

Universidade Estadual de Campinas – UNICAMP

Instituto de Física Glew Wataghin – IFGW

Departamento de Física da Matéria Condensada – DFMC

Gap direto-indireto em poços quânticos de camadas
tensionadas de InGaAs/InP

Heloisa Andrade de Paula Tudury

Orientador: Prof. Dr. Fernando Iikawa

“O importante é ser você mesmo.”

Mafalda



Para Lair e Suelly.
Y, por supuesto, para Gastón.

Agradecimentos

Ao Fernando Iikawa, pela paciência e “orientação”, no melhor sentido da palavra...

Ao Brum, pela ajuda nos cálculos e pelas discussões.

Aos “pais” das nossas amostras: Wilson Carvalho Jr., Ayrton e Angelo.

À FAPESP, pelo apoio financeiro.

Aos professores Peter, Maria, Fernando Cerdeira e Eliermes, pelo incentivo.

Ao Evaldo e ao Marcelo, pela ajuda no laboratório, e ao Milton, por resolver tudo por lá.

À Lenezinha, pela ajuda sempre, pelos maravilhosos lanches de sexta-feira e pelo colo.

Aos amigos e colegas, por todas as horas que passamos juntos: Carol, Marcio, Hugo, Luis, Alexandre, Rodrigo, Edson Laureto, Javier, Celso, Michel e Edson Ribeiro.

Aos colegas do GPO que já tomaram outros rumos: Jorge, Ivan e Gustavo.

Aos outros amigos do IFGW, principalmente ao Nei e ao Fabinho, pelos cafês, sucos e bate-papos de ultimamente.

Aos do “Serviço de Apoio aos Refugiados”, por nos oferecerem generosamente suas casas e sua amizade: Antonio e Flavia, Ana Luiza, Caetano e Patricinha.

Às amigas-irmãs Ana Monteiro e Celeste, e ao Sr. Agenor e Dona Rosa (eu queria que ela estivesse aqui...).

E, claro, à minha família: Lair e Suelly, pelo seu amor, Lavínia, pela torcida e pelo fim-de-semana de “irmãzinhas combinadas” na etapa final do trabalho, e Bel, por sempre receber a “Fia” com todos os mimos.

Ao Gastón, por tudo.

Índice

<i>Introdução</i>	<i>1</i>
<i>Capítulo 1 – Teoria</i>	<i>4</i>
1.0 Introdução	4
1.1 Estrutura de bandas	4
1.2 Transições ópticas	8
1.2.1 Absorção	8
1.2.2 Emissão	10
1.3 Cálculo das transições ópticas	11
<i>Capítulo 2 – Resultados Teóricos</i>	<i>12</i>
2.0 Introdução	12
2.1 Amostras tipo-n	12
2.1.1 Tipo-n: Temperatura	16
2.1.2 Tipo-n: Intensidade de excitação.	17
2.2 Amostras tipo-p	19
2.2.1 Tipo-p: Temperatura	20
2.2.2 Tipo-p: Intensidade de excitação.	22

<i>Capítulo 3 – Experimental</i>	24
3.1 Amostras – Estrutura e Crescimento.	24
3.2 Fotoluminescência – Arranjo Experimental	25
3.2.1 Medidas utilizando célula de pressão	26
<i>Capítulo 4 – Resultados Experimentais</i>	28
4.0 Fotoluminescência	28
4.1 Fotoluminescência vs. Temperatura da amostra.	31
4.2 Fotoluminescência vs. Potência de excitação.	35
4.3 Medidas utilizando célula de pressão	39
<i>Conclusões e Perspectivas</i>	42
<i>Referências</i>	45
<i>Apêndice</i>	47

Resumo

Estudamos a transição de *gap* direto-indireto em poços quânticos de dopagem modulada de camadas tensionadas de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$. As amostras analisadas foram crescidas por LP-MOCVD. Os poços quânticos têm largura de 6 nm com concentrações de gálio entre $x = 0.47$ e 0.60 . O objetivo da dissertação foi analisar a evolução da estrutura de banda em função da concentração de Ga por medidas ópticas. Realizamos medidas de fotoluminescência com a temperatura da amostra variando entre 2 e 100 K. Observamos que a forma de linha de fotoluminescência é bastante sensível à composição de Ga na liga. Cálculos teóricos baseados no hamiltoniano de Luttinger-Kohn explicam qualitativamente esse comportamento dos espectros, mostrando que realmente há influência da estrutura de bandas nos mesmos. Nos dados experimentais também observamos efeitos de localização possivelmente provenientes da flutuação do potencial da liga, rugosidade das interfaces e defeitos criados pela presença da tensão intrínseca. Realizamos também medidas de fotoluminescência na presença de uma pressão biaxial externa, utilizando uma célula de pressão baseada na deformação de placa construída em nossos laboratórios, para verificar se o comportamento observado nos espectros de fotoluminescência em diferentes amostras é realmente devido a mudança na estrutura de banda. Os espectros de fotoluminescência medidos na presença de pressão externa mostram realmente as mesmas características - variação na forma da linha de emissão - atribuídas a mudança de *gap* direto para indireto à medida que aumenta a pressão externa, efeito equivalente àquele decorrente do aumento da concentração do Ga em diferentes amostras. Isso fortalece a nossa interpretação de que o efeito da estrutura de bandas é um dos responsáveis pelo comportamento apresentado nos espectros de fotoluminescência. Este trabalho abre a possibilidade de realizar estudos de efeitos dependentes da estrutura de bandas em poços quânticos aplicando pressão biaxial externa.

Abstract

We have studied the direct-to-indirect gap transition in strained-layer modulation-doped $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ quantum wells. The samples were grown by LP-MOCVD. The quantum well thickness is 6 nm and their Ga content was varied from $x = 0.47$ to 0.60 . Our purpose is to study the influence of Ga content variation on the band structure by optical measurements. Photoluminescence measurements were performed under temperatures varying from 2 to 100K. We have observed that the photoluminescence line shape is very sensitive to the Ga composition in the alloy. Theoretical calculations based on Luttinger-Kohn Hamiltonian explain qualitatively the behavior of the photoluminescence spectra, showing the influence of the valence band structure on them. Our experimental data also show localization effects, possibly arose from the alloy potential fluctuation, interfaces roughness and defects created due to the built-in strain. We also carried out photoluminescence measurements under an externally applied biaxial strain, using a pressure cell based on a plate bending method, in order to verify whether the behavior observed in photoluminescence spectra in different samples is due to the band structure effects. The photoluminescence spectra measured in the presence of an external strain show similar behavior to those observed when the Ga concentration is changed in different samples due to the changing the band structure from direct to indirect-gap. This result reinforces that the band-structure effect is responsible for the behavior observed in photoluminescence spectra. This work opens the possibility of further research on the band-structure dependent effects on quantum wells under externally applied biaxial strain.

Introdução

Heteroestruturas tensionadas de InGaAs/InP crescidas sobre substratos de InP são materiais apropriados para aplicações tecnológicas em dispositivos eletroópticos, utilizados em comunicações ópticas. Isto se deve ao fato de a energia do *gap* da liga estar na região de mínimo de absorção das fibras óticas comerciais ($\sim 1.55\mu\text{m}$).

O crescimento de filmes finos de semicondutores para a confecção de dispositivos ópticos e eletrônicos permaneceu, durante muito tempo, limitado a camadas com mesmo parâmetro de rede do substrato, pois assim se evitavam defeitos e deslocções na camada depositada. Novas tecnologias tornaram possível o crescimento de filmes biaxialmente tensionados – com parâmetro de rede distinto do parâmetro do substrato – sem que houvesse defeitos. A tensão biaxial tornou-se um parâmetro a mais, e modificando-a podem-se alterar as propriedades dos dispositivos, como a estrutura de bandas, por exemplo. A isso se dá o nome de *band engineering*. O material que estudamos neste trabalho é particularmente interessante porque permite uma grande variação da tensão biaxial, modificando-se a largura do poço e o conteúdo de gálio na liga de InGaAs.

A liga ternária de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ (onde x é a concentração de Ga) é uma mistura dos compostos binários GaAs e InAs. As características dessa liga e os parâmetros associados a ela – energia do *gap* e parâmetro de rede, por exemplo – estão relacionados ao conteúdo de gálio usado na composição, e têm valores intermediários entre os de GaAs e os de InAs. Apesar de ser uma mistura, a liga pode ser tratada como um *crystal virtual*, apresentando estrutura de bandas eletrônicas. O crescimento epitaxial de InGaAs é feito, em muitos casos, em substrato de InP, por ele ter o parâmetro de rede intermediário entre os compostos binários InAs e GaAs.

Quando a concentração de gálio é igual a 47% ($x=0.47$), o parâmetro de rede da liga é igual ao do InP. Para x maior (menor) do que 0.47, a liga tem o parâmetro de rede menor (maior) do que o do InP. Neste caso, a camada de InGaAs crescida sobre InP fica sob tensão biaxial se a espessura da camada for menor ou igual à espessura crítica (Matthews & Blakeslee, 1974). A quebra da simetria cristalina pela tensão elimina a degenerescência da banda de valência no centro da zona de Brillouin, levando a um deslocamento em energia da banda de buraco pesado e um deslocamento ainda maior da banda de buraco leve, como pode ser observado na Figura 1. Para a espessura acima da crítica, essa tensão relaxa, criando defeitos, e o parâmetro de rede da camada se torna diferente do do substrato.

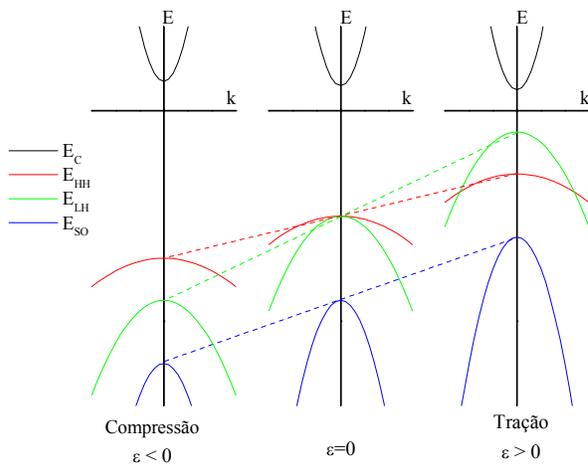


Figura 1 – Efeito da tensão biaxial sobre as sub-bandas de valência.

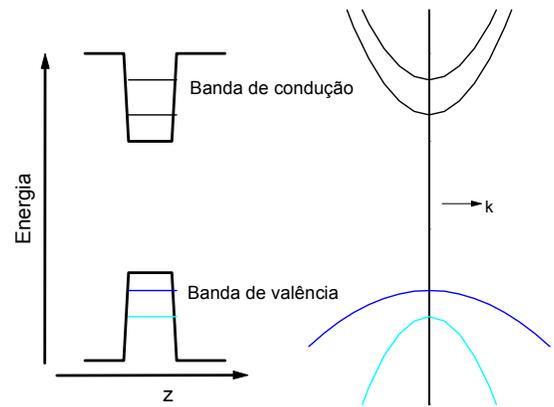


Figura 2 – Quebra da degenerescência da banda de valência decorrente do confinamento quântico.

O confinamento quântico em poços quânticos de InGaAs/InP “casados” (parâmetro de rede do poço igual ao do substrato) quebra a degenerescência no topo da banda de valência, por causa da diminuição de simetria de translação na direção de crescimento do poço. Como resultado, temos no topo da banda de valência a banda do buraco pesado, e o confinamento quântico da banda de buraco leve é maior por sua massa efetiva ser menor, como é mostrado na Figura 2.

Juntando então o confinamento quântico e a tensão decorrente da variação da concentração de Ga da liga em poços quânticos de InGaAs/InP, as sub-bandas de buraco leve e pesado se deslocam em energia, ficando mais afastadas (em caso de compressão, $x < 0.47$) ou mais próximas (em caso de tração, $x > 0.47$). Neste último caso, aumenta a mistura entre as sub-

bandas e em sob determinadas condições pode ocorrer a mudança de *gap* direto para indireto (Chao & Chuang, 1992; Sugawara, 1993; Triques & Brum, 1995).

Na literatura, existem poucos trabalhos experimentais que tratam da transição *gap* direto-indireto nestes materiais. Michler *et al* (1993) apresentam dados experimentais de luminescência resolvida no tempo. Eles mostram que o tempo de vida dos *excitons* em poços quânticos cresce à medida que aparece na estrutura de bandas o *gap* indireto, ou seja, à medida que aumenta a concentração de Ga. Não conhecemos nenhum outro trabalho experimental, na literatura, que trate deste assunto e que mostre a formação do *gap* indireto nesses materiais

Neste trabalho, investigamos a transição *gap* direto-indireto em poços quânticos de InGaAs/InP de dopagem modulada tipo-n e tipo-p variando a concentração de Ga na liga de InGaAs de 0.47 a 0.60. Fizemos um estudo sistemático, teórico e experimental, analisando a evolução da estrutura de banda de valência com a concentração de Ga. Para isso, utilizamos a técnica de espectroscopia de fotoluminescência. A diferença de nosso trabalho para o de Michler *et al* (1993) é que as nossas amostras são dopadas e apresentam um gás bidimensional, de elétrons ou buracos, que inibe a interação Coulombiana para formar *excitons*.

Uma contribuição importante deste trabalho, nesse conjunto de amostras, foi a identificação da estrutura de *gap* direto ou indireto através da forma da linha de luminescência. Os cálculos teóricos confirmam a dependência da forma da linha com a estrutura de banda. Para reforçar a nossa interpretação foram realizadas também medidas de fotoluminescência aplicando-se pressão biaxial externa a essas amostras. Os resultados dessas medidas confirmam também a mudança da estrutura de *gap* direto para indireto. A vantagem da aplicação da pressão externa é que em uma mesma amostra podemos estudar a variação na estrutura de banda sem mudar a qualidade da amostra.

A dissertação foi dividida em 4 capítulos. O capítulo 1 contém o embasamento teórico do sistema estudado e do cálculo da emissão óptica e no capítulo 2, mostramos os resultados obtidos com o cálculo. O terceiro capítulo contém a descrição da montagem experimental e das estruturas das amostras. O capítulo 4 traz os resultados experimentais e discussões, incluindo a comparação com o que foi mostrado no capítulo 2. Em seguida, apresentamos as conclusões, e, no apêndice, os artigos publicados sobre partes do trabalho descrito nesta dissertação: um nos *Proceedings* do *25th ICPS* e outro em setembro de 2001 na *Physical Review B*.

Capítulo 1 – Teoria

1.0 Introdução

Neste capítulo, concentramos a descrição detalhada do tratamento teórico utilizado para fazer o cálculo numérico da emissão óptica e da estrutura de bandas.

1.1 Estrutura de bandas

Heteroestruturas constituídas por camadas de InGaAs sobre InP podem ser crescidas de tal forma que a estrutura tenha tração ou compressão biaxial intrínseca, dependendo da diferença entre os parâmetros de rede da liga e do InP, esta imposta pela variação do conteúdo de Ga na liga ternária. Por isso, em poços quânticos, em particular, além da variação da energia do *gap* devido ao efeito de confinamento quântico, há também deslocamento das sub-bandas de energia de buraco leve e buraco pesado, que se aproximam ou afastam em função de a tensão produzida pela diferença entre as constantes de rede ser tensiva ou compressiva, respectivamente.

Para entender como a tensão biaxial modifica a estrutura de bandas do material a ser estudado, utilizamos as teorias de Luttinger-Kohn e Bir-Pikus (Chao & Chuang, 1992) no formalismo da aproximação de função envelope. A estrutura das bandas de valência de um semiconductor pode ser descrita por um hamiltoniano 6x6, que inclui o acoplamento entre as bandas de buraco pesado (HH, $|3/2, \pm 3/2\rangle$), buraco leve (LH, $|3/2, \pm 1/2\rangle$) e a banda separada devido à interação spin-órbita, *split-off* (SO, $|1/2, \pm 1/2\rangle$), ou seja, três bandas degeneradas por spin. As sub-bandas de *split-off*, freqüentemente negligenciadas, têm participação significativa no

cálculo dos níveis de energia superiores e das massas efetivas quando se tratam de materiais fortemente tensionados.

Esse hamiltoniano pode ser escrito como uma matriz na forma

$$H = - \begin{bmatrix} P+Q & -S & R & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & \sqrt{2}R \\ -S^\dagger & P-Q & 0 & R & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^\dagger & 0 & P-Q & S & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q \\ 0 & R^\dagger & S^\dagger & P+Q & -\sqrt{2}R^\dagger & -\frac{1}{\sqrt{2}}S^\dagger \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}S^\dagger & -\sqrt{2}Q & \sqrt{\frac{3}{2}}S & -\sqrt{2}R & P+\Delta & 0 \\ \sqrt{2}R^\dagger & \sqrt{\frac{3}{2}}S^\dagger & \sqrt{2}Q & -\frac{1}{\sqrt{2}}S & 0 & P+\Delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \end{bmatrix}, \quad (1)$$

onde

$$P = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_1 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - a_v (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2)$$

$$Q = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \gamma_2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) - \frac{b}{2} (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (3)$$

$$R = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) \sqrt{3} [-\gamma_2 (k_x^2 - k_y^2) + 2i\gamma_3 k_x k_y] + \frac{\sqrt{3}}{2} b (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy} \quad (4)$$

$$S = \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right) 2\sqrt{3}\gamma_3 (k_x - ik_y)k_z - d(\varepsilon_{zx} - i\varepsilon_{yz}) \quad (5)$$

Nessas equações, k é o vetor de onda, γ_1 , γ_2 e γ_3 são os parâmetros de Luttinger, a_v , b e d são os potenciais de deformação de Bir-Pikus, Δ é a energia de *split-off* e ε_{ij} é o tensor simétrico de deformação (Yu & Cardona, 1996). A base $|j, m\rangle$ denota a função de onda de Bloch no centro da zona de Brillouin, e foi escolhida de modo a fazer o hamiltoniano da interação spin-órbita diagonal. Ela pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |(x+iy)\uparrow\rangle, \\
 \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} |-(x+iy)\downarrow + 2z\uparrow\rangle, \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} |(x-iy)\uparrow + 2z\downarrow\rangle, \\
 \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |(x-iy)\downarrow\rangle, \\
 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |(x+iy)\downarrow + z\uparrow\rangle, \\
 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |(x-iy)\uparrow - z\downarrow\rangle
 \end{aligned} \tag{6}$$

No caso especial de deformação biaxial, os elementos do tensor de deformação são:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{xx} &= \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz} \\
 \varepsilon_{xy} &= \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} = 0,
 \end{aligned} \tag{7}$$

o que torna nulos os termos relativos à deformação em S e R (Eq. 4 e 5).

A tensão biaxial pode ser proveniente de dois fatores: tensão intrínseca, como já foi explicado, devido ao descasamento entre os parâmetros de rede do InGaAs e do InP, ou tensão externa.

Os tensores de tensão (σ) e de deformação (ε) em cristais com simetria cúbica estão relacionados pela matriz

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \\ \varepsilon_{xy} \end{bmatrix} \tag{8}$$

onde C_{ij} são as constantes elásticas. No nosso caso, a tensão é biaxial, portanto

$$\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma, \quad \text{e os outros componentes} \quad \sigma_{ij} = 0. \tag{9}$$

Assim, temos que os componentes não-nulos da deformação são

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{C_{11}}{C_{11} - C_{12}(C_{11} + 2C_{12})} \sigma \tag{10}$$

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}}\varepsilon_{xx}, \quad (11)$$

se a tensão é aplicada externamente. No caso de tensão intrínseca, o componente da deformação paralelo ao plano da tensão é igual a

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a}{a}, \quad (12)$$

onde a_0 é a constante de rede do substrato de InP e a do InGaAs.

A estrutura da banda de valência do semiconductor *bulk* em função da tensão ou deformação é determinada pela equação

$$|H_{ij}(k) - \delta_{ij}E| = 0. \quad (13)$$

Para calcular a estrutura de banda de um poço basta introduzir na equação o potencial de confinamento na direção do eixo-z. As estruturas de bandas de poços quânticos de InGaAs/InP, que serão apresentadas aqui, foram calculadas numericamente através de um programa feito pelo Prof. J.A. Brum. Foi utilizada a linguagem Fortran, e os parâmetros utilizados estão na Tabela 1.

Parâmetros	GaAs	InAs	InP
$a(\text{Å})$	5.6533	6.0584	5.8688
$E_g(\text{eV})$	1.424	.36	1.344
γ_1	6.85	20.4	4.95
γ_2	2.1	8.3	1.65
γ_3	2.9	9.1	2.35
C_{11}	11.879	8.329	10.11
C_{12}	5.376	4.526	5.61
$a_c - a_v$	-9.77	-6.0	-8.6
B	-1.7	-1.8	-2.0
m_e/m_0	0.067	0.027	0.077

*Tabela 1 -
Parâmetros
utilizados no cálculo.*

1.2 Transições ópticas

A partir das estruturas de bandas calculadas com o hamiltoniano de Luttinger-Kohn é possível calcular os espectros das transições ópticas na aproximação de elétrons independentes. Inicialmente apresentamos o cálculo do espectro de absorção, mais simples, e depois o de emissão.

1.2.1 Absorção

O espectro de absorção de uma onda eletromagnética com frequência angular ω em semicondutores é dado por (Bastard, 1992):

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{ncm_o\omega\Omega} \sum_{i,f} \frac{1}{m_o} |\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{if}|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega) \quad (14)$$

onde $\vec{p}_{if} = \langle i | \vec{p} | f \rangle$ é o elemento de matriz de transição óptica e ε_i e ε_f são a energia das bandas em função de \vec{k} , e , n , c , m_o , Ω e $\vec{\varepsilon}$, onde e é a carga eletrônica, n o índice de refração, c é a velocidade da luz, m_o é a massa do elétron, Ω é o volume da célula unitária e $\vec{\varepsilon}$ é a polarização do campo elétrico da onda incidente.

As funções de onda do estado inicial (final) i (f) podem ser descritas da forma:

$$F_{i(f)}(\vec{r}) = u_{v_i(f)}(\vec{r}) f_{v_i(f)}(\vec{r}), \quad (15)$$

sendo que

$$f_{v_i(f)}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{S}} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \chi_{v_i(f)}(z) \quad (16)$$

e $u_{v_i(f)}(\vec{r})$ é a parte periódica da função de Bloch no centro da zona de Brillouin (assumida como sendo a mesma nas camadas de InGaAs e InP, dentro do modelo de aproximação de função envelope [Bastard, 1992]) para a banda $v_i(f)$ (v_f é o índice da banda de elétrons e v_i das sub-bandas de buraco pesado, buraco leve e *split-off*). $\chi_{v_i(f)}(z)$ é a função envelope que descreve o movimento em z do buraco (elétron) na sub-banda $i(f)$ correspondente ao extremo $v_i(f)$, \vec{k} e \vec{r} são vetores bidimensionais de onda e de posição respectivamente. Para estas funções de onda os elementos de matriz de transição interbandas podem ser escritos como:

$$\vec{\varepsilon} \cdot \vec{p}_{if} = \vec{\varepsilon} \cdot \langle F_i | \vec{p} | F_f \rangle \cong \vec{\varepsilon} \cdot \langle u_{v_i} | \vec{p} | u_{v_f} \rangle \langle f_i | f_f \rangle, \quad (17)$$

onde foram consideradas as variações rápidas das funções u_i e u_f no espaço característico de variação da função envelope. Serão tratadas aqui somente as transições interbandas. Vamos nos limitar a estudar as transições entre as sub-bandas de valência e a banda de condução.

Substituindo os termos na expressão de coeficiente de absorção temos, para transições entre as bandas c (de condução – para evitar confusões com a velocidade da luz, essa letra indicará apenas o índice da banda de condução daqui para a frente) e m (de valência):

$$\alpha_{cm}(\omega) = \mathbf{B} \sum_k \sum_v |a_{vmk} \langle \chi_c | \chi_{mv} \rangle \langle u_c | \varepsilon \cdot \bar{p}_{if} | u_m \rangle|^2 \delta(\varepsilon_c - \varepsilon_m - \hbar\omega), \quad (18)$$

onde a_{vmk} são os coeficientes que definem a mistura das sub-bandas de valência e B é uma constante que multiplica a somatória na Eq. 14.

Para a dispersão dos elétrons na banda c foi utilizada uma função parabólica da forma

$$\varepsilon_c = \varepsilon_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \quad (19)$$

onde m_c é a massa efetiva do elétron; para os buracos na sub-banda m , a dispersão foi ajustada por um polinômio de ordem $N=10$, com os dados obtidos através do cálculo numérico de banda de valência descrito no item anterior, para facilitar o cálculo:

$$\varepsilon_m = \sum_{i=1}^N \alpha_i k^{2i} \quad (20)$$

As integrais de superposição entre as funções envelope e os coeficientes a_{vmk} são obtidos também através do programa que calcula a dispersão de energia da banda de valência.

A ocupação das bandas de valência e de condução foi considerada como sendo a função de Fermi Dirac, usando o número de portadores provenientes da dopagem. Temos então, para a banda de condução:

$$f(\varepsilon_c) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{\varepsilon_c - \varepsilon_f}{k_B T}\right]}, \quad (21)$$

onde

$$\varepsilon_f = k_B T_e \ln \left[-1 + \exp\left(\frac{\pi \hbar^2 n_c}{k_B T_e m_c}\right) \right] \quad (22)$$

é a *quase-energia* de Fermi na banda de condução, T_e é a temperatura dos elétrons e k_B a constante de Boltzmann. A densidade n_c de portadores na banda de condução é proveniente da dopagem.

Dessa forma, a absorção em amostras tipo-n é dada por

$$\alpha_{cm}(\hbar\omega) = \sum_k S(k) \frac{\delta(k - k_0)}{|\nabla_k (\varepsilon_c(k) - \varepsilon_m(k) - \hbar\omega)|_{k=k_0}} [1 - f(\varepsilon_c)] \quad (23)$$

onde

$$S(k) = C \sum_{\nu} \left| a_{\nu mk} \langle \chi_n | \chi_{m\nu} \rangle \langle u_n | \varepsilon \cdot \bar{p}_{if} | u_m \rangle \right|^2 \quad (24)$$

1.2.2 Emissão

Para o cálculo da emissão óptica, utilizamos a mesma probabilidade de transição da absorção e foram incluídas as ocupações, tanto da banda de condução quanto da banda de valência, considerando os quase-potenciais químicos como dependentes dos portadores fotocriados, além daqueles provenientes da dopagem. Para a banda de condução, temos:

$$\varepsilon_f = k_B T_e \ln \left[-1 + \exp \left(\frac{\pi \hbar^2 (n_D + n_f)}{k_B T_e m_c} \right) \right], \quad (25)$$

onde n_D é a densidade de elétrons proveniente da dopagem, e n_f da fotoexcitação. Para as amostras tipo-p, o elemento n_D da equação 25 é zero.

A ocupação da banda de valência por buracos também é uma distribuição de Fermi-Dirac,

$$f(\varepsilon_m) = \frac{1}{1 + \exp \left[\frac{\mu - \varepsilon_m}{k_B T} \right]}, \quad (26)$$

onde o quase potencial químico do buraco, μ , é calculado por integração numérica, fazendo com que

$$\int 2 \pi f(\varepsilon_m(k)) k dk = \int \frac{2 \pi k dk}{1 + \exp \left[\frac{\mu - \varepsilon_m(k)}{k_B T} \right]} = n \quad (27)$$

onde n é a densidade total de buracos, que é $n_D + n_f$, onde n_D é a densidade de buracos proveniente da dopagem e n_f da fotoexcitação. Para amostras tipo-n, esse n_D é zero. Consideramos aqui que a dispersão de energia é independente da direção de k . Esta é uma boa aproximação se k está próximo do centro da zona de Brillouin.

A expressão final para a luminescência fica sendo então:

$$\odot_{cm}(\hbar\omega) = \sum_k S(k) \frac{\delta(k - k_0)}{|\nabla_k (\varepsilon_c(k) - \varepsilon_m(k) - \hbar\omega)|_{k=k_0}} f(\varepsilon_m) f(\varepsilon_c) \quad (28)$$

1.3 Cálculo das transições ópticas

O cálculo da absorção e da emissão óptica também foi feito através de um programa em linguagem Fortran. Esse programa leva em consideração, como arquivos de entrada, os valores da dispersão de energia em função do vetor de onda, as integrais de superposição entre as funções de onda na banda de condução e na primeira sub-banda de valência e os coeficientes a_{vmk} . A dispersão de energia das bandas de valência, como já foi dito, foi aproximada por um polinômio par, para facilitar a derivação da função durante o cálculo.

A temperatura foi considerada igual para todos os portadores (termalização rápida). Em geral, utilizamos 10 K como sendo a temperatura dos portadores.

Para evitar a variação abrupta do espectro no limiar de absorção, foi utilizada uma função gaussiana para suavizar os espectros de luminescência e absorção, da seguinte forma:

$$\alpha_{cm}(\hbar\omega_n) = \sum_{\text{todos os } \omega_i} \frac{\exp\left[-\frac{(\omega_n - \omega_i)^2}{2\sigma^2}\right]}{\sigma\sqrt{2\pi}} \alpha_{cm}(\hbar\omega_i) \quad (29)$$

$$L_{cm}(\hbar\omega_n) = \sum_{\text{todos os } \omega_i} \frac{\exp\left[-\frac{(\omega_n - \omega_i)^2}{2\sigma^2}\right]}{\sigma\sqrt{2\pi}} L_{cm}(\hbar\omega_i) \quad (30)$$

Utilizou-se uma largura $\sigma = 1.5$ meV para todos os espectros.

A população de portadores de dopagem foi considerada como sendo $n_D = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, que é o valor nominal das amostras tipo-n ou p. Os portadores fotocriados estão na faixa de $n_f = 10^9$ a 10^{11} cm^{-2} . As unidades utilizadas foram coerentes com o programa anterior, onde as energias são denotadas em meV e os comprimentos em Å.

Capítulo 2 – Resultados Teóricos

2.0 Introdução

Neste item, são apresentados os resultados dos cálculos de emissão óptica baseados no modelo descrito anteriormente. As discussões sobre a comparação dos resultados teóricos com os dados experimentais serão feitas no Capítulo 4. Os cálculos foram feitos para poços quânticos com dopagem modulada tipo-n e p, cuja concentração de portadores provenientes da dopagem modulada é da ordem de $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Para essa concentração o efeito excitônico é desprezível (Kleinman, 1985), e por isso não é levado em conta. Apesar de haver gás de portadores livres, não calculamos o potencial autoconsistente. Como estamos interessados na análise qualitativa, o cálculo autoconsistente não iria alterar significativamente as conclusões. O cálculo mostrou que a forma da linha dos espectros teóricos de emissão é bastante sensível à forma da dispersão da banda de valência, com resultados distintos entre estruturas com *gap* direto e indireto. Isso pode ser utilizado para a detecção experimental para distinguir as estruturas de banda de *gap* direto e indireto.

2.1 Amostras tipo-n

As dispersões de energia dos buracos em poços quânticos de InGaAs/InP com largura do poço de 60 Å para diferentes concentrações de Ga são mostradas na Figura 1. As concentrações de Ga utilizadas no cálculo são iguais aos valores nominais das nossas amostras, ou seja, 0.47, 0.51, 0.54, 0.57 e 0.60. A transição do *gap* direto para indireto em poços de 60 Å ocorre para $x_{\text{Ga}} = 0.55$ – acima desse valor, a estrutura de banda é indireta e o máximo de energia da banda de

valência está em $k_M \sim 0.038 \text{ \AA}^{-1}$, o que corresponde a aproximadamente 7% do limite da zona. A separação de energia entre o ponto máximo e o centro da zona, $E_{(k=k_M)} - E_{(k=0)}$, chega a ser de 10 meV, para $x_{\text{Ga}} = 0.60$. A Figura 1 mostra claramente a evolução da estrutura de bandas de *gap* direto para *gap* indireto.

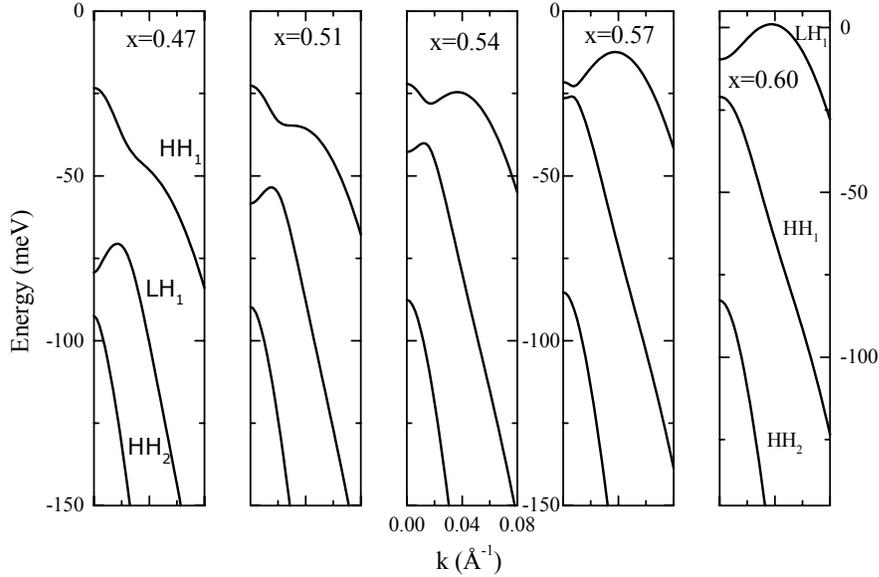


Figura 1 – Dispersão de energia da banda de valência de um poço quântico de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ com largura de 60 Å e diferente composição de Ga..

Os espectros de emissão calculados para amostras tipo-n, à temperatura do cristal de 10 K e com diferentes concentrações de Ga no poço, são mostrados na Figura 2. A densidade de portadores provenientes da dopagem é $n_d = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, e a de portadores fotocriados, $n_f = 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$. O valor de n_d foi obtido a partir da diferença de energia de limiar de transição dos espectros de eletrorefletância (não apresentado na dissertação) e fotoluminescência e n_f foi estimado a partir da intensidade do laser incidente na amostra. Os valores dos outros parâmetros dos materiais utilizados no cálculo são apresentados na Tabela 1 do Capítulo 1. As medidas experimentais foram realizadas à temperatura de 2 K, mas utilizamos para o cálculo $T = 10 \text{ K}$ para evitar divergências no cálculo numérico. Como $k_B T \ll [E_{(k=k_M)} - E_{(k=0)}]$ para o valor de x_{Ga} utilizado no cálculo, e também $k_B T \ll E_F$, a forma da linha não varia significativamente entre $T = 2$ e 10 K.

Na Figura 2, podemos observar que a posição dos picos dos espectros teóricos aumenta em energia à medida que aumenta a concentração de Ga. Isso se deve ao fato de que a energia do *gap* da liga de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ aumenta em função de x_{Ga} . A tração biaxial age no sentido oposto, mas este efeito é menor do que a variação da energia do *gap* da liga. A influência da tração

biaxial é significativa na separação entre as sub-bandas do buraco pesado e leve e, conseqüentemente, na mistura das bandas. Notamos que a mudança na banda de valência se reflete na forma da linha dos espectros teóricos. A forma da linha é assimétrica em todos os espectros e a cauda muda de lado com relação ao pico quando a concentração de Ga varia de 0.47 a 0.60.

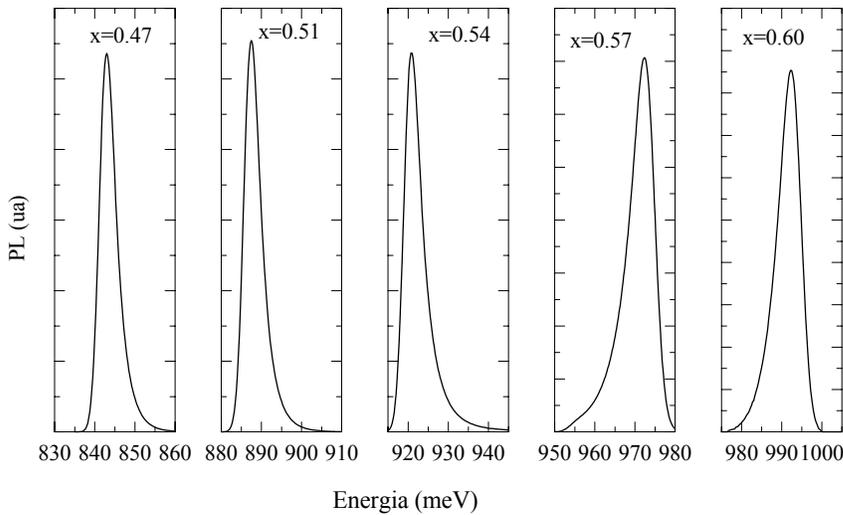


Figura 2 – Espectros calculados de fotoluminescência normalizados para $T = 10 K$ em amostras tipo-n.

Nas amostras com conteúdo de Ga menor, $x = 0.47, 0.51$ e 0.54 , a assimetria apresenta-se na forma de uma cauda para energias mais altas (vide Figura 2). Para as outras amostras, cujo conteúdo de Ga é maior, ou seja, as de *gap* indireto, a cauda se “inverte”, indo para uma região de energias menores em relação ao pico principal de emissão.

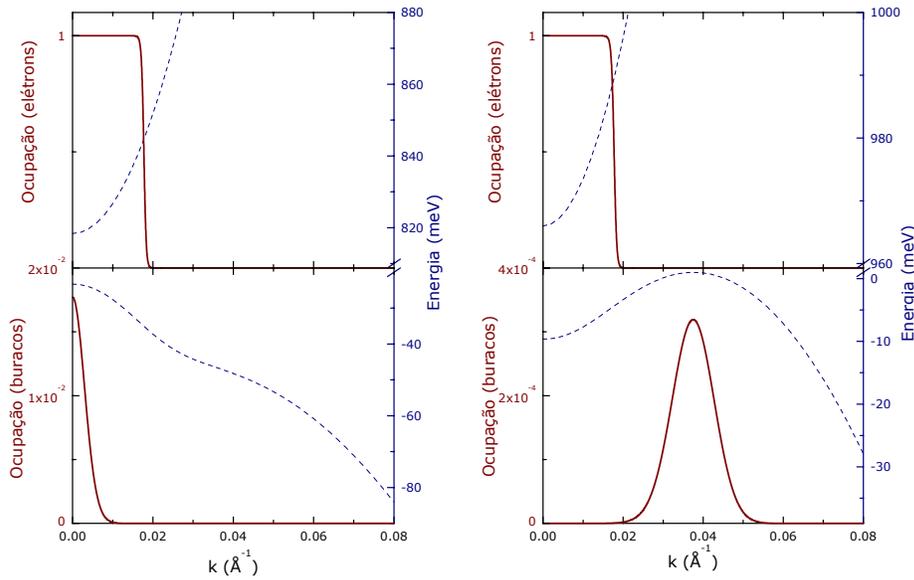


Figura 3 – As linhas sólidas (eixo à esquerda) são distribuições de elétrons (quadro superior) e de buracos (inferior) calculadas para amostras tipo-n, a 10 K. As linhas tracejadas (eixo à direita) são as dispersões de energia da banda de condução e da banda de valência, respectivamente, para $x = 0.47$ e 0.60 .

Para explicar esse comportamento, podemos recorrer aos gráficos de distribuição de portadores em função do vetor de onda k , e compará-los com a dispersão de energia, tal como na Figura 3. Nesses gráficos, cujo eixo esquerdo se refere à ocupação dos portadores e o eixo direito à dispersão de energia, podemos ver a diferença entre as dispersões dos buracos para *gap* direto e *gap* indireto. Para *gap* direto, vemos que a transição se dá em torno de $k = 0$. Isto acontece porque os buracos fotocriados estão concentrados no topo da banda de valência, em $k = 0$, e diminuem seguindo a distribuição de ocupação de Fermi. Isso faz com que a transição principal seja em $k = 0$ e vá diminuindo de intensidade para k maiores, refletindo no espectro sob a forma de uma cauda. Quando se trata de *gap* indireto, os buracos fotocriados também se acumulam no topo da banda de valência, que desta vez está em $k = k_M \neq 0$. A transição “vertical” em k (conservação k em transições ópticas) pode ocorrer em k variando de 0 a k_F (vetor de onda de Fermi do elétron) acompanhando a distribuição de ocupação de burac

2.1.1 Tipo-n: Temperatura

A variação da temperatura na amostra, no nosso modelo simples, afeta somente a distribuição da ocupação de portadores em suas respectivas bandas. Não incluímos no cálculo a variação da energia do *gap* com a temperatura, pois estamos interessados somente na análise qualitativa. A densidade de portadores provenientes da dopagem modulada é bem maior do que a densidade de portadores fotocriados, portanto, estes últimos termalizam rapidamente com os já existentes. Por isso, consideramos que todos os portadores estão termalizados com o cristal.

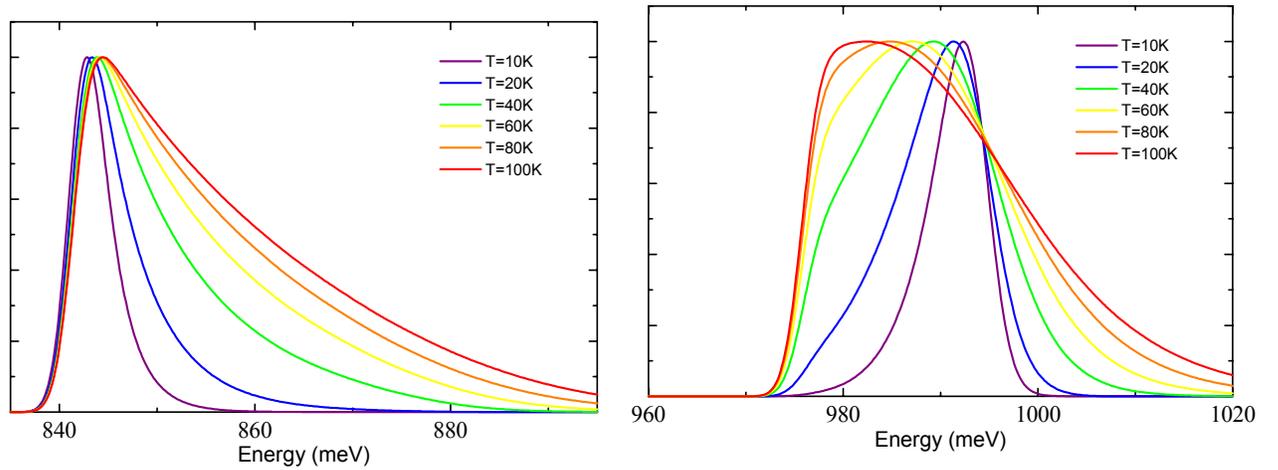


Figura 4 – Espectros de fotoluminescência conforme se varia a temperatura. À esquerda: $x = 0.47$. À direita: $x = 0.60$. Temperaturas utilizadas: 10, 20, 40, 60, 80 e 100 K.

Quando utilizada uma densidade de portadores fotocriados fixa de $n_f = 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$, o aumento da temperatura causa um alargamento da linha de fotoluminescência, aumentando a intensidade da cauda tanto para a estrutura direta quanto para a indireta, veja a Figura 4. Apresentamos aqui somente os gráficos para $x = 0.47$ (*gap* direto) e $x = 0.60$ (*gap* indireto), pois estes são mais representativos e mostram as diferenças de comportamento dos espectros para *gap* direto e indireto. No caso de estruturas de *gap* direto, $x = 0.47$, o aumento da distribuição da ocupação de buracos fotocriados para k 's maiores aumenta a intensidade da cauda na região de maior energia e há um pequeno deslocamento na energia do pico ($\sim k_B T$) que é característico da transição banda-a-banda. Nas estruturas de *gap* indireto, o alargamento para a região de menor energia - por causa do aumento da ocupação de buracos para $k < k_F$ - é acompanhado também de mudança na forma da linha.

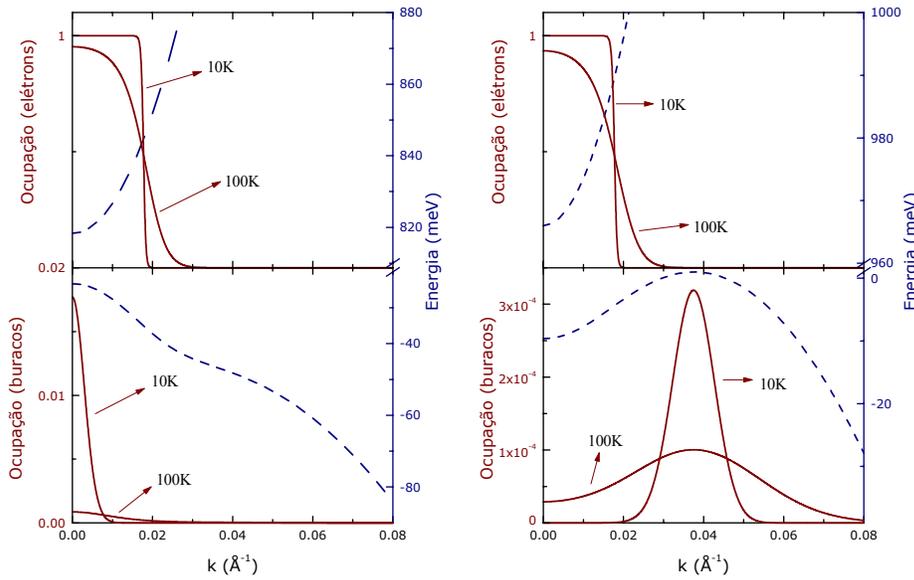


Figura 5 – Distribuições de elétrons e de buracos calculadas para amostras tipo-n, a 10 K e 100 K. As dispersões de energia da banda de condução e da banda de valência, respectivamente, para $x = 0.47$ e 0.60 , aparecem como linhas tracejadas.

Essa mudança é devida à distribuição da ocupação da banda de valência por buracos de $k = k_F$ até $k = 0$, veja a Figura 5b. A altas temperaturas essa distribuição varia suavemente com k e a forma da linha de emissão começa a seguir a distribuição de elétrons na banda de condução. Para maior clareza, pode ser vista na Figura 5 a comparação entre a ocupação das bandas a $T = 10$ K e a mesma a $T = 100$ K, para $x_{Ga} = 0.47$ e $x_{Ga} = 0.60$. Um comportamento interessante é o deslocamento do pico para baixa energia quando a temperatura aumenta. Isso mostra que o ponto máximo da superposição da distribuição da densidade de ocupação nas duas bandas, satisfazendo a conservação de k , desloca para k menores na região de temperatura calculada.

2.1.2 Tipo-n: Intensidade de excitação.

A mudança na intensidade de excitação (potência do laser na experiência) também causa variação na ocupação de estados, como no caso da temperatura. A diferença é que o aumento da densidade de portadores fotoexcitados aumenta significativamente o quase-potencial químico de cada banda. Um aumento na densidade de portadores fotocriados, no caso de amostras tipo-n, tem conseqüências distintas para as amostras de *gap* direto e de *gap* indireto. No cálculo utilizamos também a densidade de portadores fotocriados até da mesma ordem de grandeza da densidade de elétrons já existentes. Isso causaria a mudança na temperatura efetiva dos portadores, porém para facilitar o cálculo consideramos a temperatura dos portadores termalizada com o cristal. Essa densidade também depende do tempo de recombinação, isso significa que ela depende se a estrutura de banda é direta ou indireta. Experimentalmente esperamos obter mais portadores

fotocriados nas amostras de *gap* indireto do que em *gap* direto, mas no cálculo utilizamos o mesmo intervalo de valores da densidade de portadores para todas as amostras.

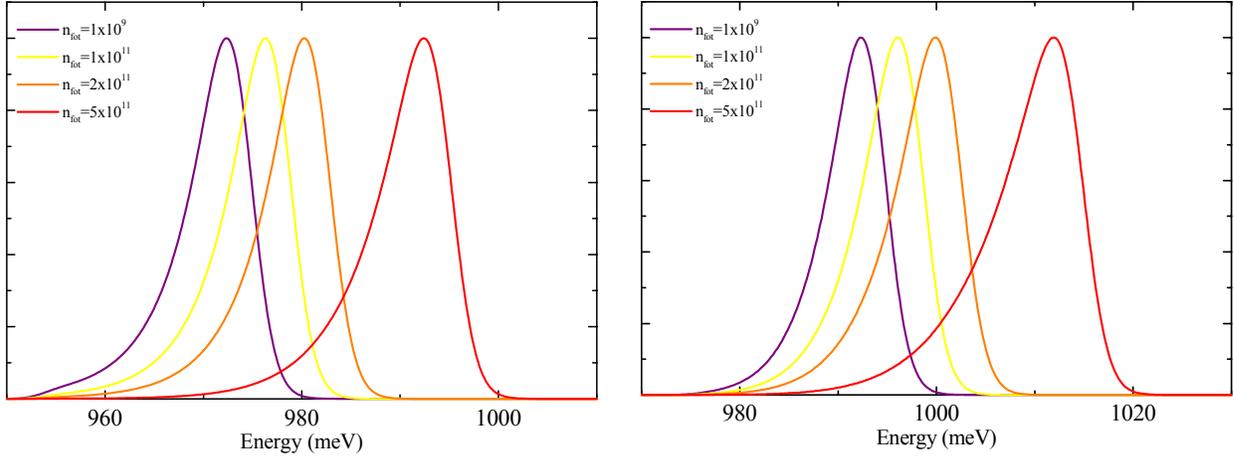


Figura 6 - Espectros de fotoluminescência normalizados em função da intensidade de excitação. À esquerda: $x = 0.57$. À direita: $x = 0.60$. Densidades de portadores fotocriados utilizadas: $n_f = 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$, $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Para as estruturas de *gap* direto, $x = 0.47$, 0.51 e 0.54 , exceto o aumento na intensidade por causa do aumento na densidade de portadores, a variação na forma da linha de emissão é muito pequena. As variações da largura de linha e da posição do pico são menores do que 2 meV no intervalo da intensidade de excitação utilizada. Como o pico de emissão fica em torno do *gap*, e para a aproximação de partículas independentes a energia do *gap* não muda, a posição do pico deve se manter praticamente constante com o aumento da densidade de portadores. O comportamento dos espectros não se altera significativamente com a intensidade de excitação, portanto não apresentaremos os gráficos.

Para estruturas de *gap* indireto, $x = 0.57$ e 0.60 , a posição do pico desloca-se consideravelmente para o azul quando a densidade de portadores fotocriados é superior a $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. A largura de linha também aumenta. Os espectros calculados são mostrados na Figura 6 para ambos os valores de x . Quando a densidade de portadores fotocriados é da mesma ordem de grandeza da concentração de elétrons de dopagem o deslocamento chega a ser maior que 20 meV . Esse deslocamento é devido ao aumento do nível de Fermi do elétron com o aumento da população de portadores (vide Figura 7), pois na estrutura de *gap* indireto em amostras tipo-n o pico de emissão fica em torno do nível de Fermi do elétron, como foi discutido anteriormente. Como na banda de condução a função distribuição de elétrons é praticamente 1

desde $k = 0$ até k_F , a intensidade do pico de luminescência dependerá somente da distribuição de ocupação dos buracos, que diminui para k variando de k_M a 0. Portanto, se $k_F < k_M$, o aumento da intensidade do pico com a densidade de portadores fotoexcitados acompanha a função distribuição de buracos.

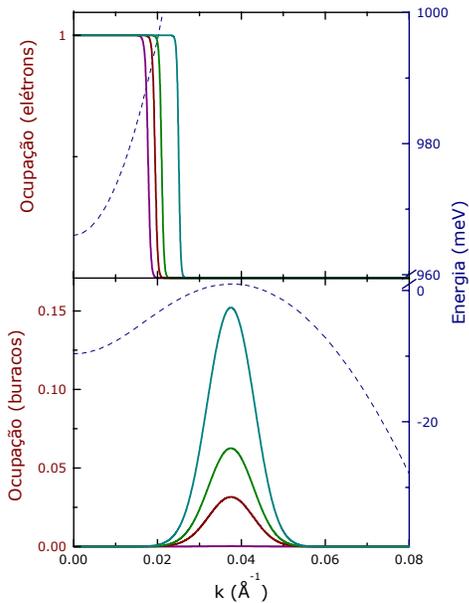


Figura 7 – Distribuições de elétrons e de buracos calculadas para amostras tipo-n, $x = 0.60$, para densidades $n_f = 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$, $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Notar como o aumento do nível de Fermi modifica o vetor de onda máximo para transição. A distribuição de buracos aumenta com a densidade de portadores, por isso as distribuições para $n_f = 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$ e $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ não aparecem nessa escala.

2.2 Amostras tipo-p

Os espectros de emissão para amostras tipo-p foram calculados com os mesmos parâmetros utilizados no cálculo tipo-n e também com as mesmas dispersões de energia. Neste cálculo também não incluímos o potencial autoconsistente. Os espectros têm características bastante diferentes, como pode ser visto na Figura 8, se comparados com aqueles obtidos para o tipo-n. A largura de linha dos espectros tipo-p, da ordem de 4 meV, é menor que as larguras dos espectros correspondentes tipo-n, que são da ordem de 5 a 7 meV. Isso ocorre porque a distribuição de elétrons fotocriados em estruturas tipo-p está bem mais concentrada em torno de $k = 0$, ao contrário da distribuição dos buracos fotocriados nas estruturas tipo-n. Nas amostras tipo-p a assimetria na forma da linha de emissão não fica tão evidente como nas estruturas tipo-n. Nas estruturas de *gap* direto, os elétrons fotocriados se concentram na região de $k = 0$ e a sua função distribuição diminui abruptamente à medida que aumenta o vetor de onda, e isso faz com que a cauda seja mais abrupta.

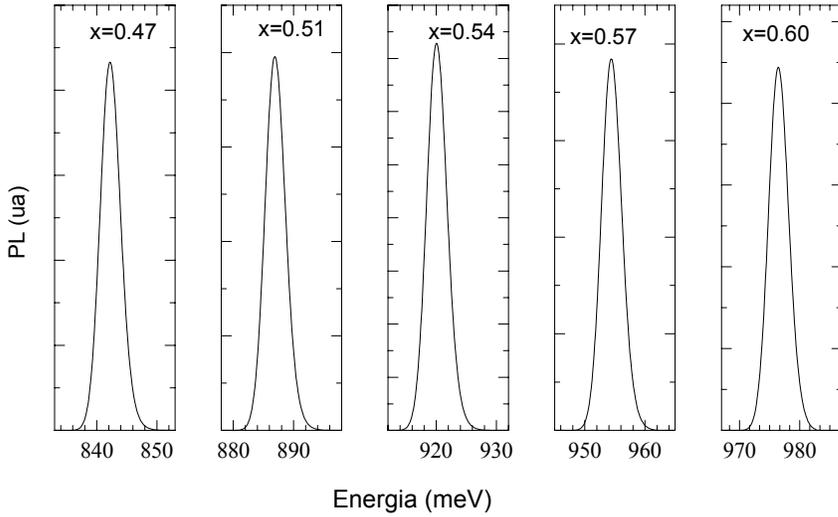


Figura 8 – Espectros calculados de fotoluminescência normalizados para amostras tipo-p e $T = 10$ K.

Como pode ser visto na Figura 9, para as amostras de *gap* indireto, a superposição de distribuição de portadores é bem menor, por isso a intensidade de emissão também reduz consideravelmente comparada com a de *gap* direto. O pico, neste caso, fica em torno de $k = 0$, e não em torno de k_F como nos espectros tipo-n.

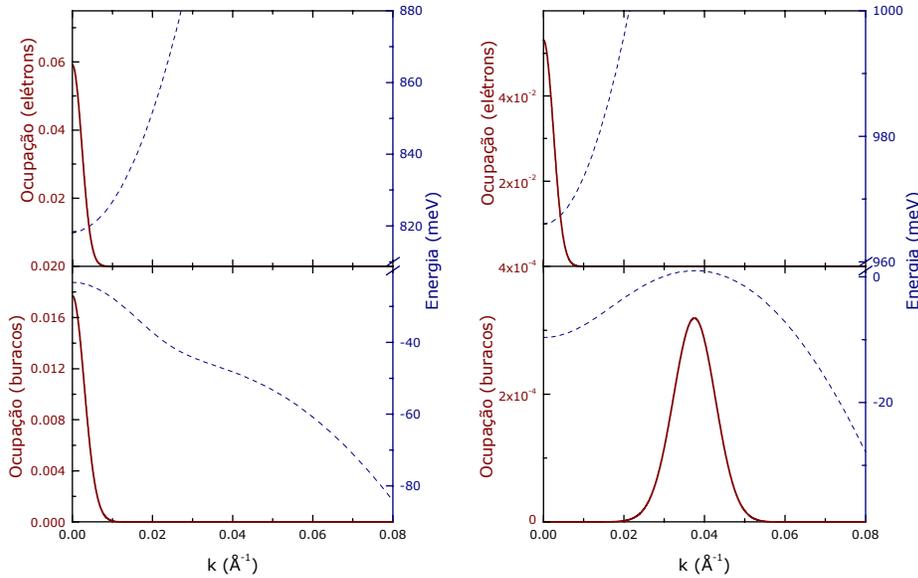


Figura 9 – Linhas sólidas (eixo à esquerda) são distribuições de elétrons (quadro superior) e buracos (inferior) calculadas para amostras tipo-p. Linhas tracejadas (eixo à direita) são dispersões de energia da banda de condução e da banda de valência, respectivamente, com $x = 0.47$ e 0.60 .

2.2.1 Tipo-p: Temperatura

A variação da temperatura para o cálculo tipo-p, ao contrário do tipo-n, não causa diferenças de comportamento entre amostras com diferentes conteúdos de gálio. Isto ocorre

porque há concentração de elétrons em torno de $k = 0$ e pouca superposição entre as distribuições de elétrons e buracos.

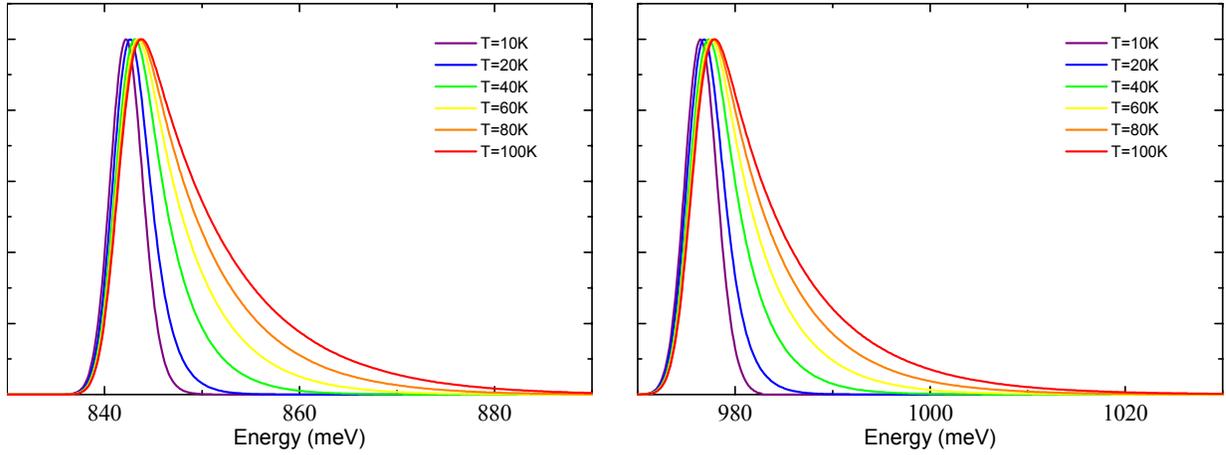


Figura 10 – Espectros de fotoluminescência normalizados em função da temperatura da amostra. À esquerda: $x = 0.47$. À direita: $x = 0.60$. Temperaturas utilizadas: 10, 20, 40, 60, 80 e 100 K.

Diferentemente do que acontece nas amostras tipo-n, não há mudança significativa na forma de linha para $x = 0.60$, havendo apenas um alargamento para energias mais altas à medida que o aumento de temperatura causa o afastamento dos portadores para k s maiores. Tanto o alargamento das linhas quanto as posições dos picos têm um aumento em energia em torno de 2 meV, compatíveis com os valores de $k_B T$.

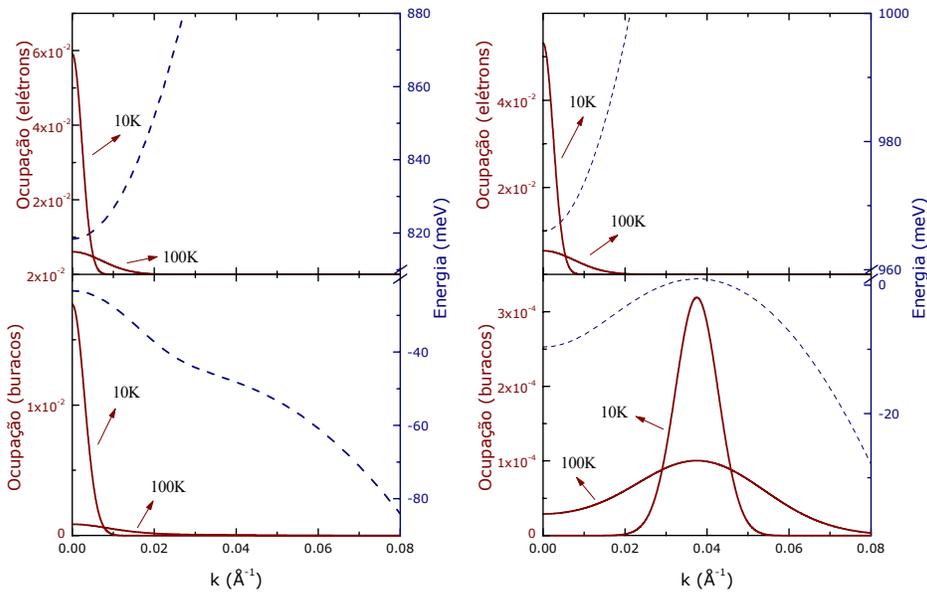


Figura 11 – Distribuições de portadores calculadas para amostras tipo-p, a 10 K e 100 K. As dispersões de energia da banda de condução e da banda de valência, respectivamente, para $x = 0.47$ e 0.60 , aparecem como linhas tracejadas.

2.2.2 Tipo-p: Intensidade de excitação.

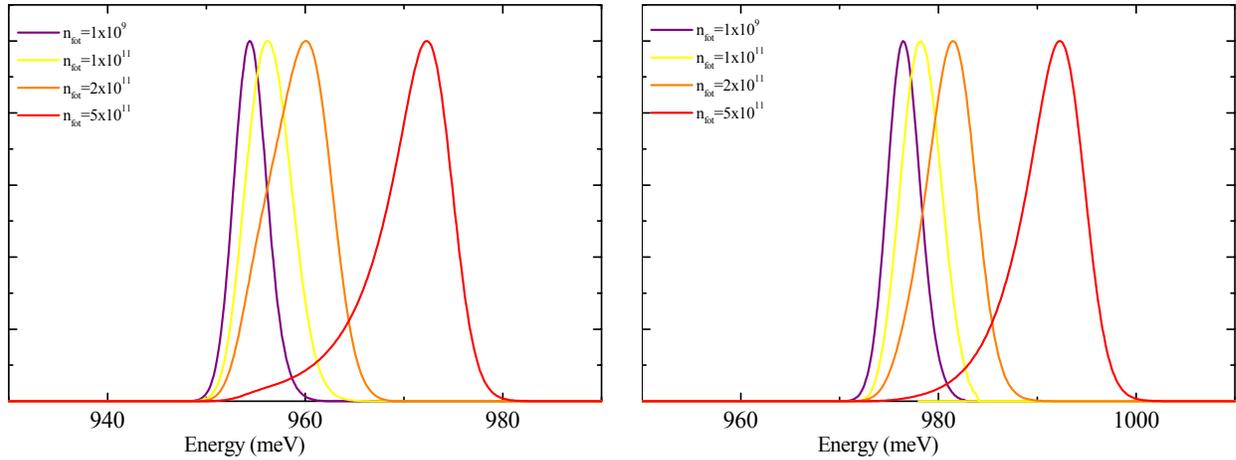


Figura 12 - Espectros de fotoluminescência normalizados calculados para diferentes intensidades de excitação. À esquerda: $x = 0.57$. À direita: $x = 0.60$. Densidades de portadores fotocriados utilizadas: $n_f = 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$, $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

O comportamento dos espectros teóricos das amostras tipo-p em função da intensidade de excitação é muito similar àqueles obtidos para amostras tipo-n. Para estruturas de *gap* direto a forma da linha mantém praticamente a mesma e o deslocamento do pico, no intervalo da concentração de portadores utilizado, varia em torno de 2 meV no máximo. Portanto, não apresentamos aqui esses espectros. Em estruturas de *gap* indireto o que observamos é o deslocamento do pico para altas energias com o aumento da densidade de portadores fotoexcitados, veja a Figura 12. O aumento do número de elétrons na banda de condução faz com que a superposição das distribuições de portadores em suas respectivas bandas tenha o máximo em vetores de onda cada vez maiores, aumentando assim a energia do pico. Como pode ser visto na Figura 13, quando o número de portadores fotocriados chega a $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ a distribuição de elétrons na banda de condução vai de $k = 0$ até $k_M \sim 0.018 \text{ \AA}^{-1}$ e tende a zero abruptamente. Portanto, para k acima de k_M a luminescência vai a zero, e para k abaixo de k_M a luminescência irá acompanhar a distribuição de ocupação de buracos, que diminui. A cauda na região de menor energia fica mais evidente para altas densidades de portadores.

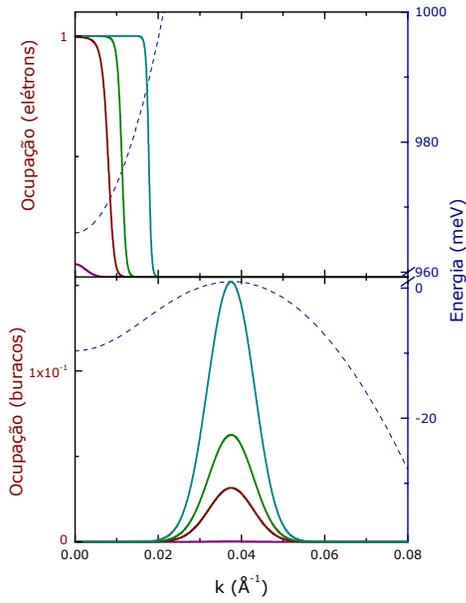


Figura 13 – Distribuições de elétrons e de buracos calculadas para amostras tipo-p, $x = 0.60$, para densidades $n_f = 1 \times 10^9 \text{ cm}^{-2}$, $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Como o pico de luminescência fica em torno do k_M , à medida que aumenta k_M também aumenta a intensidade do pico, porque a densidade de ocupação de buracos aumenta. O fator de aumento da intensidade segue exatamente a função distribuição em função de k .

Capítulo 3 – Experimental

3.1 Amostras – Estrutura e Crescimento.

Três conjuntos de amostras foram preparados especialmente para este estudo. Todos eles têm concentrações de Ga nas ligas ternárias com valor nominal de 0,47; 0,51; 0,54; 0,57 e 0,60, sendo que dois conjuntos são de poços quânticos de dopagem modulada tipo-p e tipo-n e um outro conjunto não-dopado. Estas amostras foram crescidas por *Low-Pressure Metal-Organic Chemical Vapor Deposition* (LP-MOCVD) no laboratório do LNLS/CPqD. A largura nominal do poço é igual a 60 Å em todas as amostras. Neste trabalho apresentamos somente as amostras dopadas.

O substrato é de InP dopado com silício, com orientação (100). A estrutura consiste de uma camada buffer de InP (espessura de 1.9 µm), seguida por uma camada de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (parâmetro de rede comensurado com o InP), com espessura de 3.8 mm. Depois seguem as seguintes camadas: InP não dopado (100 Å), InP dopado (100 Å, tipo-p ou n, ou não dopado, conforme o caso), nova camada de InP não dopado (100 Å), e o poço propriamente dito, 60 Å de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$. As últimas três camadas da amostra são iguais àquelas anteriores ao poço (Figura 1).

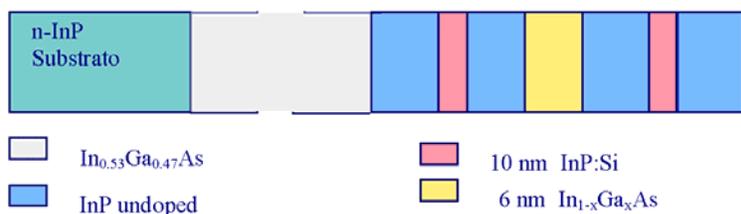


Figura 1: Esquema da estrutura das amostras tipo-n. Nas amostras tipo-p as camadas de InP:Si dão lugar a outras, de InP:Zn.

3.2 Fotoluminescência – Arranjo Experimental

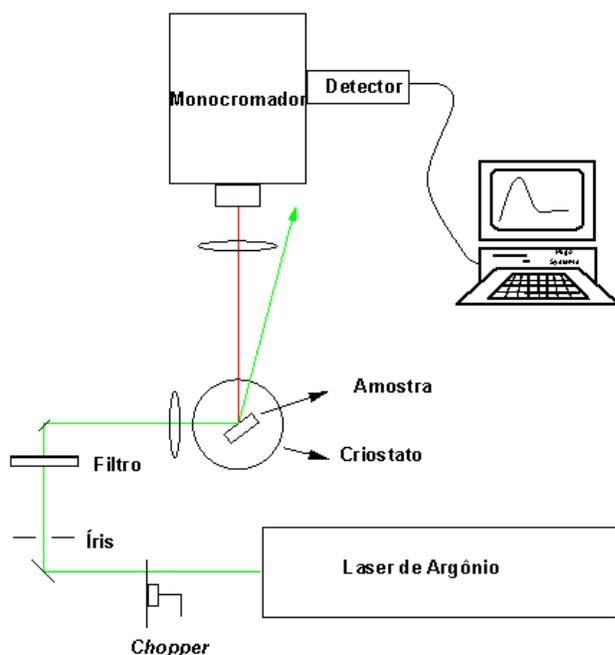


Figura 2: Esquema da montagem experimental da medida de fotoluminescência.

A montagem experimental utilizada para a medida de fotoluminescência está ilustrada na Figura 2. Foi utilizado um *laser* de argônio (linha 5145Å) cujo feixe foi modulado com *chopper* a 200Hz, amplificador *lock-in* da Stanford, um monocromador simples de 0.5m da SPEX com grade de difração de 600 linhas/mm e um detector de germânio (*North Coast*) refrigerado para detecção da luminescência. Esse detector é sensível na faixa de 1.0 a 1.6μm. As medidas foram feitas à temperatura do He superfluido, 2K, até ~100 K e para isso foi utilizado um criostato de imersão.

As medidas de fotoluminescência foram feitas variando a temperatura da amostra e a potência do laser para obtermos informações adicionais sobre as propriedades ópticas das amostras. Foram realizadas também medidas de eletrorrefletância nessas amostras, mas não serão apresentadas neste trabalho por fazerem parte de um projeto paralelo em colaboração com outros pesquisadores.

3.2.1 Medidas utilizando célula de pressão

Realizamos também medidas de fotoluminescência na presença de uma pressão externa. Essa medida, já mencionada na introdução, tem como objetivo verificar se as tensões externas reproduzem os mesmos efeitos que as tensões intrínsecas decorrentes da variação da composição de Ga nas camadas de InGaAs. A vantagem dessa medida, comparada com as que utilizam diferentes amostras, é que não há variação na qualidade da amostra, pois só uma é utilizada.

A célula de pressão utilizada foi projetada e construída no GPO pelo Prof. Fernando Iikawa e é baseada na deformação de uma placa. A amostra, que é um filme epitaxial com espessura muito menor do que a do substrato, fica apoiada em um anel de raio a (aproximadamente 1cm) e sofre um deslocamento na direção perpendicular ao plano devido à força aplicada em seu centro por uma esfera, como está ilustrado na Figura 3. O filme colocado do lado do anel sofre portanto uma deformação e fica sujeita a uma tração biaxial bem no centro do anel. Essa tensão será proporcional ao deslocamento da esfera com relação ao anel. Essa célula foi testada a baixa temperatura e observamos que a tensão biaxial no filme é aproximadamente constante (<5%) dentro de um diâmetro de 1mm no centro do anel. Como a espessura do filme é muito menor que a do substrato, o gradiente de tensão normal à superfície representa menos de 1% de variação ao longo da profundidade da camada.

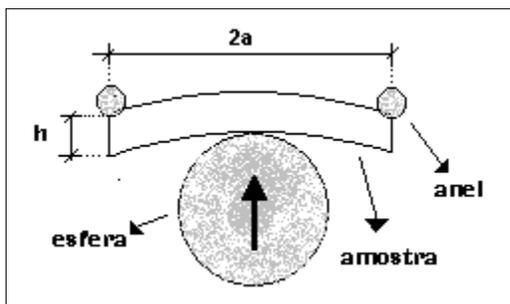


Figura 3: Esquema da célula de pressão.

Durante as medidas, para encontrarmos o centro da amostra, no qual a tensão biaxial é máxima e simétrica, utilizamos a projeção do feixe de laser na parede até encontrarmos a imagem circular do feixe. As medidas foram feitas em função do número de voltas dadas no eixo da célula de pressão (cada volta corresponde a um deslocamento de aproximadamente $8\mu\text{m}$ da esfera). As tensões foram determinadas a partir dos picos de luminescência provenientes da camada espessa de InGaAs. Como conhecemos os parâmetros, tais como as constantes elásticas e os potenciais de deformação desse material, substituímos esses parâmetros na expressão da variação da energia do *gap* em função da tensão biaxial para obter diretamente a tensão

correspondente. No nosso caso, a luminescência da camada InGaAs tensionada é devida a éxcitons de buracos leves, pois não é dopada intencionalmente.

Capítulo 4 – Resultados Experimentais

4.0 Fotoluminescência

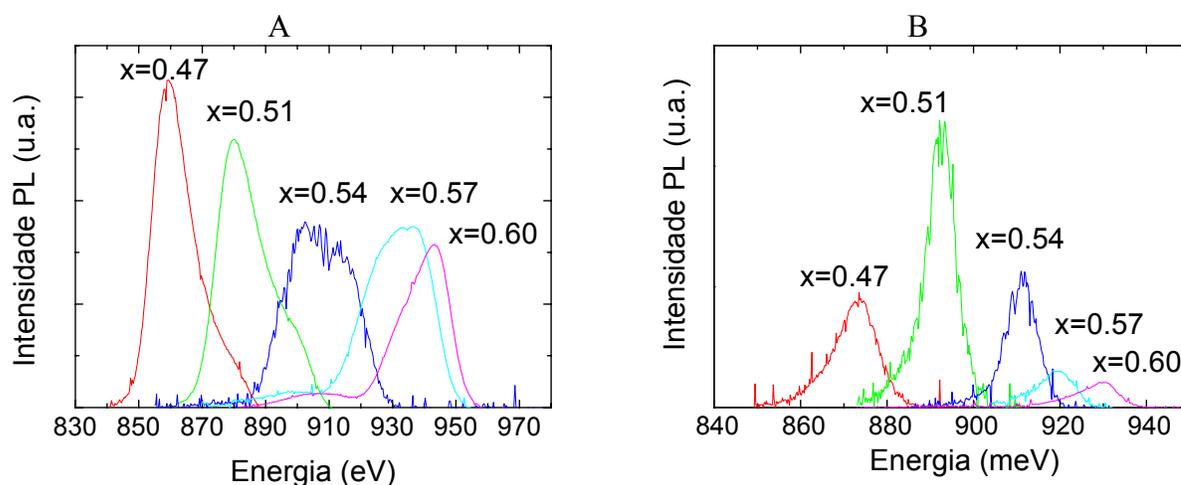


Figura 1 – Espectros de fotoluminescência de poços quânticos de dopagem modulada a) tipo-n e b) tipo-p.

Espectros de fotoluminescência das amostras tipo-n e p, medidas a 2 K, são mostrados na Figura 1. As medidas foram feitas nas mesmas condições experimentais em todas as amostras. Observamos que, tanto nas amostras tipo-n como nas tipo-p, as posições dos picos de emissão se deslocam para altas energias à medida que a concentração de Ga, x , aumenta de 0.47 para 0.60. Esse aumento, como foi mencionado no cálculo teórico, é devido ao aumento da energia do *gap* da liga de InGaAs com x . A intensidade de excitação nessas medidas foi baixa, estimada na ordem de 10^8 (*gap* direto) a 10^{10} (*gap* indireto) portadores/cm² no poço, o que é muito menos do que a densidade dos portadores provenientes da dopagem. Nessa estimativa consideramos que o

tempo de vida dos portadores varia de 2 a 200 ns (Michler *et al*, 1993) quando passa de *gap* direto para indireto.

Observamos que a forma da linha nas amostras tipo-n varia significativamente com a mudança na composição de Ga, enquanto nas amostras tipo-p tem pouca variação. Os resultados dos cálculos numéricos concordam com as formas de linha experimentais. Nas amostras tipo-n, a forma da linha em estruturas de *gap* direto é assimétrica, com cauda na região de maior energia, e, para estruturas de *gap* indireto, a cauda está na região de menor energia. Em amostras tipo-p, por outro lado, essa assimetria não é tão visível nem nos dados teóricos nem nos dados experimentais. Esses resultados mostram que apesar do poço quântico ter forte efeito de localização – por causa da flutuação do potencial da liga e da rugosidade das interfaces –, as propriedades ópticas ainda carregam a informação sobre as estruturas de banda. Um ponto discordante entre os espectros teóricos e experimentais é a largura da linha de emissão, muito maior nestes últimos. Essa discrepância pode ser atribuída principalmente aos efeitos de localização, interação de muitos corpos e, no caso de amostras de *gap* indireto, é mais visível a contribuição da interação dos portadores com fônons acústicos e ópticos durante a recombinação, conhecida como réplica de fônons, como pode ser visto na Figura 1.

É bem sabido que poços quânticos de InGaAs/InP têm efeitos de localização consideravelmente fortes quando comparados, por exemplo, com poços de GaAs/AlGaAs. Isso acontece por causa da flutuação no potencial da liga ternária e, além disso, esses sistemas apresentam interfaces menos abruptas por causa da instabilidade do elemento P na troca de As e P, ou vice-versa, na interface InGaAs e InP (Boscherini *et al*, 1998). Em amostras tensionadas aumenta também a possibilidade de haver defeitos. Em nossas amostras, os efeitos de localização podem alargar a banda de emissão de duas formas: i) provocando a recombinação de portadores fotocriados distribuídos em estados localizados com diferentes energias; ii) quebrando a conservação de k nas emissões ópticas, permitindo assim a recombinação de buracos fotocriados (localizados) com elétrons do gás bidimensional com energias de zero até a energia de Fermi. O efeito de muitos corpos também contribui no alargamento, porém menos significativamente. O alargamento da linha pela interação com fônons se torna mais relevante para amostras de *gap* indireto. Para determinarmos quantitativamente a importância de cada contribuição no alargamento de linha seria necessário um cálculo mais completo, que está planejado para a continuação do projeto.

Notamos também a redução da intensidade de fotoluminescência dessas amostras com o aumento da concentração de Ga, tanto no tipo-n como no tipo-p, exceto para a amostra tipo-p com $x = 0.47$. Essa redução é atribuída à mudança na estrutura de banda de *gap* direto para indireto, quando aumenta a vida média dos portadores. Porém, o decréscimo na intensidade do pico quando a estrutura passa de *gap* direto para indireto não é significativo se considerarmos a mudança no tempo de vida dos portadores de 2 ns para 200 ns observado por Michler *et al* (1993). Uma possível explicação para essa discordância é a quebra de conservação de k nas transições ópticas permitindo a emissão para diferentes k de elétrons e buracos nas amostras de *gap* indireto. A menor intensidade de luminescência na amostra tipo-p com $x = 0.47$ (vide Figura 1.b) pode ser atribuída à baixa qualidade da amostra por causa de problemas ocorridos durante o crescimento.

Em poços quânticos de dopagem modulada com forte efeito de localização é esperado um realçamento do efeito de muitos corpos conhecido como singularidade de nível de Fermi (FES) (Skolnick *et al*, 1987). Em nossas amostras em amostras de *gap* indireto observamos picos na região da energia de Fermi, porém os atribuímos à influência da estrutura de banda, como foi previsto teoricamente. Para verificarmos se há alguma contribuição de muitos corpos nos espectros de amostras de *gap* indireto seria necessário realizarmos um cálculo incluindo esse efeito, o que está fora da nossa proposta.

Para obtermos mais informações sobre as amostras, foram realizadas medidas de fotoluminescência em função da temperatura e da potência de excitação, discutidas nos próximos itens do capítulo.

4.1 Fotoluminescência vs. Temperatura da amostra.

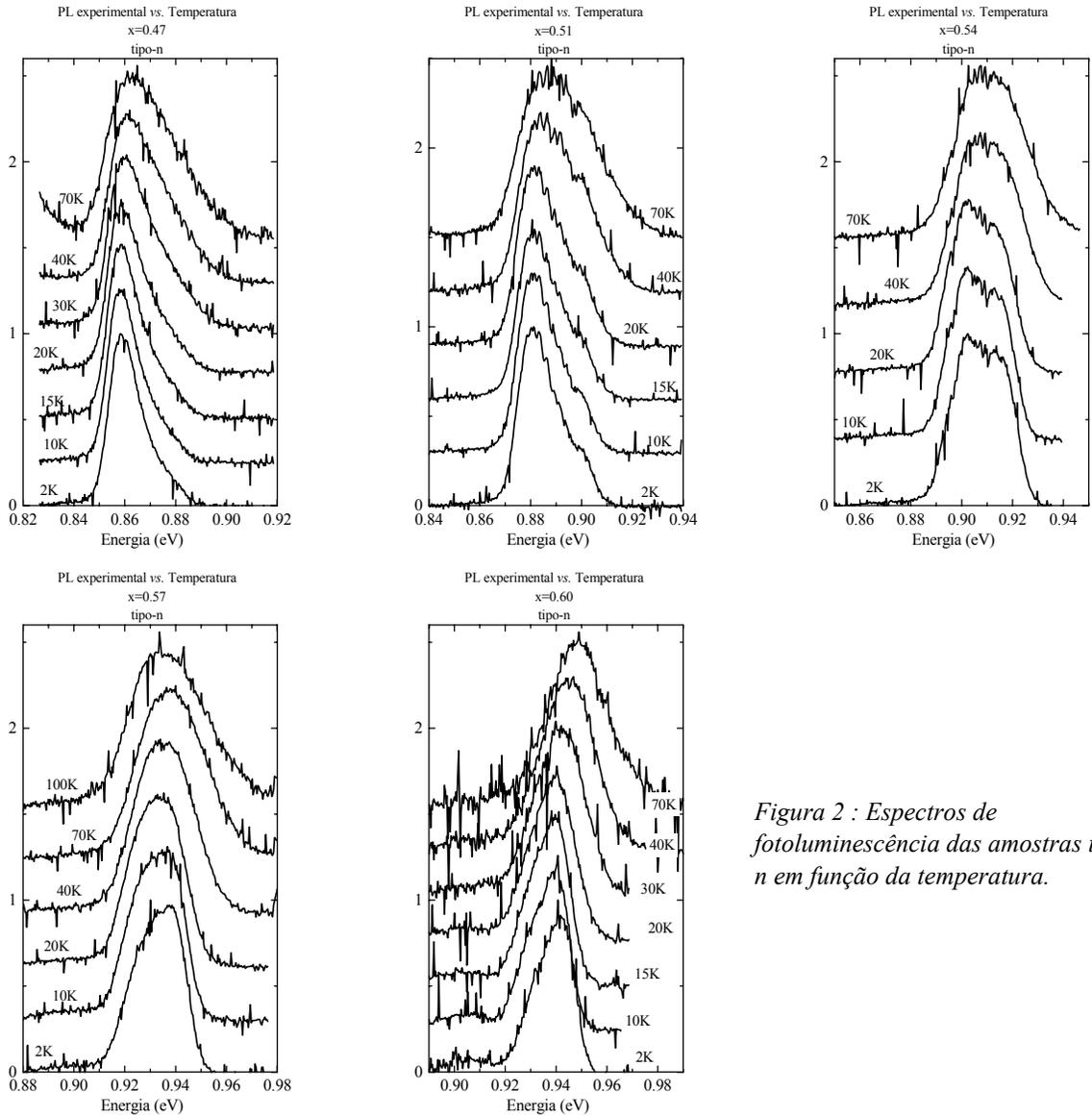


Figura 2 : Espectros de fotoluminescência das amostras tipo-n em função da temperatura.

Neste item, serão apresentados os dados de fotoluminescência em função da temperatura de ambos os tipos de amostras. No nosso modelo simples, vimos que o aumento da temperatura influencia basicamente modificando a distribuição dos portadores fotocriados no espaço k e que isso resultaria, tanto nas amostras tipo-n e tipo-p, em um alargamento da linha de emissão. A mudança na forma da linha é mais significativa para amostras de *gap* indireto. Veremos que o nosso modelo simples concorda qualitativamente com os dados experimentais, mas devemos considerar outros efeitos para interpretar os dados.

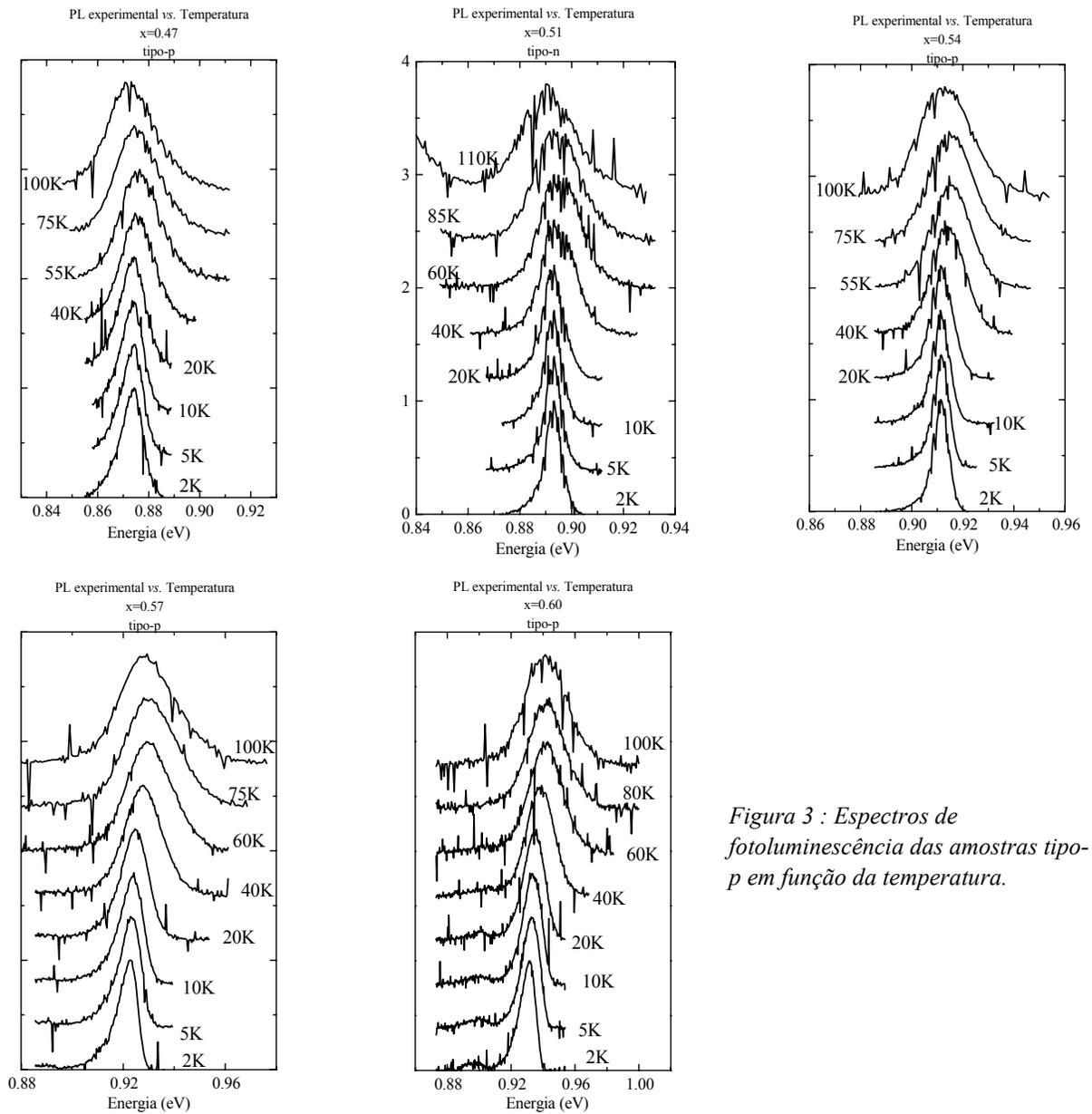


Figura 3 : Espectros de fotoluminescência das amostras tipo-p em função da temperatura.

Na Figura 2 e na Figura 3 são mostrados os espectros de fotoluminescência das amostras tipo-n e tipo-p, respectivamente, obtidos para diferentes temperaturas das amostras variando de 2 a ~100 K. Os espectros de todas as amostras apresentam alargamento da linha de emissão com o aumento da temperatura, como foi previsto pelo nosso modelo no capítulo 2. Em todas as amostras, a forma da linha se torna praticamente simétrica com o aumento da temperatura, independente de serem de *gap* direto ou indireto, tipo-n ou p. Isso não ocorre, no entanto, nos dados teóricos. Essa discordância é causada por efeitos não considerados no nosso modelo, como a interação com os fônons, que aumenta com a temperatura, e o efeito de localização, que permite

transições sem a conservação de k . Ambos os efeitos contribuem para o alargamento da banda de emissão.

O deslocamento do pico de luminescência para alta energia com o aumento da temperatura, observado na maioria das amostras (ver Figura 4.b e Figura 5.b), é um comportamento típico de emissão óptica em poços quânticos de *gap* direto na presença de localização. Os portadores fotocriados – buracos em poços tipo-n e elétrons em tipo-p – tendem a ocupar os estados localizados que têm, em média, energias mais altas quando aumenta a temperatura. Se a outra banda estiver completamente ocupada pelos portadores provenientes da dopagem modulada, a superposição das distribuições de portadores levará ao aumento da energia do pico de emissão. O que observamos também nos dados experimentais é que esse deslocamento com a temperatura é tão maior quanto maior for o conteúdo de Ga. Isso é coerente, se considerarmos que o aumento de composição de Ga corresponde a um aumento na tensão biaxial sobre a camada de InGaAs, conseqüentemente, aumento de estados localizados decorrente da criação de mais defeitos.

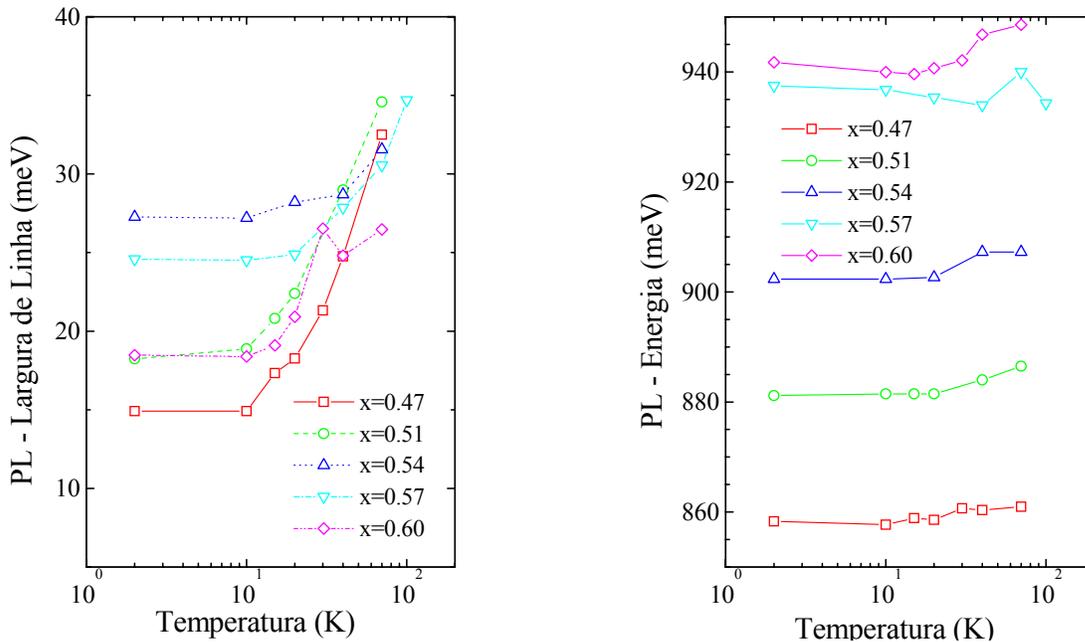


Figura 4 : a) largura da linha e b) posição do pico de fotoluminescência das amostras tipo-n.

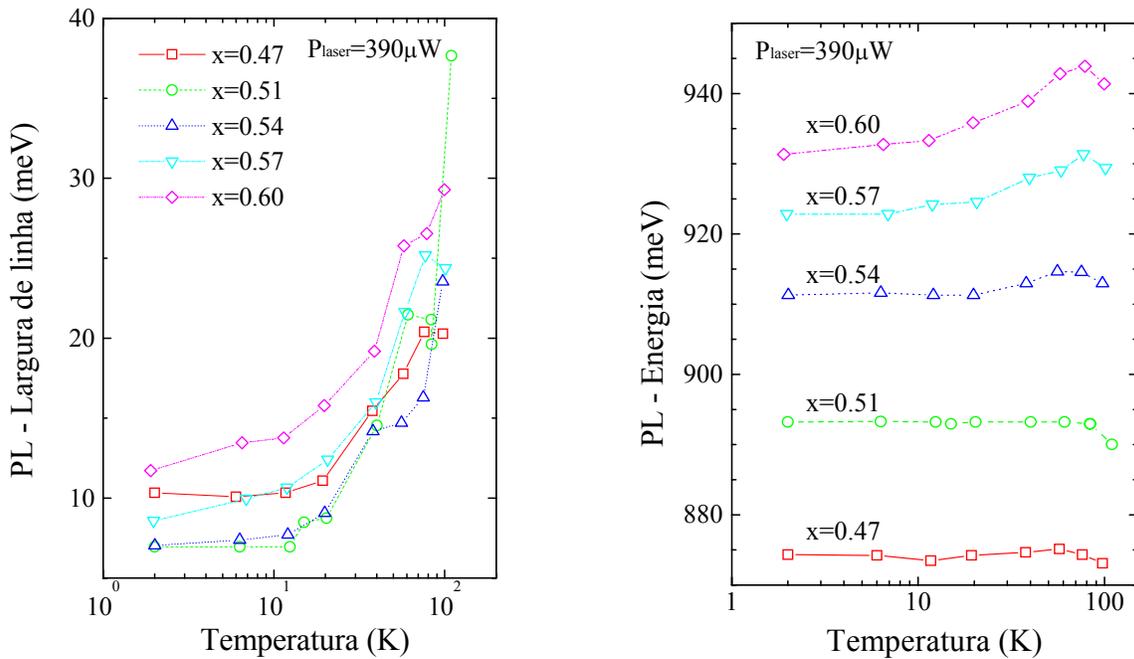
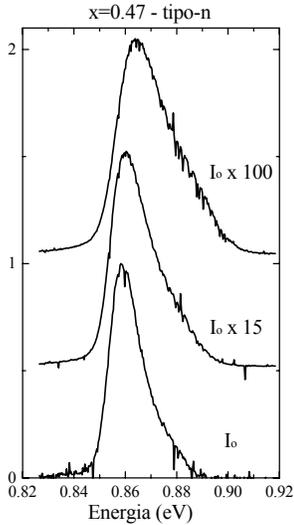


Figura 5 : a) largura da linha e b) posição do pico de fotoluminescência das amostras tipo-p.

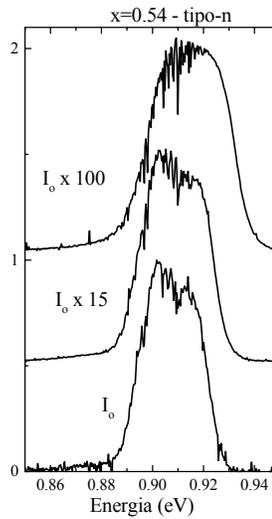
Nas amostras tipo-n com *gap* indireto, notamos também uma diminuição de energia nas temperaturas de 2 a ~40 K (Figura 4.b) e acima destas temperaturas o pico se desloca novamente para altas energias. Essa diminuição pode ser explicada pelos espectros teóricos apresentados no capítulo 2. Nos espectros teóricos de amostras tipo-n e de *gap* indireto, o deslocamento do pico de emissão é para baixas energias. Isso significa que nessa faixa de temperatura a contribuição da estruturas de bandas domina com relação ao efeito de localização, que tem comportamento oposto. Somente para temperaturas acima de ~40 K a energia do pico se desloca para altas energias, em decorrência do efeito de localização. Nas amostras tipo-p de *gap* indireto o deslocamento negativo por causa da estrutura de banda, de acordo com o resultado do cálculo, não ocorre. O deslocamento é positivo e bem maior do que para *gap* direto. Isso é atribuído ao efeito de localização. O que concorda com os dados experimentais, onde o pico desloca somente para altas energias no intervalo de temperatura de 2 a ~80 K, na Figura 5.b. O decréscimo de energia para altas temperaturas é devido à diminuição da energia do *gap* da liga com a temperatura.

4.2 Fotoluminescência vs. Potência de excitação.

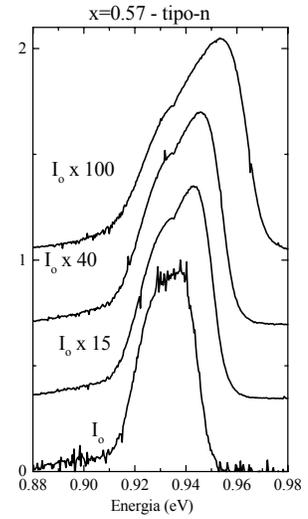
PL experimental vs. Intensidade de Excitação



PL experimental vs. Intensidade de Excitação



PL experimental vs. Intensidade de Excitação



PL experimental vs. Intensidade de Excitação

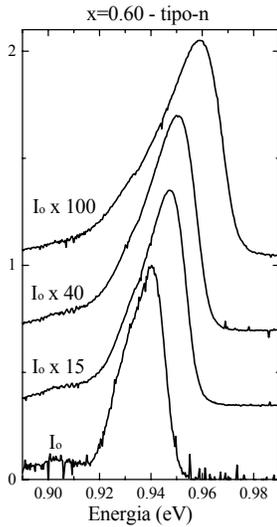


Figura 6: Espectros de fotoluminescência das amostras tipo-n em função da potência do laser.

Os espectros de fotoluminescência em função da potência de excitação em amostras tipo-n e p são apresentados na Figura 6 e na Figura 7. O comportamento dos espectros de emissão em função da potência tem uma certa semelhança com o comportamento observado em função da temperatura. Com o aumento da densidade de portadores fotoexcitados, os estados com k maiores são preenchidos. Como os buracos (elétrons) fotoexcitados em amostras tipo-n (tipo-p) dominam a luminescência, a ocupação dos estados com k maiores aumenta, e, conseqüentemente, aumenta

a largura de emissão. Isso é quase equivalente ao caso de aumento de temperatura, em que os estados de maior energia são ocupados por excitação térmica, porém desta vez mantendo a mesma densidade de portadores.

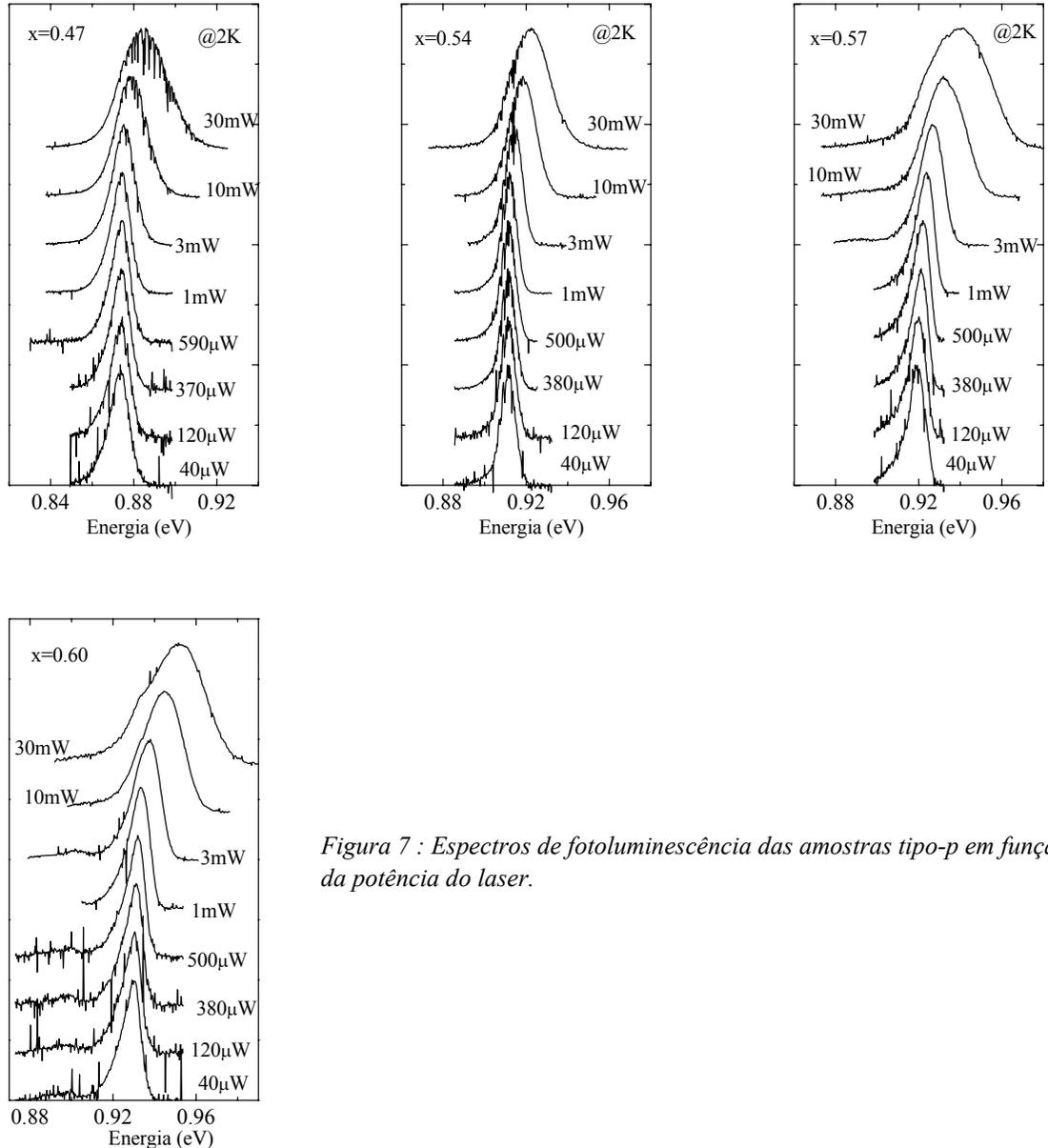


Figura 7 : Espectros de fotoluminescência das amostras tipo-p em função da potência do laser.

Na Figura 8 e na Figura 9, são apresentados os gráficos da intensidade do pico, largura de linha e a posição do pico de emissão em função da potência de excitação. A intensidade do pico, que tem o mesmo comportamento da intensidade integrada, varia praticamente linearmente com a potência do laser. A largura da linha, como foi discutido anteriormente, aumenta com a

intensidade de excitação. Um resultado interessante é o aumento da faixa de variação da posição do pico nas amostras consideradas de *gap* indireto comparado com as de *gap* direto: ~ 5 meV (13 meV) para amostras tipo-n (tipo-p) com $x = 0.47$ e 0.51 e ~ 30 meV para amostras tanto tipo-n como p, com $x = 0.57$ e 0.60 . Com base no argumento utilizado para interpretar o deslocamento de energia do pico em função da temperatura, o efeito de localização também contribui para o deslocamento do pico. Com o aumento da intensidade de excitação os estados localizados de mais altas energias são ocupados e, na média, esses estados têm maior densidade - por isso, o pico de emissão se desloca para altas energias.

O cálculo teórico indica que em amostras de *gap* direto o deslocamento do pico de emissão é muito pequeno (~ 2 meV), portanto, o deslocamento observado nos espectros experimentais é provavelmente dominado pelo efeito de localização. No caso de estruturas de *gap* indireto, o grande deslocamento na posição do pico tem outras origens. Uma possível causa desse deslocamento significativo é o aumento do *tempo de recombinação* dos portadores quando se passa de *gap* direto para indireto. Em consequência disso, a densidade de elétrons fotocriados aumenta na mesma proporção. Na literatura, são encontrados resultados experimentais, obtidos por medida de fotoluminescência resolvida no tempo, em que esse tempo varia de 2 ns, em amostras de *gap* direto, para 200 ns, em *gap* indireto (Michler *et al*, 1993). A estimativa da densidade de portadores fotocriados no poço quântico para o tempo de recombinação de 2 ns e a potência do laser de 1 mW é da ordem de 7×10^8 cm⁻². Para 30 mW, que é a máxima potência utilizada nas nossas medidas, essa densidade passa para 2×10^{10} cm⁻². A estimativa da densidade de portadores fotocriados para amostras com *gap* indireto aumenta duas ordens de grandeza se comparada com a de *gap* direto. A variação de quase-energia de Fermi na banda de condução não passa de 1 meV para *gap* direto, mas para *gap* indireto a variação é de quase 100 meV. Há que lembrar que a estimativa de densidade de portadores tem um erro de quase uma ordem de grandeza e é um parâmetro difícil de ser obtido com precisão. No entanto, esses dados mostram que é possível ter o deslocamento do pico de emissão em amostras de *gap* indireto de vários meV devido ao aumento de quase-energia de Fermi dos portadores fotocriados.

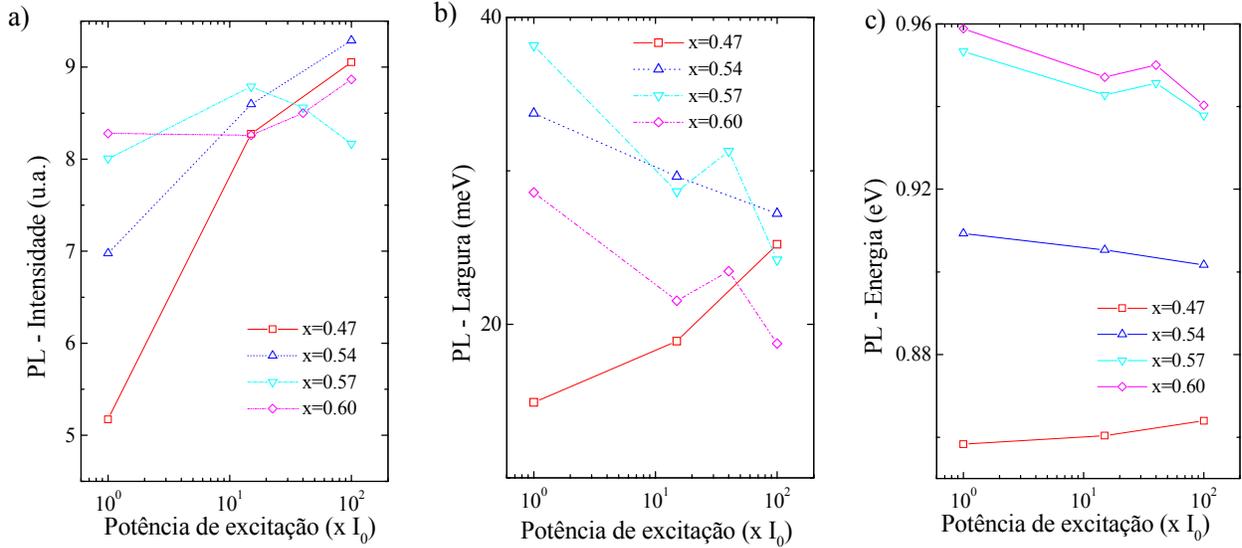


Figura 8 - Intensidade, largura e energia do pico de emissão em função da potência do laser. Amostras tipo-n.

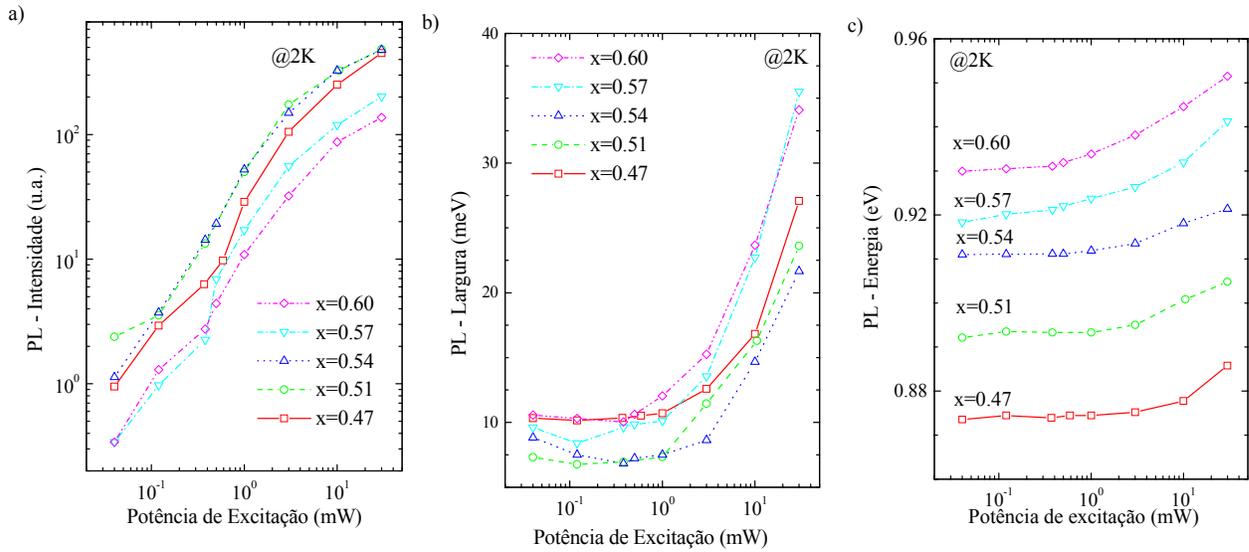


Figura 9- Intensidade, largura e energia do pico de emissão em função da potência do laser. Amostras tipo-p.

Um outro resultado importante a ser mencionado é a variação linear da intensidade integrada com a potência de excitação. Isso é um outro indício de que as linhas de emissão dos espectros de fotoluminescência são provenientes da recombinação a banda-a-banda e não de estados envolvendo impurezas ou defeitos. Em casos de recombinações envolvendo impurezas ou defeitos, ocorreria a saturação da intensidade, que obviamente depende da densidade de impurezas ou defeitos. Nas nossas amostras essa densidade é considerada baixa.

4.3 Medidas utilizando célula de pressão

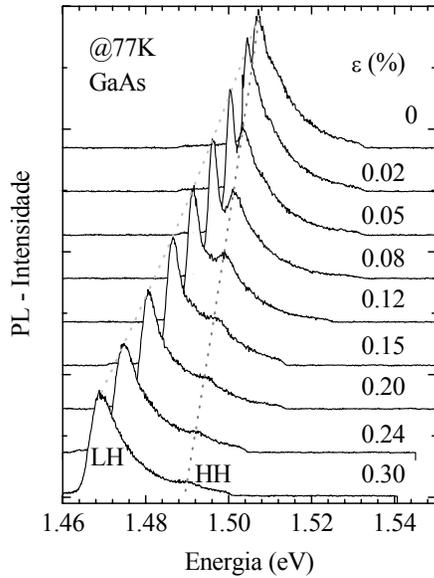


Figura 10 – Espectros de PL a 77 K em uma camada epitaxial de GaAs.

O aparato utilizado para medir fotoluminescência na presença pressão externa foi apresentado no capítulo anterior. Como exemplo de teste de funcionamento da célula, apresentamos na Figura 10 os espectros de fotoluminescência de uma camada epitaxial de GaAs medidos a 77 K. Na figura podem-se ver as linhas de emissão das transições entre a banda de condução e as bandas de buraco pesado e leve. Ambos os picos se deslocam para baixas energias, sendo que o deslocamento do buraco leve é maior do que do buraco pesado. A intensidade da luminescência do buraco pesado diminui por causa da diminuição de população a 77 K à medida que a separação entre as bandas de buraco pesado e leve aumenta em relação a $k_B T$. Também aparecem no gráfico as deformações da camada, em porcentagem. A deformação é calculada utilizando a equação abaixo, derivada do Hamiltoniano de Bir-Pikus em $k=0$ para pressão biaxial no plano (001):

$$E_g^{HH}(\varepsilon) - E_g^{HH}(0) = 2a(1 + \sigma)\varepsilon - b(1 + 2\sigma)\varepsilon$$

$$E_g^{LH}(\varepsilon) - E_g^{LH}(0) = 2a(1 + \sigma)\varepsilon + b(1 + 2\sigma)\varepsilon - \frac{2[b(1 + 2\sigma)\varepsilon]^2}{\Delta_0}$$

$$\sigma = \frac{C_{12}}{C_{11}};$$

onde C_{11} e C_{12} são elementos do tensor constante elástica, a e b são potenciais de deformação e Δ_0 a energia de separação das bandas pela interação spin-órbita.

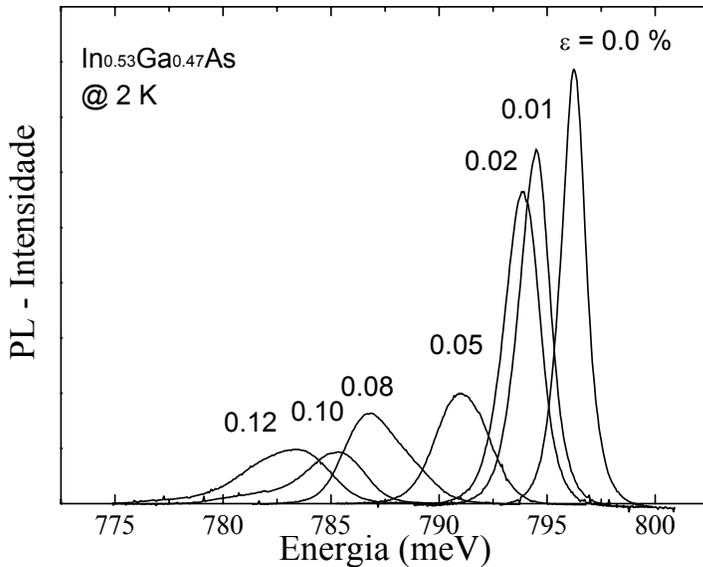


Figura 11 – Espectros de PL da camada de InGaAs da amostra $x = 0.54$ em função da pressão externa.

Para determinar a deformação em poços quânticos, utilizou-se a posição do pico de fotoluminescência da camada espessa de InGaAs da mesma amostra, cujos parâmetros de material são bem conhecidos. Nas nossas amostras a camada *buffer* de $In_{0.53}Ga_{0.47}As$ está bem próxima ao poço quântico. Como a espessura do substrato ($\sim 0.4\text{ mm}$) é muito maior do que a espessura total da camada epitaxial ($\sim 400\text{ nm}$), a tensão é praticamente constante. Como exemplo são mostrados na Figura 11 os espectros de fotoluminescência de InGaAs da amostra $x = 0.54$ com respectivos valores das deformações. A emissão provém da recombinação dos éxcitons de buracos leves. Os éxcitons de buracos pesados estão em energia de transição maiores, por isso não são observados. A diminuição da intensidade deve-se ao fato de a força do oscilador para o buraco leve ser menor ($1/3$) do que a do buraco pesado (Bastard, 1992).

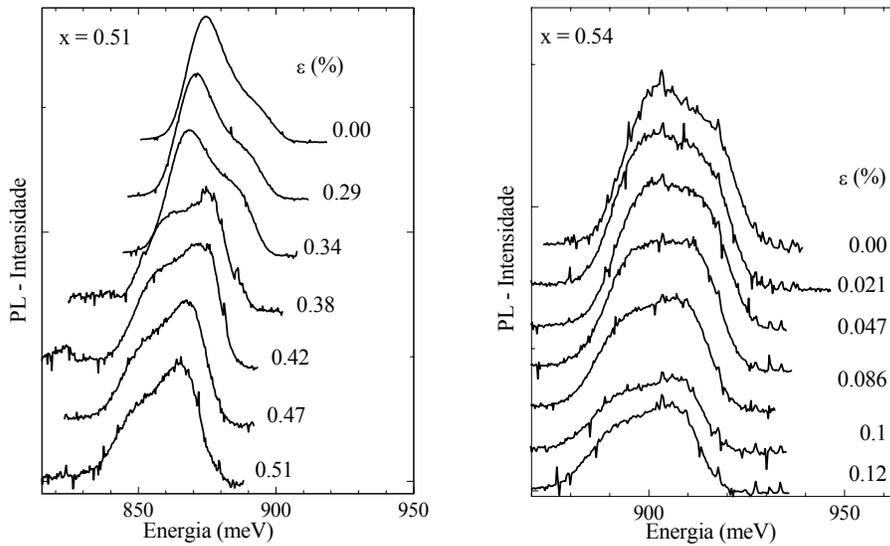


Figura 12 – Espectros de PL dos poços quânticos das amostras $x = 0.51$ e 0.54 em função da pressão aplicada.

O resultado das medidas de fotoluminescência dos poços quânticos nas amostras tipo-n está na Figura 12. Pode-se ver que os espectros se modificam à medida que aumenta a tensão externa. As características de *gap* direto, com o pico de fotoluminescência em baixa energia e cauda para alta energia, se modificam em função da tensão, transformando-se em traços de *gap* indireto: pico em energia mais alta e cauda para baixas energias. Podemos notar que a transição de *gap* direto-indireto ocorre para deformação entre 0.34 e 0.38% na amostra com $x = 0.51$ e em torno de 0.086% na amostra com $x = 0.54$. Assumindo que a transição ocorre em torno de $\varepsilon = 0.36\%$ na amostra com $x = 0.51$, isso equivale a um aumento de composição de Ga na liga da ordem de 0.05 com relação a 0.51. Isso corresponde então a uma amostra com concentração de Ga de 0.56, valor bem próximo a 0.55, que é o valor da transição de *gap* direto-indireto obtido por cálculo de estrutura de banda.

Esse resultado experimental na presença de pressão externa reforça a análise dos dados experimentais nos itens anteriores, relativos à mudança na estrutura de banda causada pela tração intrínseca decorrente da variação da concentração de Ga na liga ternária das diferentes amostras. Isso mostra também que é possível estudar poços quânticos de outros materiais, com melhor qualidade de interface, aplicando pressão externa.

Podemos considerar que em poços quânticos de InGaAs/InP de camadas tensionadas, apesar dos fortes efeitos de localização indicados nos nossos dados experimentais, é possível observar os efeitos da estrutura de banda em espectros ópticos. Isso concorda também com os resultados publicados por Michler *et al* (1993).

Conclusões e Perspectivas

Estudamos a transição de *gap* direto para indireto em poços de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ de dopagem modulada. As amostras analisadas foram crescidas por LP-MOCVD e tinham concentrações de gálio entre $x=0.47$ e $x=0.60$, apresentando, portanto, tração intrínseca. O objetivo foi analisar a evolução da estrutura de banda de valência em função da concentração de Ga.

Efetuamos um cálculo teórico, desenvolvido na linguagem FORTRAN e baseado no hamiltoniano de Luttinger-Kohn. Calculamos as bandas de valência em função do conteúdo de gálio nominal de nossas amostras e, baseados num modelo simples de elétrons independentes, calculamos a emissão óptica tanto para amostras dopadas tipo-n quanto tipo-p. Os espectros teóricos obtidos apresentam uma notável mudança na forma de linha que pode ser explicada através da distribuição dos portadores no espaço recíproco, que por sua vez depende da estrutura de banda para cada conteúdo de gálio. Essa mudança é mais perceptível em amostras tipo-n que em amostras tipo-p.

Também foram calculados os espectros para diferentes temperaturas e intensidades de excitação. Vimos que as estruturas tipo-n com *gap* indireto são mais sensíveis à mudança de temperatura do que as com *gap* direto, e que as tipo-p não têm modificações significativas. Também observamos que o aumento da intensidade de excitação afeta apenas os espectros relativos a estruturas de *gap* indireto, por causa da distribuição de portadores em $k \neq 0$.

Realizamos medidas de fotoluminescência em função da temperatura e da potência do *laser*. A mudança na forma de linha dos espectros das amostras tipo-n em função do conteúdo de gálio e o comportamento dos espectros calculados concordam qualitativamente entre si. A

assimetria que aparece nos espectros experimentais tipo-p é mais visível do que nos espectros teóricos.

Uma diferença marcante entre o cálculo e os experimentos é a largura de linha maior nestes últimos. Isso se deve principalmente a efeitos de localização, embora também haja réplicas de fônons para as amostras de *gap* indireto. Os efeitos de localização alargam a linha de emissão agindo de duas maneiras: promovendo a recombinação de portadores fotocriados em estados localizados com diferentes energias e quebrando a conservação de k nas emissões ópticas.

Nas medidas em função da temperatura da amostra, pudemos observar que o efeito de localização teve um importante papel também no deslocamento do pico de luminescência à medida que aumentamos a temperatura. É que os portadores fotocriados tendem a ocupar estados localizados, que têm energia mais alta. Isso fica ainda mais patente se destacarmos que para as amostras de *gap* indireto – as que têm maior possibilidade de conter defeitos em decorrência do maior conteúdo de gálio e maior tensão biaxial – houve um maior deslocamento do pico para altas energias.

O mesmo acontece quando variamos a potência de excitação: o pico se desloca para altas energias por causa da localização. Nas amostras de *gap* indireto, em particular, o deslocamento é da ordem de 30meV e foi atribuído ao aumento do nível de Fermi com a potência do laser, pois aumenta o tempo de vida dos portadores. Nessas medidas também notamos que a intensidade da luminescência varia linearmente com a excitação, descartando a possibilidade de recombinação de impurezas ou defeitos, e confirmando que a transição é banda-a-banda.

Finalmente, realizamos medidas em presença de pressão biaxial externa, utilizando uma célula de pressão construída em nossos laboratórios. Os espectros conseguidos desta maneira mudam de características de *gap* direto para *gap* indireto à medida que aumenta a pressão externa. Esse resultado é importante pois confirma nossas discussões em torno da tensão intrínseca e permite, ainda, fazer experimentos utilizando pressão externa para modificar a estrutura de bandas em poços feitos de outros materiais, possibilitando inclusive o estudo em amostra de melhor qualidade de interface. Essa seria uma das possíveis continuações deste trabalho.

O cálculo teórico desenvolvido, que se provou muito útil na interpretação dos resultados experimentais, também poderá ser melhorado se incluirmos os efeitos de localização. Isso pode

ser feito relaxando-se a condição de transição “vertical” em k . Além disso, podemos incluir no cálculo das bandas de valência os efeitos de pressão externa.

Referências

- BASTARD, G. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. Paris: Les Editions de Physique, 1992. 357p. (Monographies de physique).
- BOSCHERINI, F., LAMBERTI, C., PACARELLI, S., RIGO, C. & MOBILIO, S. Local atomic structure in strained interfaces of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ heterostructures. *Phys. Rev. B*, v.58, p.10745, 1998.
- CHAO, C.Y.-P. & CHUANG, S.L. Spin-orbit-coupling effects on the valence-band structure of strained semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, v.46, n.7, p. 4110-4122, 1992.
- HEGARTY, J., TAI, K. & TSANG, W.T. Enhanced inelastic scattering and localization of excitons in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{InP}$ alloy quantum wells. *Rapid Commun. of Physical Review B*, v.38, n.11, p.7843-7845, 1988.
- KLEINMAN, D.A., Theory of excitons in semiconductor quantum wells containing degenerate electrons or holes. *Physical Review B*, v.32, n.6, p. 3766-3771, 1985.
- MATTHEWS, J.W. & BLAKESLEE, A.E. Defects in epitaxial multilayers .1. Misfit Dislocations. *Journal of Crystal Growth*, v.27, Dec., p. 118-125, 1974.
- MICHLER, P., HANGLEITER, A.; MORITZ, A.; FUCHS, G.; HÄRLE, V. & SCHOLZ, F. Direct-to-Indirect energy-gap transition in strained $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells. *Rapid Commun. of Physical Review B*, v.48, n.16, p.11991-11993, 1993.
- POLLAK, F.H. Effects of Homogeneous Strain on the Electronic and Vibrational Levels in Semiconductors. Willardson, R.K. & Beer, A.C. *Semiconductors and semimetals: a treatise*. Orlando. Academic, c1966-1991. v.32, p.17-53.
- SKOLNICK, M.S., RORISON, J.M., NASH, K.J., MOWBRAY, D.J., TAPSTER, P.R., BASS, S.J. & PITT, A.D. Observation of a Many-Body Edge Singularity in Quantum-Well Luminescence Spectra. *Physical Review Letters*, v.58, n.20, p.2130-2133, 1987.

SUGAWARA, M., OKAZAKI, N., FUJII, T., & YAMAZAKI, S. Conduction-band and valence-band structures in strained $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ quantum wells on (001) InP substrates. *Physical Review B*, v. 48, n.11, p. 8102- 8118, 1993.

TRIQUES, A.L.C. & BRUM, J. A. *Proceedings of the 22nd International Conference on the Physics of Semiconductors, Vancouver, Canada, 1994*, edited by D. J. Lockwood. World Scientific, 1995. Vol. 2, p. 1328–1331.

YU, P.Y. & CARDONA, M. *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*. Berlin: Springer, c1996. 617p.

Apêndice

Enhancement of Fermi energy optical emission induced by the band structure in strained-layer InGaAs/InP quantum wells

H. A. P. Tudury¹, F. Iikawa¹, E. Ribeiro^{1,2}, J. A. Brum¹, W. Carvalho Jr.², A. A. Bernussi², A. L. Gobbi²

¹ Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas, 13083-970 Campinas - SP, Brazil

² Laboratório de Optoeletrônica, Fundação CPqD/LNLS, 13088-061 Campinas - SP, Brazil

1 Introduction

We studied the electronic band structure of strained-layer $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ quantum wells using optical techniques. There are interesting features in the band structure of this system which are produced by the spatial quantum confinement along the growth direction, and by the built-in biaxial strain. These two effects induce a strong valence band mixing that may lead to an indirect gap for certain Ga concentrations, x , of the InGaAs alloy (quantum well). Recently, the indirect band structure has been investigated experimentally [1] and theoretically [2–4] in this system. Time-resolved photoluminescence results obtained in Ref. [1] show evidence of the indirect band structure in undoped samples. The crossover direct-to-indirect gap occurs for x around 0.55: direct gap is found for $x < 0.55$ and indirect for $x > 0.55$. The presence of an electron gas would suppress the excitonic effects and for this situation only theoretical predictions [2–4] are available. With this in mind, in the present work we investigated n-type modulation-doped InGaAs/InP quantum wells in order to directly assess the formation of an indirect gap in doped samples.

2 Experimental results and discussion

The set of samples studied in this work consist of a series of n-type InGaAs/InP modulation-doped single quantum wells. The samples were grown by low-pressure metal-organic chemical vapor deposition on an n-type doped InP substrate. The Ga concentration varies from 0.47 to 0.60 and the quantum well width is kept fixed (6 nm). We used an Ar laser [an halogen lamp] as light source for photoluminescence (PL) [electroreflectance (ER)] measurements. Both experiments were performed at 2 K in a liquid-helium immersion cryostat. For ER measurements we deposited a semi-transparent gold film on the surface of the sample in order to apply the required electric fields.

Figure 1 shows the photoluminescence spectra of five samples with different Ga concentration. The peak position of the emission line shifts to higher energies as the Ga concentration of the sample increases. This shift is a combination of two different mechanisms. The dominant contribution comes from the increase of the gap energy of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ alloy with x . The built-in tensile strain also increases with x , however it acts in the op-

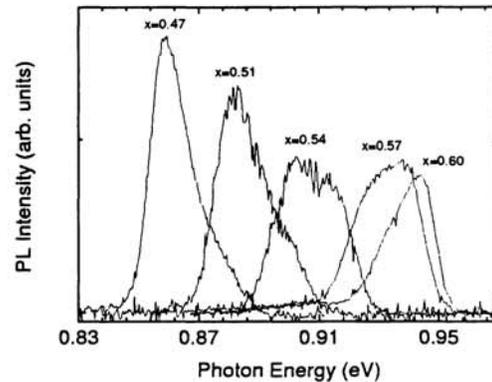


Fig. 1 Photoluminescence spectra of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ modulation doped quantum wells

posite direction, lowering the band gap. Although strain has little effect on the net energy shift it also changes the relative separation among the bands, which leads to strong modifications on the valence band dispersion.

The optical transitions of n-type modulation-doped quantum wells are dominated by the photocreated hole distribution, since the electron states are filled up to the Fermi energy. The holes occupy different wave-vector k , parallel to the layer plane, around the top of the valence band. Based on a single particle model, the optical transitions of direct gap quantum wells occur around $k = 0$. The recombination should be centered around E_0 (gap energy) but broadened to higher energy region (electrons are available from k_0 to k_F), forming an asymmetric emission band. The PL line shapes of samples with $x = 0.47$ and 0.51 (see Fig. 1), which are expected to be direct gap quantum wells, are consistent with this description. The PL spectrum of sample with $x = 0.51$ is broader than the one with $x = 0.47$ because the hole effective mass is larger, which allows these carriers to be distributed over a broader range of k .

The PL spectra of indirect-gap quantum wells with $x = 0.57$ and 0.60 , shown in Fig. 1, present the peak position at the high energy region of the PL spectra with a tail at the low-energy side. This is an opposite behavior to that observed in direct-gap samples ($x = 0.47$ and 0.51). The slightly indirect valence band dispersion allows the distribution of the photocreated holes for large

values of k around k_0 , where k_0 is the wavevector at the top of the valence band in an indirect gap quantum well. The hole occupation decreases when k decreases to zero. This means that the optical emission around $k \sim 0$ is weaker than those for $k \sim k_0$. Since the Fermi wavevector k_F of our samples is smaller than k_0 , the PL intensity is stronger for $k \sim k_F$. The emission intensity must decrease with decreasing values of k . In this case, the PL band must present a peak around the Fermi energy and a tail at the low-energy region, as shown in Fig. 1 for samples with $x = 0.57$ and 0.60 .

For the sample with intermediate Ga concentration, $x = 0.54$, the valence band is expected to have an almost flat dispersion. In this case, the photocreated holes are distributed over a large range of k , allowing optical emission for k varying from 0 to k_F . This results in a square-like PL line shape, as shown in Fig. 1.

The ER results reinforce the interpretation used to explain the PL data shown in Fig. 1. The ER spectrum is related to the optical absorption, which has a unique final state in our modulation-doped quantum wells: the Fermi energy. On the other hand, the PL emission occurs around either the gap energy or the Fermi energy, depending on the valence band structure. The experimental results obtained by ER and PL measurements as a function of electron density (which depends on the DC voltage applied to the samples) are shown in Fig. 2. In our samples, the electron gas density decreases sensitively for DC voltages lower than +80 mV. For voltages above this value the electron density decreases slightly and after that remains practically constant. We concentrate the discussion for DC voltages below +80 mV.

The ER transition energies follow the Fermi energy variation. All the samples exhibit practically the same energy range of variation for DC voltages below +80 mV. However, the same does not occur for the PL data. For example, in the sample with $x = 0.51$ (direct gap) PL peak energy decreases when DC voltage increases from -200 to +80 mV, while for the other samples (indirect gap) we observe an increase of the PL peak position with increasing electron density. The decreasing of PL peak position with DC bias for the sample with $x = 0.51$ is attributed to the electrostatic potential variation and the gap renormalization effects. For indirect-gap quantum wells the PL peak position is related to the Fermi energy. Thus, it follows the Fermi energy variation, which is dominant when compared to the electrostatic potential variation and the gap renormalization effects. These results show a clear evidence of the PL line shape dependence on the valence band structure. The ER data do not present any significant variation among the investigated samples, because the final state for absorption is the Fermi energy. An intriguing result obtained in our data is the large value of the Stokes shift energy (difference between absorption and emission energies at minimum carrier concentration) for indirect gap samples (as large as 30 meV for the sample with $x = 0.60$). A pos-

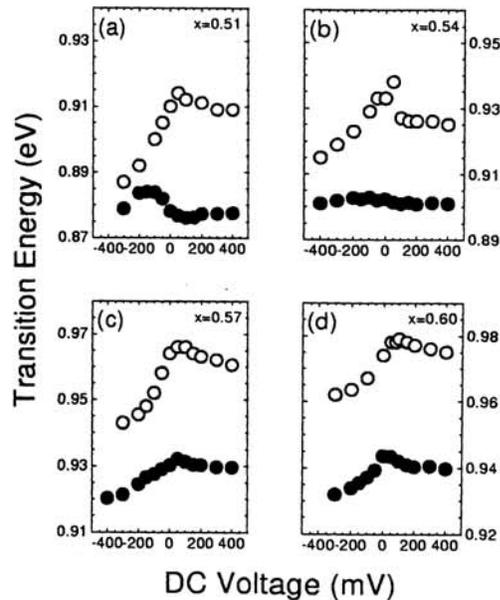


Fig. 2 Electroreflectance (open circles) and photoluminescence (solid circles) data of four samples as a function of DC voltage.

sible explanation is the effect of carrier localization due to an increase of the interface roughness as the built-in strain increases with x . However, additional experiments will be necessary for a conclusive explanation on this additional contribution.

3 Conclusions

We studied n-type $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ modulation-doped single quantum wells by photoluminescence and electroreflectance techniques. The results of PL and ER are consistent with the single particle model and the band structure theory, attesting the formation of an indirect gap for samples with larger values of x , which also presented the large values of the Stokes shift. An increase of carrier localization effects with x might be a possible origin for these observations.

Acknowledgements

This work was supported by Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, CNPq and FAEP.

References

1. P. Michler, A. Hangleiter, A. Moritz, G. Fuchs, V. Härle, and F. Scholz, *Phys. Rev. B* **48**, (1993) 11991.
2. C. Y.-P. Chao and S.L. Chuang, *Phys. Rev. B* **46**, (1992) 4110.
3. M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii, and S. Yamazaki, *Phys. Rev. B* **48**, (1993) 8102.
4. A. L. C. Triques and J. A. Brum, *Proceedings of the 22nd International Conference on the Physics of Semiconductors*, ed. by D. J. Lockwood (World Scientific, 1995), p. 1328.

Strain-dependent optical emission in $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ quantum wells

H. A. P. Tudury, M. K. K. Nakaema, and F. Iikawa

Instituto de Física “Gleb Wataghin,” Universidade Estadual de Campinas, CP 6165, 13083-970 Campinas-SP, Brazil

J. A. Brum

*Instituto de Física “Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, CP 6165, 13083-970 Campinas-SP, Brazil
and ABTLuS-Laboratório Nacional de Luz Síncrotron, CP 6192, 13083-061 Campinas-SP, Brazil*

E. Ribeiro, W. Carvalho, Jr., A. A. Bernussi, and A. L. Gobbi

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron-ABTLuS, CP 6192, 13083-061 Campinas-SP, Brazil

(Received 31 May 2001; published 14 September 2001)

InGaAs/InP strained-layer modulation-doped quantum wells were studied by photoluminescence. The combination of the built-in strain and the quantum confinement in this system leads to a strong valence band mixing yielding direct and indirect band gap structures. We demonstrate that the optical emission line shape is strongly dependent on the valence band dispersion and it is a good method to distinguish between direct and indirect structures. The application of an external biaxial tensile strain to the samples provides an additional evidence of direct-to-indirect band gap transition in strained heterostructures.

DOI: 10.1103/PhysRevB.64.153301

PACS number(s): 78.66.Fd, 78.55.Cr, 78.30.Fs

I. INTRODUCTION

Strained $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ heterostructures grown on InP substrates are very suitable materials for band gap engineering and device applications.¹⁻¹¹ InGaAs alloy layers can be grown under either a tensile or a compressive biaxial strain by changing the Ga content. Here we consider an $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{InP}$ quantum well (QW) where the $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ is the well material. The QW confinement breaks the valence band center-of-zone degeneracy and the top valence level is heavy-hole-like. For the QW width considered here, the next level is light-hole-like. In addition, the heavy-hole and the light-hole subbands shift towards (opposite to) each other when the InGaAs layer is under tensile (compressive) strain. By carefully tailoring the sample parameters such as the well width and the Ga concentration (x) in the $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ alloy, one may reach a condition of indirect band gap energy structure. The designed band gap flexibility of the InGaAs system enables one to control the photocreated carrier radiative lifetime. Indirect band gap transition in InGaAs/InP heterostructure has been theoretically predicted^{4,5,7} and experimental evidence has been reported for undoped samples.⁶

In this work, we present an optical study of the valence band structure of strained-layer InGaAs/InP n -type modulation-doped QW's. By varying the Ga concentration, the biaxial tensile strain in the QW layer can be increased leading to drastic changes in the band structure of this system, mainly in the valence band dispersion. Due to the presence of a high-density two-dimensional electron gas (2DEG) in the studied samples, the electron-hole pair recombination is governed by the photocreated hole distribution in k space. InGaAs/InP heterostructures allow us to optically study the evolution of the valence band structure from a direct-gap to an indirect-gap configuration. The calculated optical spectra evolution of modulation doped InGaAs/InP QW's as a function of biaxial tensile strain qualitatively agrees with the observed experimental results. We also demonstrate that an ex-

ternal biaxial tensile stress applied to a direct-gap sample induces a direct-to-indirect crossover. This behavior is equivalent to the one obtained by increasing the Ga concentration in the InGaAs/InP QW samples. The external strain applied to the QW's represents an alternative method to control the carrier radiative lifetime and the valence band effective mass in this system.

II. EXPERIMENTAL DETAILS

The samples were grown by low-pressure metal-organic chemical vapor deposition (LP-MOCVD) on (001) InP:S substrates. The structure of the investigated samples consists of an InP buffer layer (1.9 μm thick), a lattice-matched $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (3.8 μm thick), a 10 nm thick InP, a 10 nm thick Si-doped InP, a 10 nm thick InP, a 6 nm thick $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ QW, a 10 nm thick InP, a 10 nm thick Si-doped InP, and a 30 nm thick InP capping layer. The doped InP layers ($N_{\text{Si}}=10^{18} \text{ cm}^{-3}$) are responsible for the formation of the 2DEG in the QW, with an electron density of $n_s=5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.¹¹ We have studied a set of five samples with Ga concentration varying from 0.47 (direct gap) to 0.60 (indirect gap).

Photoluminescence (PL) experiments were performed using the 632.8 nm line of a He-Ne laser as the excitation source. The optical emission was detected by a cooled Ge photodiode coupled to a 0.5 m single spectrometer. The biaxial tensile strain was externally applied to the samples by a specially designed low-temperature pressure cell. All measurements were carried out at 2 K temperature (liquid He immersion cryostat).

III. RESULTS IN DISCUSSIONS

Figure 1 shows the PL spectra of five samples with different Ga concentration. The peak position of the emission line shifts to higher energies as the Ga concentration in the

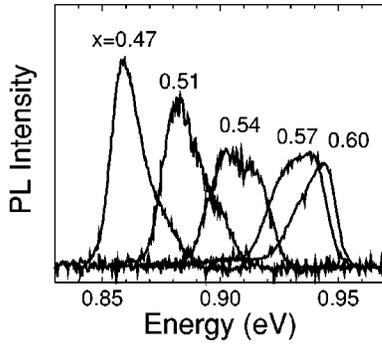


FIG. 1. Photoluminescence spectra of samples with different Ga composition.

$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ alloy QW increases. This shift is a combination of two different effects. The dominant contribution comes from the increase of the gap energy of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ alloy with x . The built-in biaxial tensile strain also increases with x (due to the increasing lattice mismatch relative to the InP barriers). However, it acts in the opposite direction, lowering the band gap energy. Although the strain has little effect on the net energy shift, it also changes the relative separation between the bands, which leads to strong modifications of the valence band dispersion.

The most remarkable feature shown in Fig. 1 is the dramatic evolution of the PL line shape as the Ga content is increased. This behavior can be qualitatively explained by using the schematic illustration shown in Fig. 2. Since the electron energy states are filled up to the Fermi energy, the line shapes of the optical transitions are determined by the photocreated hole distribution. After been created, these carriers relax their energy and momentum and occupy the top of the valence band. For direct-gap samples the holes are distributed around $k=0$ and the recombination takes place close to E_0 (effective gap energy), but broadened to higher energies (the hole population decreases with increasing k). The high-energy tail of the PL spectrum is, therefore, related to the hole quasitemperature, which is assumed to be the sample temperature. The samples with $x=0.47$ and 0.51 (see Fig. 1), which are expected to exhibit direct interband transitions, have a PL line shape consistent with this description. As the Ga concentration increases the hole effective mass

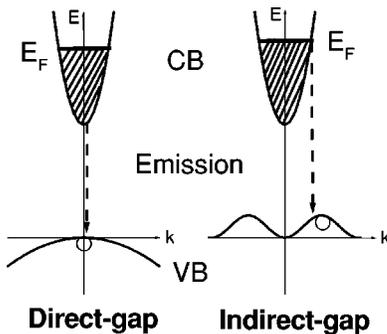


FIG. 2. Schematic illustration of the optical transitions in direct and indirect band structures in the presence of a two dimensional electron gas.

becomes heavier, allowing the holes to be distributed over a larger range of k values which broadens the optical transition due to the electron-hole recombination at different k 's. This interpretation also agrees with the fact that the PL line width of the sample with $x=0.51$ is broader than the one with $x=0.47$. Following this tendency, by further increasing the Ga content, the valence band reaches the direct-to-indirect gap transition, exhibiting an almost flat energy band dispersion. In this case, the holes are distributed over an even larger range of k values, allowing for optical transitions from $k=0$ to k_F . The net result is an almost squarelike PL line shape, as shown in the PL spectrum of the sample with $x=0.54$ in Fig. 1. For higher x , the top of the valence band shifts to $k_0 \neq 0$, thus leading to an indirect band structure, allowing distribution of the photocreated holes over k around k_0 , where k_0 is the wave vector at the top of the valence band. The hole occupation decreases as the k value tends to zero and for $k > k_0$. Since there are electrons available for recombination from zero to k_F , and k_F is smaller than k_0 (see below), the PL intensity is higher at $k \sim k_F$. The PL emission intensity decreases with decreasing k . In this case, the PL emission must exhibit a peak around the Fermi energy and a tail towards the low-energy side of the spectrum. This behavior can be clearly observed in the PL spectra of the samples with $x=0.57$ and $x=0.60$ in Fig. 1.

In order to verify the interpretation discussed above we calculated the valence band structure of our samples using the six-bands $\vec{k} \cdot \vec{p}$ method,^{4,5,7,12} including the heavy, light, and split-off hole bands. In addition to the strain effects, we also included the self-consistent potential from the 2DEG. Due to the narrowness of the QW this effect is small and it was neglected afterwards. The conduction band is assumed parabolic. The photoluminescence is calculated directly using the Fermi golden rule¹³ and assuming that the photocreated carriers are thermalized to the lattice temperature. This is a reasonable assumption since the ‘‘intrinsic’’ 2DEG (originated from modulation doping) and the photocreated carriers reach a common temperature through electron-electron and electron-hole interaction. The experiments are performed under low excitation intensity and the photocreated carrier concentration is an order of magnitude lower than the ‘‘intrinsic’’ 2DEG. We used a Fermi-Dirac distribution function for carrier occupations in their respective bands. Figure 3(a) shows the calculated valence subband dispersion for InGaAs/InP heterostructures with different Ga concentration. It is clearly evident from this figure that as the Ga content increases the separation between the first heavy-hole and light-hole subbands decreases due to the increasing biaxial strain, leading to the crossover of the bands that is responsible for the direct-to-indirect gap transition. For both $x=0.57$ and 0.60 the top of the indirect valence band is located at $k_0 \sim 0.04 \text{ \AA}^{-1}$, which is larger than $k_F \sim 0.02 \text{ \AA}^{-1}$ (electron gas density $\sim 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), so that these calculations support the interpretation of the PL line shapes given above. Figure 3(b) shows the calculated PL spectra for the same Ga content values of QW's as in Fig. 3(a). The calculated PL line shapes are in good qualitative agreement with the experimental results shown in Fig. 1.

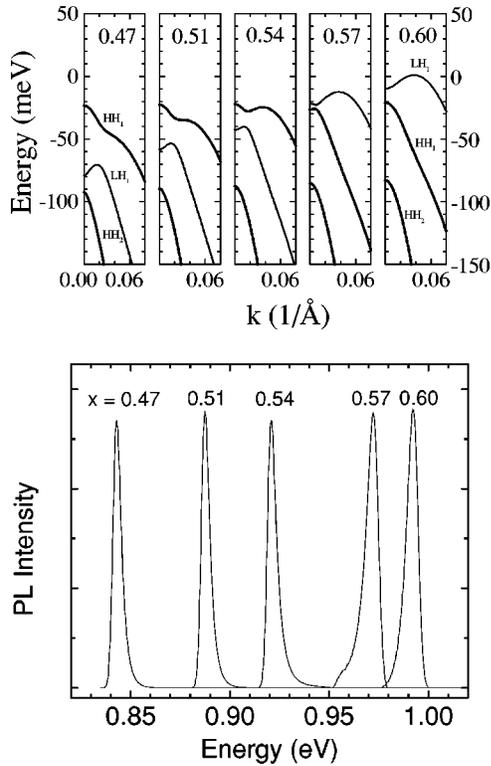


FIG. 3. (a) Valence band dispersion in InGaAs/InP QW's for Ga composition $x=0.47, 0.51, 0.54, 0.57,$ and 0.60 . (b) Normalized calculated optical emission of InGaAs/InP QW's for the same Ga concentrations.

Direct-gap quantum wells have a peak around the band gap and a tail at the high-energy side. In contrast, indirect-gap samples show a low-energy side tail and a PL emission peak close to the Fermi energy. The theoretical PL spectra shown in Fig. 3(b) is sharper than those observed experimentally (Fig. 1). This difference is attributed to other physical mechanisms involved in optical emission, which are not included in our calculation, such as phonon-assisted emission, many-body effects, and particularly carrier localization effects. InGaAs/InP systems present strong inhomogeneous broadening due to the disorder of the ternary alloy, interface fluctuations and defects induced by strain, which give rise to carrier localization. These effects¹¹ change the hole distribution in the energy levels and contribute to changes in the emission line shapes, mainly in the tails intensity strength of the PL spectra.

As an independent experimental verification of our interpretation, we also carried out PL measurements in the sample with $x=0.51$ under an externally applied biaxial strain. To perform these experiments we used a pressure cell based on a plate bending method using a ring and a sphere.^{14–16} The sample is fixed on the ring (see the inset of Fig. 4) and it is bent by pushing the sphere against the back side of the substrate. Using this procedure, a biaxial tensile strain is induced in the film. We used a 8 mm diameter ring and a sample dimension of 1×1 cm². The strain [defined as $(a_{\text{strained}} - a_0)/a_0$, where a_{strained} and a_0 are lattice parameters of the externally strained and unstrained layer, respectively] is calibrated using the PL emission shift from the $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$

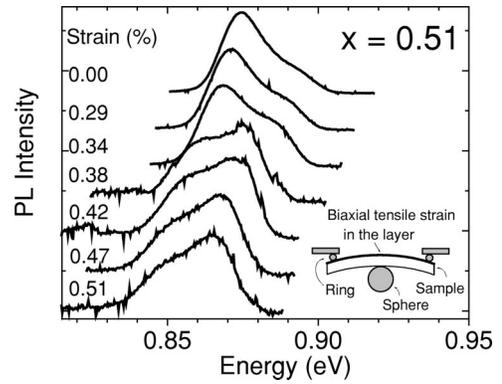


FIG. 4. Normalized photoluminescence spectra at 2 K for the sample with $x=0.51$ under an external biaxial strain. The inset illustrates the scheme of the pressure cell.

buffer layer. The QW is located close to the buffer layer and the variation on the strain strength between these two layers is smaller than the experimental precision. The normalized PL spectra of this sample as a function of the external strain are shown in Fig. 4. There is a strong dependence of the PL line shape with the applied tensile strain. For low tensile strains the tail of the PL emission is located at the high-energy side of the spectrum. However, as the strain is increased the PL emission line shape changes and for high strain values, the tail appears at the low-energy side of the PL spectrum and the peak intensity decreases a factor ~ 3.5 . The decreasing of the PL peak intensity is expected for the indirect band gap structure. The crossover of direct-indirect gap occurs for external strain between 0.34 and 0.38 % (see Fig. 4). Assuming that the crossover strain is $\sim 0.36\%$ the estimated value of the equivalent increasing Ga composition in the ternary alloy is ~ 0.05 . Adding this value to the Ga composition of the sample it gives an alloy with $x=0.56$. It is in good agreement with the theoretical value, $x=0.55$. These results, therefore, are consistent with the theoretical prediction discussed above and unambiguously demonstrate the transition from direct-to-indirect gap in the same sample, driven solely by the biaxial strain.

IV. CONCLUSIONS

In conclusion, we presented experimental and theoretical evidence of the direct-to-indirect band gap structure transition in n -type modulation doped InGaAs/InP quantum wells using optical technique. PL measurements under externally applied tensile biaxial strain confirms the existence of direct-to-indirect band gap crossover.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors gratefully acknowledge M. M. Tanabe for the technical support. This work was supported by CNPq, FINEP, and FAPESP.

- ¹D. Gershoni, J. M. Vandenberg, R. A. Hamm, H. Temkin, and M. B. Panish, *Phys. Rev. B* **36**, 1320 (1987).
- ²D. Gershoni, H. Temkin, J. M. Vandenberg, S. N. G. Chu, R. A. Hamm, and M. B. Panish, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 448 (1988).
- ³D. Gershoni, H. Temkin, M. B. Panish, and R. A. Hamm, *Phys. Rev. B* **39**, 5531 (1989).
- ⁴C. Y.-P. Chao and S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **46**, 4110 (1992).
- ⁵M. Sugawara, N. Okazaki, T. Fujii, and S. Yamazaki, *Phys. Rev. B* **48**, 8102 (1993).
- ⁶P. Michler, A. Hangleiter, A. Moritz, G. Fuchs, V. Härle, and F. Scholz, *Phys. Rev. B* **48**, 11 991 (1993).
- ⁷A. L. C. Triques and J. A. Brum, *Proceedings of the 22nd International Conference on the Physics of Semiconductors, Vancouver, Canada, 1994*, edited by D. J. Lockwood (World Scientific, 1995), Vol. 2, pp. 1328–1331.
- ⁸R. Weihofen, G. Weiser, Ch. Starck, and R. J. Simes, *Phys. Rev. B* **51**, 4296 (1995).
- ⁹J. Dalfors, R. Lundström, P. O. Holtz, H. H. Radamson, B. Monemar, J. Wallin, and G. Landgren, *Appl. Phys. Lett.* **71**, 503 (1997).
- ¹⁰T. J. C. Hosea and G. Rowland, *Supercond. Sci. Technol.* **13**, 207 (1998).
- ¹¹H. A. P. Tudury, E. Ribeiro, F. Iikawa, J. A. Brum, A. A. Bernussi, W. Carvalho, Jr., and A. Gobbi (unpublished).
- ¹²G. Bastard and J. A. Brum, *IEEE J. Quantum Electron.* **22**, 1625 (1986).
- ¹³G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Editions de Physique, Paris, 1992).
- ¹⁴V. V. Baptizanskii, I. I. Novak, and Yu. F. Titovets, *Sov. Phys. Solid State* **21**, 1915 (1979).
- ¹⁵E. Liarokapis and W. Richter, *Meas. Sci. Technol.* **3**, 347 (1992).
- ¹⁶M. L. W. Thewalt, D. A. Harrison, C. F. Reinhart, J. A. Wolk, and H. Lafontaine, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 269 (1997).