 en comparación con las estructuras #2, #3 y #4.

Capítulo 5 Conclusiones Generales.

1. Al comparar los resultados de los espectros de fotoluminiscencia de las estructuras con QDs obtenidos con diferentes temperaturas se muestra que las estructuras con mayor calidad de QDs fueron obtenidas con las temperaturas de crecimiento de QDs de 490-525°C. Las estructuras con QDs obtenidas a 470 y 535°C tienen una baja intensidad de fotoluminiscencia.
2. La investigación de la dependencia en la temperatura de la fotoluminiscencia y la aplicación del métodos de Varshni y Einstein para el análisis de la composición de los QDs muestran que las estructuras con QDs obtenidos a 490-525°C tienen parámetros muy cercanos al aquellos del bulto de InAs. Al mismo tiempo la composición del material de los QDs para las muestras con QDs crecidos a 470 y 535°C muestran que en estas estructuras tuvo lugar la interdifusión In-Ga a la temperatura de crecimiento.
3. La deformación elástica en las muestras no es monótona, siendo las muestras #1 y #5 las que presentan la mayor deformación y las muestras #2(490°C), #3(510°C) y #4(525°C) presentan una menor deformación elástica.
4. La aplicación de las capas colchón y cubierta de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ acopladas con los QDs de InAs en las estructuras DWELL decrementan el estrés en la vecindad de los QDs. Simultáneamente el estrés se incrementa en la interface InGaAs/GaAs, para el área superficial entre los QDs. Cuando la densidad de QDs decrementa como consecuencia de las altas temperaturas de crecimiento de los QDs el área superficial en la vecindad de los QDs se reduce. Al mismo tiempo la interface InGaAs/GaAs entre los QDs aumenta. Las variaciones no monótonas en la deformación elástica y

la intensidad integrada de FL en función de la densidad de QDs en las estructuras estudiadas son, aparentemente, el resultado de la influencia de los dos efectos arriba mencionados.

Sugerencias para trabajo futuro.

Esfuerzo elástico.

Proponemos refinar los resultados obtenidos por difracción de rayos X mediante un estudio de difracción de rayos X de alta resolución con el fin de cuantificar el nivel del esfuerzo elástico en estructuras formadas por puntos cuánticos insertados en pozos cuánticos.

Capa barrera para los portadores.

Se puede mejorar la emisión de puntos cuánticos de InAs y disminuir la extinción térmica de la FL insertando dentro de la barrera de GaAs una capa de material con un ancho de banda prohibida mas grande, como AlAs, la cual actuaría como una barrera para los portadores en su proceso de ionización térmica.

Referencias

- [1] Peter Y. Yu, Manuel Cardona. Fundamentals of Semiconductors Third, revised and enlarged edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York 2003.
- [2] Self-Assembled InAs Quantum Dots PDF Presentation Steve Lyon Department of Electrical Engineering Princeton University.
- [3] A.Jasik, A.Wnuk, J.Gaca, M. Wójcik , A.Wójcik-Jedlinska, J.Muszalski a, W.Strupinski. Journal of Crystal Growth 311 4423–4432 (2009).
- [4]A.Gushterov, L.Lingys,J.P.Reithmaier. Journal of Crystal Growth 311 1783–1786 (2009).
- [5] Zhichuan Niu, Xiaodong Wang, Zhenhua Miao, Songlin Feng. Journal of Crystal Growth 227–228 1062–1068 (2001).
- [6] X.Q. Meng, B. Xu, P. Jin, X.L. Ye, Z.Y. Zhang, C.M. Li, Z.G. Wang. Journal of Crystal Growth 243 432–438 (2002).
- [7] Chang Yun Lee, Jin Dong Song, Jong Min Kim, Ki Soo Chang, Yong Tak Lee, Tae Whan Kim Materials Research Bulletin. 39, 135–139 (2004).
- [8] Byounggu Jo, Jaesu Kim, Kwang Jae Lee, Hyunjune Kim, Dongwoo Park, Cheul-Ro Lee, Jin Soo Kim, Sung Bum Bae, Won Seok Han, Dae Kon Oh, Jae-Young Leem, Jong Su Kim, Sang Jun Lee, Sam Kyu Noh. Thin Solid Films (2010), doi:10.1016/j.tsf.2010.03.051.
- [9] M.K. Kuo, T.R. Lin, B.T. Liao, C.H. Yu. Physica E. 26, 199–202 (2005).
- [10] T.V. Torchynska, J.L. Casas Espinola, E. Velásquez Losada, P.G. Eliseev, A. Stintz, K.J. Malloy, R. Pena Sierra. Surface Science. 532–535, 848–851 (2003).
- [11] T. V. Torchynska, M. Dybiec and S. Ostapenko. PHYSICAL REVIEW B **72**, 195341 (2005).
- [12] T. V. Torchynska, A. Stintz. JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 108, 024316 (2010).
- [13] A.Stinz. J. Vac. Sci. Technol. B 18, 1496 (2003).
- [14] T. V. Torchynska. JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 104, 1 (2008).
- [15] Y.P. Varshni Physica 34 149-154.
- [16] Fang, Z. M., K. Y. Ma, D. H. Jaw, R. M. Cohen, and G. B. Stringfellow, *J. Appl. Phys.* **67**, 11 (1990) 7034-7039.
- [17] Blakemore, J. S., *J. Appl. Phys.* **53**, 10 R123-R181. (1982)

- [18] E. A. Davis, B. D. Weaver. Applied physics letters 89, 131907 (2006).
- [19] T.V. Torchynska, J.L. Casas Espinola, L. V. Borkovska, S. Ostapenko, M. Dybiec, O. Polupan, N. O. Korsunska, A. Stintz, P. G. Eliseev, K. J. Malloy. Journal of Applied Physics. 101, 024323 (2007).
- [20] J.L. Casas Espinola, MDybic, S. Ostapenko, T. V. Torchynska, G. Polupan. Journal of Physics: Conference Series. 61, 180-184 (2007).
- [21] MSM Archive Physical properties of semiconductors
<http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>.