

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

E. A. P. DE FÍSICA

**Caracterización de aleaciones semiconductoras por
espectroscopía Raman**

TESIS

para optar el título profesional de Física

AUTORA

Verónica Elsa Espinoza Carrasco

Lima-Perú

2009

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS
(Universidad del Perú, Decana de América)

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

ESCUELA ACADÉMICO PROFESIONAL DE FÍSICA

**“Caracterización de Aleaciones Semiconductoras por
Espectroscopia Raman”**

Por

Dra. Veronica Elsa Espinoza Carrasco

**Tesis presentada a la Escuela Académica de Física de la
Universidad Nacional Mayor de San Marcos como parte de los
pré-requisitos para la obtención del Título de Licenciado en
Física.**

Asesor Responsable: Dr. Whualkuer Enrique Lozano Bartra

LIMA – PERÚ

2009

Agradecimientos

Al Dr. Whualkuer Enrique Lozano Bartra, Jefe del Laboratorio de Óptica No Lineal, por la colaboración y confianza para la realización de este trabajo.

A mis amigas de siempre Lidia, Maribel, Rocio, Rossi.

A los que estuvieron conmigo, en las buenas y en las malas: Cesar, Jaime, Pablo, Andrés, Arnulfo, Eusebio, Vanesa, Yezenha, Mirian, Maria Luisa, Alejandro, Octavio, Giselda, Jorge Huayna, José Moreno, Carlos, Rafael, Justiniano, Elvira, Carolina, Techí, Jazmín, Melissa, Arturo, Luque, José Luis, Cesar, José y a Moisés.

A Javier Gómez y a la Secretaria de la Escuela de Física Pilar Salomón, por la ayuda incondicional.

A Ángel Ortiz por la amistad.

A mis amigos de la UNAC.

A los demás colegas que contribuyeron directa e indirectamente en la ejecución de este trabajo.

Al Vicerrectorado Académico y al Consejo Superior de Investigación por el financiamiento parcial de este trabajo.

Dedico este trabajo a mis padres, Mariella y Santiago,
y también a mis hermanos y sobrinos.

INDICE

	Pagina
CAPITULO 1: Introducción	1
CAPITULO 2: Esparcimiento de Luz por la Materia	5
2.1 Esparcimiento Raman	6
2.1.1 Reglas de Selección	11
2.1.2 Reglas de Selección en Semiconductores III – V	13
2.1.3 Efectos de Desorden	14
2.2 Aleaciones Semiconductores	17
2.2.1 Estructura Cristalina	17
2.2.2 Excitaciones Colectivas	19
2.2.2a Modos Confinados	19
2.2.2b Modos Acoplados	21
CAPITULO 3: Discusión de Resultados	24
3.1 Introducción	24
3.2 Muestras Estudiadas	25
3.3 Experimento Raman	25
3.4 Discusión de Resultados	27
CAPITULO 4: Conclusiones	35
Referencias	37

RESUMEN

En esta tesis se presenta un estudio por espectroscopía Raman de la calidad estructural del cristal y del comportamiento de los modos acoplados en las aleaciones $Al_xGa_{1-x}As$ dopadas con Silicio. Como se sabe, cuando las impurezas son introducidas en las aleaciones $Al_xGa_{1-x}As$: Si pueden ser observados los modos acoplados fonón LO-plasmón. La observación de estos modos es posible porque la simetría translacional del cristal es destruida. Como consecuencia, las reglas de selección son violadas o relajadas y las líneas Raman se tornan anchas y asimétricas. El análisis de la posición y la forma de las líneas espectrales nos permite obtener información sobre la concentración de los portadores y los efectos del desorden estructural del material. Se encontró que la concentración efectiva de portadores medida en Raman difiere de la concentración nominal dada por el fabricante. Esto sugiere posibles pérdidas en el proceso de evaporación del Silicio o al exceso de tiempo de evaporación. Los resultados fueron verificados también por medidas de Capacitancia versus Voltaje para dos muestras. Este trabajo muestra la validez de la técnica Raman en el estudio de heteroestructuras semiconductoras en vista de que los modos acoplados fonón LO – plasmón son muy sensibles al desorden composicional de las muestras.

CAPITULO I

1. INTRODUCCIÓN

Los defectos cristalinos siempre están presentes en cualquier material y los semiconductores no escapan a la regla. Un defecto puede ser originado de diversas maneras, ya sea por una alteración en una región de la muestra causada por una modificación de la red cristalina o por la adición de átomos extraños como el caso de una muestra dopada. Normalmente cuando hablamos de defectos en un cristal, imaginamos que hay solo cambios no deseables en las características del material. Por un lado, la idea es correcta pues los defectos pueden variar y aun controlar las características del material. Un ejemplo de esto, es la localización de los portadores (electrones o huecos) disminuyendo la conductividad esperada de un sistema. Esta es una consecuencia realmente relevante cuando se habla en la producción de dispositivos electrónicos.

De una manera general, la suposición de que una red cristalina es perfectamente periódica; es el punto fundamental para el estudio de sus propiedades electrónicas, mecánicas, de transporte, ópticas, etc. En realidad el concepto de bandas de energía tiene como base fundamental la periodicidad de la red cristalina y de ahí surgen conceptos como masa efectiva o bandas prohibidas de energía (gap). La presencia de defectos provoca una quiebra de la simetría del material produciendo fuentes de esparcimiento, provocando también la quiebra de la coherencia de las funciones de onda que describen el cristal.

Por otro lado, la introducción de dopantes en un cristal semiconductor determina el portador (electrón o hueco) que será responsable por el tipo de conductividad del cristal. La consecuencia tecnológica inmediata de esto, fue la construcción de diodos, transistores, láseres, foto detectores, infinidad de dispositivos electrónicos actualmente disponibles tales como los transistores HEMT'S (High Electron Mobility Transistors), etc.

Los buenos resultados obtenidos en la caracterización de estos materiales y consecuentemente, los éxitos alcanzados en la producción de dispositivos optoelectrónicos a partir de estas estructuras, hacen indispensables entender el proceso vibracional de los fonones que ejercen un papel fundamental en las propiedades de transporte de los portadores de carga.

En la actualidad, los avances en las técnicas de crecimiento de materiales semiconductores tales como MBE (Molecular Beam Epitaxy) o MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition), permiten que un cristal crezca capa por capa sobre un sustrato con gran precisión. Por ello, se justifican los esfuerzos en análisis que visan garantizar la calidad en el crecimiento de heteroestructuras semiconductoras. Los mayores atractivos son las características eléctricas y ópticas modificadas por el confinamiento de portadores que puede ser generado de diferentes maneras como por ejemplo, creciendo super-redes artificiales [1], introduciendo impurezas [2], etc.

La búsqueda de microcircuitos mucho más integrados, que consuman menos energía con costos de producción más bajos, siempre motivó a la industria microelectrónica a reducir cada vez más las dimensiones laterales de los dispositivos producidos. Las modificaciones energéticas debidas al confinamiento son directamente reflejadas en la densidad de estados. Conforme la dimensión del sistema es disminuida, el número de estados accesibles es reducido hasta el límite de dos portadores de carga por nivel electrónico. Considerando el spin, la cuantización total de la energía es alcanzada. Las estructuras obtenidas, son llamadas de baja dimensionalidad; siendo bidimensionales, unidimensionales, cero dimensionales, cuando el movimiento de los portadores queda cuantizado en una, dos o tres direcciones respectivamente. El uso de tales estructuras en dispositivos semiconductores debe permitir la obtención de movilidades y eficiencias ópticas mayores como, por ejemplo, transistores de un único electrón. Otro ejemplo, es el caso de los diodos láser fabricados a partir de pozos cuánticos que tienen una mayor eficiencia y una menor corriente de disparo que el diodo bulk correspondiente [3]. Se infiere de ello que, láseres de puntos cuánticos deberán poseer menores corrientes de disparo y una menor sensibilidad en la frecuencia cuando hay cambios en la temperatura [4,5].

Un ejemplo de estas hetero-estructuras son las aleaciones $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dopadas con Silicio, motivo de nuestro estudio. Las fluctuaciones del potencial electrónico producidas al introducir impurezas destruyen la simetría de traslación dando como resultado un desplazamiento, un ensanchamiento y asimetría de las líneas Raman. Este efecto ya se había observado en la forma de las líneas Raman de los fonones ópticos en materiales semiconductores cristalinos [6]. El desorden lleva a una quiebra de las reglas de selección que permiten que un número mayor de frecuencias participen del esparcimiento. Cada frecuencia contribuye con una lorentziana, centrada en ω y con ancho de línea a media altura Γ . Esta quiebra en las reglas de selección nos permite un conocimiento más amplio de la estructura cristalina o de la perfección de la red. Así, el estudio de fonones en materiales desordenados está relacionado con su calidad cristalina, mientras que el estudio de los plasmones provee información sobre la influencia de las fluctuaciones del potencial cristalino en el transporte electrónico. El objetivo del trabajo es analizar, de forma sistemática, el comportamiento de los modos acoplados fonón LO-plasmón, sus frecuencias, las formas de las líneas Raman (asimetría) y los efectos de desorden debido a la presencia de impurezas.

La caracterización del material, nos permite auxiliar al científico para ajustar parámetros de crecimiento, sistematizándolos con la finalidad de producir materiales con aplicaciones tecnológicas e intentando de esta forma abaratar los costos en la fabricación de dichos materiales. Además el estudio de las muestras se hace importante para una mejor comprensión de los fenómenos físicos de este tipo de estructuras. A través de la espectroscopía Raman se obtiene una respuesta del medio a la radiación incidente e informaciones sobre la interacción fotón–fonón. Comparado a otras técnicas espectroscópicas, el esparcimiento Raman nos permite, dentro de la complejidad de la naturaleza del fenómeno, estimar varias características dinámicas del sistema. Además de las características energéticas contenidas en los procesos (posición de las líneas), los espectros también nos traen información sobre el tiempo de vida (ancho de la línea) y la naturaleza de las excitaciones (forma de la línea). Además, esta técnica presenta ventajas: primero, la rapidez en adquisición de datos, segundo no destruye la muestra, tercero no es necesaria una preparación de la muestra, y por último es posible explorar pequeñas regiones con resolución de 1 μm utilizando un microscopio, etc.

Con esto, se desea verificar la potencialidad de la espectroscopia Raman en el análisis de materiales semiconductores dopados. Esta técnica se muestra como una

poderosa herramienta utilizada en el estudio general de heteroestructuras semiconductoras.

La tesis está dividida de la siguiente manera, la teoría básica del efecto Raman: tratamiento clásico, conservación de energía y momento, reglas de selección es discutido en el capítulo 2. Asimismo, en el capítulo 2 nos referimos al material semiconductor, en nuestro caso, las aleaciones $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dopadas con Silicio e sus excitaciones colectivas. En el capítulo 3 serán descritos el procedimiento experimental, los resultados y discusiones del trabajo. Finalmente, en el capítulo 4 se tienen las conclusiones de este trabajo.

CAPITULO 2

2. Esparcimiento de Luz por la materia

En un medio material la luz puede ser absorbida o esparcida, mientras que una parte es transmitida a través de la muestra. La fracción de luz absorbida puede ser disipada como calor o reemitida con frecuencia diferente. La luz esparcida que es debida a las inhomogeneidades del medio, pueden ser estáticas o dinámicas. Las inhomogeneidades estáticas tales como los defectos, esparcen la luz elásticamente (esparcimiento Rayleigh), mientras las inhomogeneidades dinámicas, tales como fluctuaciones de la densidad de carga debido a la presencia de excitaciones elementales, pueden esparcir la luz inelásticamente.

El esparcimiento inelástico de la luz por ondas acústicas fue propuesto teóricamente por Brillouin y después por Mandelstan [7]. Sin embargo, el esparcimiento inelástico de la luz por las vibraciones moleculares fue observado por primera vez por Chandrasekhara Raman [8], obteniendo el Premio Nobel en 1930 por este descubrimiento. El esparcimiento Raman resonante y no resonante, son herramientas espectroscópicas muy útiles en el análisis de los materiales y en particular para el estudio de semiconductores. De esta forma, esta técnica nos permite estudiar las propiedades de un haz de luz incidente (frecuencia ω_i , vector de onda \vec{k}_i , polarización \vec{e}_i e intensidad I_i) y el de un haz esparcido ($\omega_s, \vec{k}_s, \vec{e}_s, I_s$) a través de la obtención de un espectro Raman. La interpretación de un espectro Raman, consiste en hallar la relación entre estos parámetros y las propiedades del material como es representado en la Figura 1.

En el espectro de radiación esparcida, las nuevas frecuencias son denominadas líneas Raman y constituyen el espectro Raman. El esparcimiento Brillouin es un caso especial de esparcimiento Raman, donde el desvío de frecuencia ($0 - 10 \text{ cm}^{-1}$) es muy pequeño y su análisis exige aparatos experimentales diferentes a los usados en espectroscopia Raman.

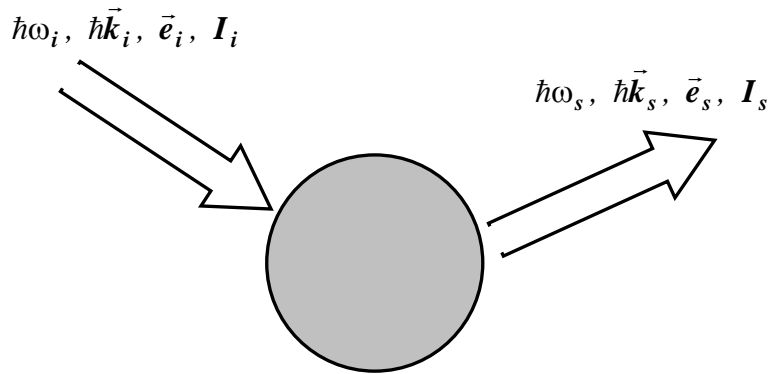


Figura 1: Representación de las cantidades envueltas en un proceso de esparsamiento.

2.1 Esparsamiento Raman

El efecto Raman posee una teoría bastante extensa [9,10,11]. Como en este trabajo estamos interesados en el efecto físico, solo lo trataremos de una forma semi-clásica.

Podemos tratar al cristal como un conjunto de átomos, los cuales sufren vibraciones armónicas en la presencia del campo eléctrico de la luz incidente. Este tratamiento lleva en cuenta la aproximación de Born-Oppenheimer, tratando los electrones y los núcleos atómicos de forma independiente debido a la diferencia entre sus masas [12]. Así, cuando un haz de luz monocromática incide sobre un cristal, los electrones del cristal se desplazan en relación a sus núcleos. Como resultado del desplazamiento atómico, se produce un momento dipolar inducido que actúa como fuente de radiación. Entonces, podemos representar el campo eléctrico de la luz incidente en un punto del espacio como:

$$\vec{E}_i(\vec{r}, t) = \hat{e}_i E_{oi} \exp[i(\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i - \omega_i t)] \quad 2.1$$

donde \hat{e}_i define la polarización de la luz incidente, E_{oi} es la amplitud, ω_i es la frecuencia y \vec{k} es el vector de onda. La polarización \vec{P}_i generada por este campo eléctrico en el medio puede ser descrita como:

$$\vec{P}_i = \chi \vec{E}_i \quad 2.2$$

donde χ es el tensor polarizabilidad (ó susceptibilidad) de la molécula y representa la facilidad con que la nube electrónica puede estar distorsionada. Asumiendo el medio isotrópico, χ puede ser representado por un escalar. Considerando el caso de las vibraciones de la red, tenemos que el desplazamiento atómico en torno de su posición de equilibrio y a lo largo del eje de vibración en un determinado tiempo t puede ser convenientemente descrito en la forma

$$\vec{u}(\vec{r}, t) = \vec{u}_0 \exp[i(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega_o t)] \quad 2.3$$

donde \vec{u}_0 es la amplitud del desplazamiento, ω_o es la frecuencia de la vibración de la red y \vec{q} es su vector de onda. Las variaciones en la configuración atómica del cristal producen cambios en χ . Esto es, χ posee dependencia en \vec{u} . Según la aproximación adiabática $\chi(\vec{u})$ puede ser expandida en serie de Taylor en torno de su posición de equilibrio en la forma:

$$\chi(\vec{u}, \omega_i) = \chi_0(\vec{k}_i, \omega_i) + \left(\frac{\partial \chi}{\partial \vec{u}} \right) \vec{u} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 \chi}{\partial \vec{u}^2} \right) \vec{u}^2 + \dots \quad 2.4$$

donde el segundo término en la ecuación representa la susceptibilidad oscilante inducida por la onda de red $\vec{u}(\vec{r}, t)$.

Substituyendo las ecuaciones 2.1, 2.3 y 2.4 en la ecuación 2.2 obtenemos

$$\begin{aligned} \vec{P}_i = & \chi_0(\vec{k}_i, \omega_i) E_{oi} \exp[i(\vec{k}_i \cdot \vec{r}_i - \omega_i t)] + \\ & \left(\frac{\partial \chi}{\partial \vec{u}} \right) E_{oi} \vec{u}_o \cdot \exp\{i[(\vec{k}_i \pm \vec{q}_i) \cdot \vec{r} - (\omega_i \pm \omega_o) t]\} \hat{e}_i + \dots \end{aligned} \quad 2.5$$

El primer término de la ecuación 2.5 describe el esparcimiento Rayleigh, pues la frecuencia de la radiación esparcida es la misma de la radiación incidente. El segundo

término se caracteriza por la emisión de radiación de frecuencias $\omega_i \pm \omega_o$ que corresponden al esparcimiento Raman de primera orden denominado Stokes (-) y anti-Stokes (+). Los siguientes términos corresponden al esparcimiento Raman de órdenes mayores. En estos casos, la variación de frecuencias es más acentuada [7]. Se puede concluir que el esparcimiento Raman de primer orden proviene de la modulación de la susceptibilidad eléctrica por las excitaciones elementales creadas (Stokes, $\omega_i - \omega_o$) o destruidas (anti-Stokes, $\omega_i + \omega_o$) en el material.

Podemos definir el tensor Raman clásicamente \vec{R} como

$$\vec{R} = \left(\frac{\partial \chi}{\partial \vec{u}} \right)_0 \vec{u} \quad 2.6$$

donde aproximamos $\vec{q} = 0$, para el esparcimiento de un fonón (ver leyes de conservación). Haciendo $\vec{Q} = \vec{u} / |\vec{u}|$ el vector unitario

$$\vec{R} = \left(\frac{\partial \chi}{\partial \hat{Q}} \right)_0 \hat{Q}(\omega_o) \quad 2.7$$

El proceso Raman de primera orden en semiconductores puede ser descrito cuánticamente de la siguiente forma: Un fotón incidente (ω_i, \vec{k}_i) excita un par electrón – hueco que interactúa con la red cristalina aniquilando o creando un fonón (ω_o, \vec{q}_o), y

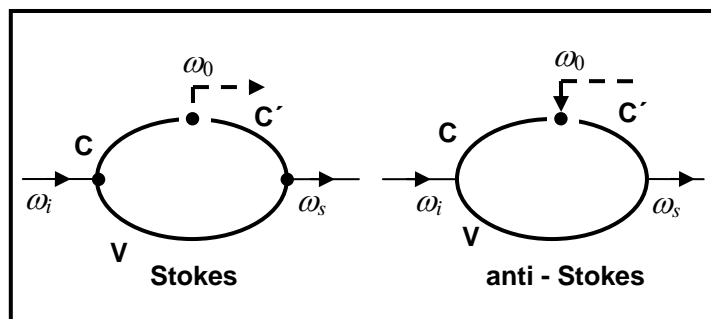


Figura 2: Diagramas de Feynman para los procesos Stokes y anti-Stokes.

luego decae un fotón con frecuencia y vector de onda diferente (ω_s, \vec{k}_s) . Estos procesos pueden ser representados a través de los Diagramas de Feynman, como se observan en la Figura 2.

La conservación de la energía exige que:

$$\hbar\omega_s = \hbar\omega_i \pm \hbar\omega_0 \quad 2.8$$

donde ω_i es la frecuencia del fotón incidente, ω_s es la frecuencia del fotón esparcido. ω_0 es la frecuencia del fonón, el signo (+) corresponde al proceso anti-Stokes y el signo (-) corresponde al proceso Stokes. Caso exista simetría translacional, como en un cristal perfecto, la ley de conservación del momento del cristal asume la forma $\vec{k}_s = \vec{k}_i \pm \vec{q}$, y es representada en la figura 3.

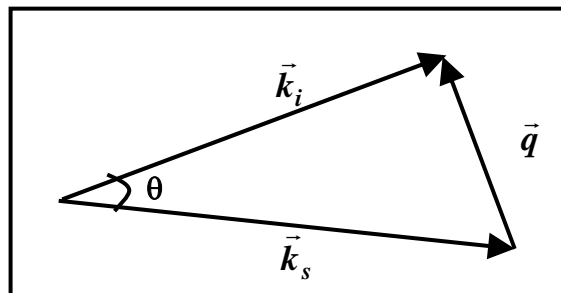


Figura 3: Cinemática del esparcimiento inelástico de luz.

El vector de onda del fonón está relacionado con su longitud de onda en el vacío por la ecuación

$$|\vec{k}_{i,s}| = \frac{2\pi}{\lambda_{i,s}} n_{i,s} \quad 2.9$$

donde $n_{i,s}$ es el índice de refracción del medio, por lo tanto el máximo valor posible para el momento del fonón envuelto en el esparcimiento por luz es:

$$|\vec{q}_j| = \frac{2\pi}{\lambda_s} n_s + \frac{2\pi}{\lambda_i} n_i \approx 10^6 \text{ cm}^{-1} \quad 2.10$$

para una longitud de onda típica $\lambda_{i,s} = 5145 \text{ \AA}$ y $n_{i,s} \approx 4$. Este valor es mucho menor, por un factor de 100, que la extensión de la Zona de Brillouin de un compuesto III - V

$$0 \leq |\vec{q}_j| \leq \frac{2\pi}{a_o} \approx 10^8 \text{ cm}^{-1} \quad 2.11$$

(a_o es el parámetro de red). Por lo tanto, solamente los fonones ópticos del centro de la zona de Brillouin, o muy próximo puede participar del proceso de esparcimiento de primera orden. Es usual la aproximación $\vec{q} \approx \vec{0}$.

En los procesos de segunda orden en que dos fonones participan del esparcimiento (ver Figura 4), las reglas de conservación de energía y momento son fácilmente expandidas para las sumas de momento y energía:

$$\hbar\omega_s = \hbar\omega_i \pm (\hbar\omega_{01} \pm \hbar\omega_{02}) \quad 2.12$$

$$\vec{k}_s = \vec{k}_i \pm (\vec{q}_{01} + \vec{q}_{02}) \quad 2.13$$

De acuerdo con la ecuación se nota que los vectores no son necesariamente pequeños como en el esparcimiento de primer orden, sino que también pueden tener valores por toda la zona de Brillouin (Z.B.) ya que $|\vec{q}_{01}| \approx -|\vec{q}_{02}|$ también satisface la última

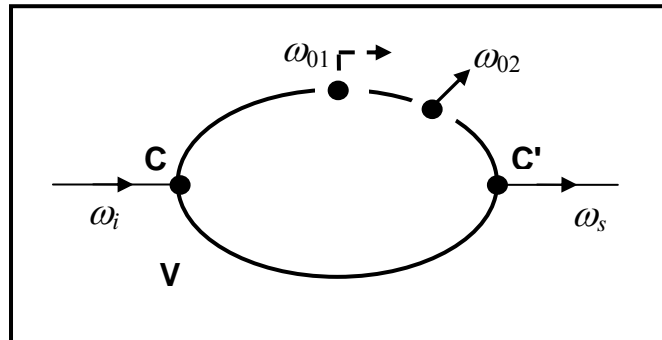


Figura 4: Diagrama de Feynman para el caso de dos fonones.

ecuación. El espectro de segunda orden presenta un número mayor de estructuras y singularidades, pero la intensidad es mucho menor.

2.1.1 Reglas de Selección

Durante el esparcimiento, un cuanto de luz incidente es aniquilado y un cuanto de luz esparcido es emitido a través de la creación (proceso Stokes) o aniquilación (proceso anti-Stokes) de un (o más) cuanto de excitación cristalina. Cuánticamente este proceso envuelve fluctuaciones espaciales y temporales de la susceptibilidad eléctrica, que son asociadas con las excitaciones cristalinas. En el caso de esparcimiento de luz por excitaciones colectivas como fonones, el operador susceptibilidad eléctrica puede ser expandido en potencias de las coordenadas normales de los modos. Los coeficientes de esta expansión son los tensores Raman que, de hecho, describen la interacción fotón-fonón.

Por analogía, al tratamiento clásico de esparcimiento de la luz por modos rotacionales de la molécula, estos coeficientes son normalmente expresados en términos de la “susceptibilidad Raman” o “derivadas de la susceptibilidad” en una forma general dada por la ecuación 2.7.

Entonces, la sección eficaz de choque diferencial por una excitación cristalina de frecuencia ω_v es expresada por:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\omega_s} = \frac{\omega_i \omega_s^3}{(4\pi\epsilon_0)^2 c^4} V \left| \vec{e}_s \cdot \vec{R} \cdot \vec{e}_i \right| \frac{\hbar}{2\omega_v} [n(\omega_v) + 1] g(\omega_v) \quad 2.14$$

donde V es el volumen de esparcimiento, \vec{e}_s y \vec{e}_i son los vectores de polarización de los haces esparcidos e incidente, $n(\omega_v)$ es el factor estadístico de Bose-Einstein:

$$n(\omega_v) = \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_v}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1} \quad 2.15$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta.

Una forma de línea conveniente, es la función lorentziana (en analogía al oscilador armónico amortiguado, debido al hecho de que el cristal siempre contiene defectos intrínsecos-dislocaciones, impurezas, etc.), que se puede escribir como:

$$g(\omega_\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_\nu}{(\omega_\nu - \omega)^2 + \left(\frac{\gamma_\nu}{2}\right)^2} \quad 2.16$$

donde γ_ν es el factor de amortiguamiento de fonón. Debido a su tiempo de vida finito, el esparcimiento solo es observado sí, además de la selección de momento y energía, también existe simetría de la excitación

$$d\sigma = \left| \vec{e}_s \cdot \vec{R} \cdot \vec{e}_i \right| \neq 0 \quad 2.17$$

Esta condición es analizada según las simetrías del tensor \vec{R} y genera las reglas de selección relacionando el tipo de excitación, la orientación del cristal y la geometría del esparcimiento.

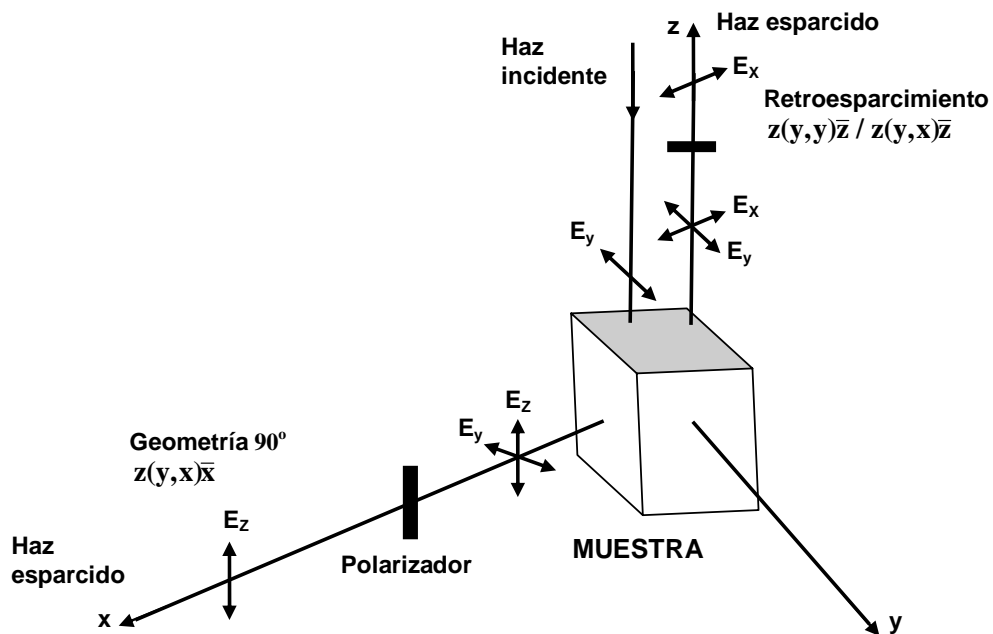


Figura 5: Representación esquemática de la geometría del esparcimiento usando la notación $\vec{k}_i(\hat{e}_i, \hat{e}_s)\vec{k}_s$ donde \vec{k}_i y \vec{k}_s son las direcciones del fotón incidente y esparcido, \hat{e}_i y \hat{e}_s son las polarizaciones de los fotones incidente y esparcido respectivamente.

Utilizaremos en este trabajo la notación de Porto para describir la geometría del esparcimiento, que puede ser determinada por cuatro vectores: \vec{k}_i y \vec{k}_s (son las direcciones del fotón incidente y esparcido respectivamente) y \vec{e}_i y \vec{e}_s (son las polarizaciones del fotón incidente y esparcido respectivamente). Estos cuatro vectores son generalmente representados como $\vec{k}_i(\vec{e}_i, \vec{e}_s)\vec{k}_s$. La notación $z(y, x)\bar{z}$, por ejemplo, indica que la excitación de la luz incidente sobre la muestra está en la dirección z y posee polarización a lo largo de y , mientras que la luz esparcida fue detectada a lo largo del eje z y polarizada a lo largo del eje x , como mostrado en la figura 5.

2.1.2 Reglas de Selección en Semiconductores III-V

En semiconductores tipo blanda de zinc, tales como GaAs, AlAs, etc. Las reglas de selección son descritas de la siguiente forma: el fonón óptico del centro de la Zona Brillouin (ZB) posee simetría Γ_4 (o equivalentemente Γ_{15}). Esta representación es triplemente degenerada y sus tres componentes pueden ser denotados por X, Y, Z . En este caso particular, es interesante tratar cada una de las tres componentes, como proyecciones iguales a los desplazamientos relativos de dos átomos de la celda unitaria a lo largo de los ejes cristalográficos [7, 13]. Este tensor posee apenas una componente linealmente independiente, que denotamos por d . Las componentes no nulas del tensor Raman correspondiente son dependientes del desplazamiento causado por el fonón y son diferentes para cada dirección debido al hecho que las constantes elásticas son diferentes. Para un fonón óptico polarizado a lo largo de la dirección X , su tensor $\vec{R}(X)$ tendrá apenas dos componentes no nulas $\vec{R}_{yz}(X) = \vec{R}_{zy}(X) = d$. Podemos representar $R(X)$ por una matriz 3 x 3, tal que [14]

$$\vec{R}(X) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d \\ 0 & d & 0 \end{bmatrix}$$

Análogamente para los mismos fonones ópticos polarizados en las direcciones Y y Z tenemos:

$$\vec{R}(Y) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & d \\ 0 & 0 & 0 \\ d & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \vec{R}(Z) = \begin{bmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Como se ha discutido anteriormente, la intensidad Raman es una función de la polarización de la luz incidente \vec{e}_i y de la luz esparcida \vec{e}_s , relativa a los ejes cristalinos, conforme la ecuación 2.17. Debido al carácter polar de estos materiales [15], los modos $\vec{q} \approx 0$ son degenerados. Los fonones son designados como modo longitudinal óptico (LO) de frecuencia más alta y transversal óptico (TO) de menor frecuencia. Por lo tanto, dependiendo de la configuración del esparcimiento los modos LO o TO, o ambos pueden ser observados, por lo que las reglas de selección pueden ser empleadas para evaluar importantes parámetros del material a estudiar. Por ejemplo, la observación de un modo TO en una configuración en que está prohibido puede estar relacionada con la calidad cristalina del cristal. La Tabla 1 muestra las reglas de selección para la geometría de retro-esparcimiento en semiconductores tipo blanda de zinc.

	[100]	[110]	[111]
LO	permitido	prohibido	permitido
TO	prohibido	permitido	permitido

Tabla 1: Reglas de Selección para retro-esparcimiento de semiconductores ideales tipo diamante y blanda de zinc.

2.1.3 Efectos de Desorden

El espectro Raman del material desordenado difiere del espectro Raman del material cristalino de una forma muy clara. El espectro cristalino posee picos simétricos, estrechos (con anchos de típicamente $2 - 5 \text{ cm}^{-1}$) y bien definidos (Figura 6). Ya el material desordenado, de cualquier naturaleza, posee un espectro bien característico: en general presenta un número mayor de estructuras, sus picos son asimétricos, son más anchos ($5 - 100 \text{ cm}^{-1}$) y desplazados en frecuencia (Figura 7). El número mayor de estructuras en los espectros, se debe a la activación de los modos por desorden (quiebra en la simetría). Este ensanchamiento, asimetría y desplazamiento en frecuencia fueron debidamente explicados por Shuker y Gammon [16] como siendo una representación de

la densidad de estados vibracionales. Shuker y Gammon llegaron a esta conclusión calculando la función de correlación de la susceptibilidad eléctrica en el tiempo y en el espacio, y mostraron que la quiebra de simetría translacional hace que la regla de selección del momento usual $\vec{q} = \vec{0}$ no sea más válida, permitiendo que otros modos vibracionales ($\vec{q} \neq \vec{0}$) participen del esparcimiento.

La función de correlación de susceptibilidad puede ser interpretada como una función de correlación de los desplazamientos de los átomos de sus posiciones de equilibrio (de la red) significando por lo tanto, una correlación de los fonones. Lo que difiere del material amorfo es la dimensión de la región de correlación. En la espectroscopia realizada con luz visible, cualquier dimensión de correlación que sea superior a $\lambda_L/10$ en realidad se comporta como si se extendiese sobre todo el cristal. Este hecho torna la regla de selección $\vec{q} = \vec{0}$ una buena aproximación para cristales reales que, por mejor que sea su calidad de crecimiento, siempre tiene defectos, como dislocaciones e impurezas. Pero también impone una limitación superior, típicamente del orden de $\lambda_L/10 \sim 400$.

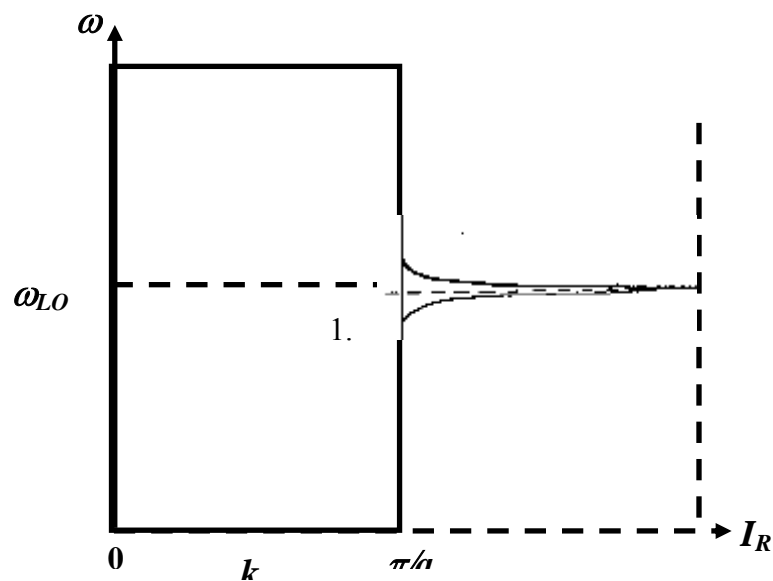


Figura 6: Forma de la línea Raman en material cristalino GaAs

En general clasificamos dos casos distintos de desorden:

1. Menor desorden: el espectro Raman de primera orden aún se asemeja a la estructura del material cristalino, pero hay algunos modos vibracionales adicionales (activados por desorden) y una asimetría de estos modos. Puede ser tratado por perturbación. En este caso, las transiciones adicionales contribuyen al espectro Raman con frecuencias definidas por la relación de dispersión. Por ejemplo, como normalmente los semiconductores presentan dispersión negativa próxima al centro de la ZB, lo que debe ocurrir es un desplazamiento de la posición de las líneas para energías más bajas [17]. En el caso del plasmón que presenta dispersión positiva próximo al centro de la ZB, el desplazamiento de la posición de la línea debe ocurrir para energías más altas [17]. Esto puede ser visto en la Figura 7.
2. Mayor desorden: existe una activación de todos los modos vibracionales, el espectro representa una densidad de estados bastante diferente a la densidad de estados del material cristalino; ocurre una mezcla de procesos de múltiples órdenes. Este caso no puede ser tratado por perturbaciones.

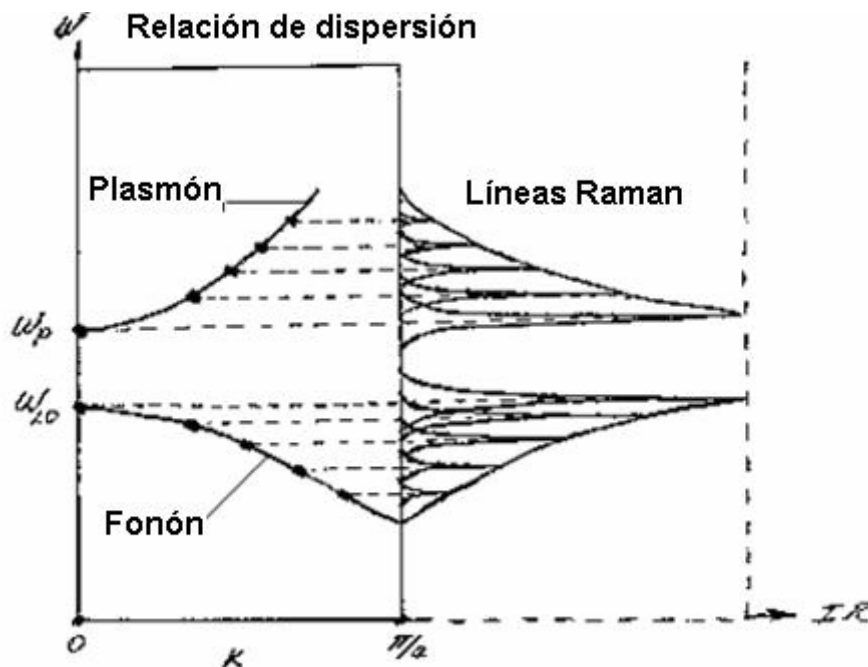


Figura 7: Forma de la línea Raman en aleaciones semiconductoras.

2.2 Aleaciones Semiconductoras

2.2.1 Estructura Cristalina

Los semiconductores GaAs, AlAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ son ejemplos de compuestos del grupo III-V con simetría del grupo espacial T_d . La aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ es formada por los compuestos binarios de AlAs y GaAs. Ambos poseen red tipo zinc-blende, con un átomo en $(0,0,0)$ y otro en $(1/4, 1/4, 1/4)$ del cubo unitario fcc no primitivo. La Figura 8 muestra la celda unitaria de la estructura zinc-blende de la aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

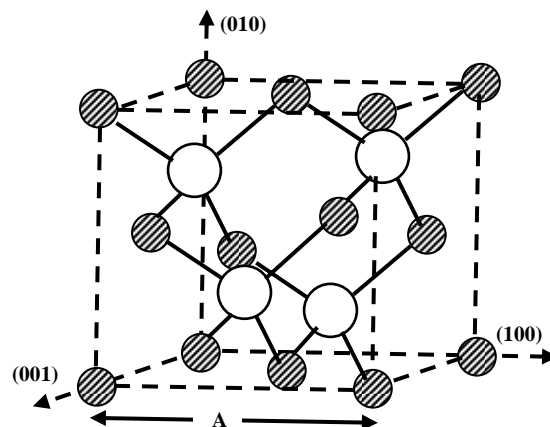


Figura 8: Estructura de la red cristalina tipo zincblende [18]

Las aleaciones semiconductoras $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ son de gran importancia para la fabricación de dispositivos electrónicos y opto-electrónicos de alta velocidad debido a la pequeña diferencia entre los parámetros de red de los materiales GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($0 \leq x \leq 1$) de alrededor del 0.15 % a la temperatura de 300K lo que significaría una baja concentración de estados interfaciales.

El acoplamiento polar entre electrones y fonones ocurre por la diferencia entre las cargas de los iones (cargas positivas y negativas). En el caso de un fonón óptico, los diferentes iones en el cristal oscilan en direcciones opuestas [19, 20]. El movimiento de cargas de signos contrarios en oposición de fase da origen a una polarización a la cual generalmente está asociada un campo eléctrico [21]. Este campo eléctrico produce una separación entre los modos longitudinales y transversales ópticos, dados por la expresión:

$$\omega_{LO}^2 = \frac{\epsilon_0}{\epsilon_\infty} \omega_{T0}^2 \quad 2.18$$

que es llamada la relación de Lyddane- Sachs- Teller y establece una dependencia entre las frecuencias de los modos transversal (ω_{TO}) y longitudinal (ω_{LO}) ópticos, con las constantes dieléctricas estática y dinámica. Este tipo de acoplamiento polar ocurre solo para fonones longitudinales ópticos (LO) y no para fonones transversales ópticos. Esto se debe a que solo los fonones LO son capaces de generar campos eléctricos cuando ellos vibran.

Las frecuencias de los fonones en los semiconductores GaAs, AlAs y en la aleación $Al_xGa_{1-x}As$, son conocidas para diferentes temperaturas y son mostradas en la Tabla 2. Tales frecuencias fueron utilizadas para hacer el reconocimiento de las líneas Raman del espectro de cada muestra analizada en este trabajo, como se verá en el siguiente capítulo.

Punto Critico	Fonón	GaAs		AlAs
		a 296 K	a 12 K	A 300 K
Γ	TO	267	271	362
	LO	285	293	400
X	TA	79	82	103
	LA	227	225	227
	TO	252	257	336
	LO	241	240	387
L	TA	62	63	81
	LA	209	207	209
	TO	261	264	
	LO	238	242	390

Tabla 2: Frecuencia de fonones a diferentes temperaturas en diferentes puntos de la celda unitaria para los materiales GaAs y AlAs [22].

Punto Crítico	Fonón	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
Γ	TO (tipo GaAs)	$268-14x$
	LO (tipo GaAs)	$292-38x$
	TO (tipo AlAs)	$358+4x$
	LO (tipo AlAs)	$358+71x-26x^2$

Tabla 3: Frecuencia de fonones a diferentes temperaturas en el punto Γ de la celda unitaria para la aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [22].

2.2.2 Excitaciones Colectivas

En semiconductores dopados, además de las excitaciones colectivas atómicas (fonones) existen excitaciones colectivas del gas de electrones (plasmones) que también pueden participar del proceso de esparcimiento y dar información no solo sobre el espectro de excitación del gas de electrones sino también sobre la interacción electrón – fonón. A continuación se explicará un poco sobre los tipos de modos encontrados en los espectros Raman.

2.2.2a MODOS CONFINADOS

Así como los electrones en un pozo de potencial, los fonones también pueden ser confinados en una cierta capa limitada por regiones donde sus energías no son permitidas.

Observemos por ejemplo en la Figura 9, las curvas de dispersión de los fonones para el caso GaAs y AlAs, componentes comunes en la heteroestructura semiconductor **mencionada en este trabajo**. Podemos notar la existencia de modos acústicos propagantes en un intervalo de frecuencia bastante amplia en ambos materiales. Por lo tanto, en un sistema compuesto por la unión de dos materiales raramente existirá un modo acústico que se propague solo en el GaAs o en el AlAs, es decir, los fonones acústicos pueden propagarse a través de la heteroestructura.

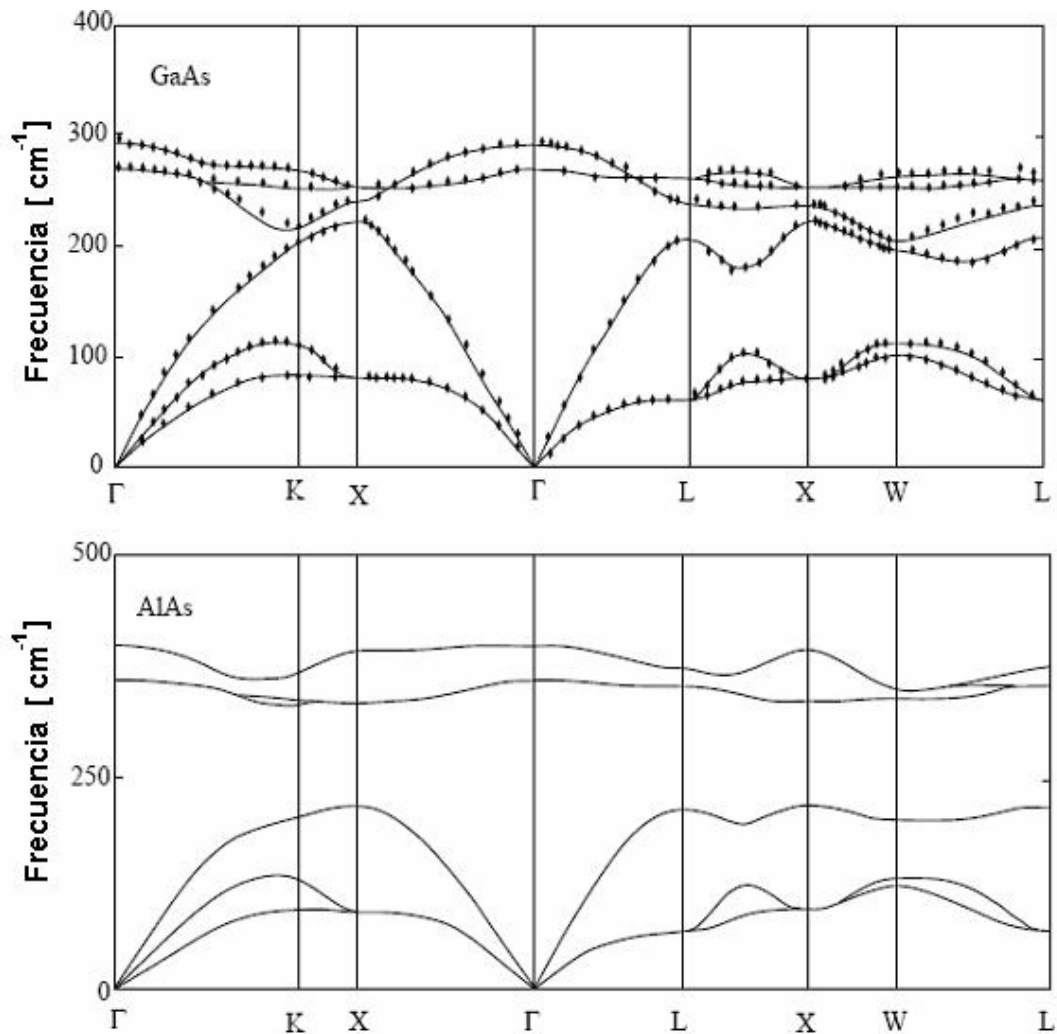


Figura 9: Relación de dispersión de los fonones para GaAs y AlAs "bulk" [7]

Por otro lado, se observa que los modos ópticos son formados por bandas bastante estrechas centradas en frecuencias distintas en los dos materiales. Esto significa que los modos ópticos que se propagan en el GaAs con frecuencias en torno de 280 cm^{-1} no son permitidos en el AlAs, cuyos modos ópticos están confinados en una región centrada en 380 cm^{-1} . Por lo tanto, existen modos "tipo GaAs" que son confinados por las barreras del AlAs y de la misma manera las capas de GaAs actúan como barreras para los modos "tipo AlAs".

Como en el caso de los electrones en un pozo de potencial, podemos imponer la condición de contorno de los modos ópticos confinados para que tengan amplitud de vibración nula en las interfaces entre los compuestos constituyentes de la heteroestructura. Debido a ello, la frecuencia de los modos confinados puede ser obtenida como función de los vectores de onda discretos, dados por la relación:

$$k_m = \frac{\pi}{d_{GaAs,AlAs}} m, \quad m = 1,2,3,\dots \quad 2.19$$

donde $d_{GaAs,AlAs}$ es el espesor de la capa en que los modos están confinados.

Diferentemente de los modos que se propagan libremente por el material, los modos ópticos confinados poseen k diferente de cero, por eso la frecuencia Raman de esos modos dependen fundamentalmente de la curva de dispersión del material en que están confinados.

2.2.2.b MODOS ACOPLADOS

Dopando uniformemente un semiconductor, en adición a los modos vibracionales de las capas constituyentes, nuevos modos pueden ser observados debido a la presencia de portadores libres. Estos portadores libres forman un gas de electrones denominado plasma que interactúa vía atracción coulombiana. La consecuencia física de esta fuerza de largo alcance, es una oscilación de longitud de onda grande en la densidad de la nube electrónica. Por lo tanto, en el límite de grandes longitudes de onda, los electrones oscilan colectivamente a una frecuencia ω_p (frecuencia de plasma). A un cuanto de esta oscilación se le da el nombre plasmón.

En semiconductores polares, el campo eléctrico asociado a los fonones LO interactúa con el campo eléctrico producido por los plasmones formando los modos acoplados fonón LO – plasmón.

De acuerdo con la hipótesis de Varga [23] la función dieléctrica del sistema acoplado fonón LO-plasmón, puede ser escrita en la forma

$$\varepsilon(\omega, q \rightarrow 0) = \varepsilon_\infty + \varepsilon_l(\omega) + \varepsilon_e(\omega) \quad 2.20$$

donde ε_∞ es la constante dieléctrica de altas frecuencias $\varepsilon(\omega \rightarrow \infty)$, ε_l y ε_e son las contribuciones de la red y de los electrones, respectivamente. En el límite de grandes longitudes de onda, estas contribuciones están dadas por [24]

$$\varepsilon_l(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\Gamma_l \omega} \quad 2.21$$

$$\varepsilon_e(\omega) = \varepsilon_\infty \frac{\omega_p^2}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i\gamma_e \omega} \quad 2.22$$

donde ω_{LO} y ω_{TO} son las frecuencias de los fonones LO y TO respectivamente, ω_{ij} es la frecuencia de transición inter-subbanda. En este trabajo $\omega_{ij} \rightarrow 0$ pues no fue considerado este tipo de transición. Los parámetros Γ_l y γ_e son las constantes de amortiguamiento fenomenológicas relativas a las vibraciones de la red y de los electrones, resultantes de muchas interacciones anarmónicas de los fonones y de los electrones con varias excitaciones elementales del semiconductor. Estas constantes son las responsables por el alargamiento de las líneas de los espectros Raman.

En el límite, la frecuencia de plasma ω_p satisface la siguiente relación

$$\omega_p^1(\vec{q} \approx 0) = 4\pi \frac{Ne^2}{\epsilon_\infty m^*} \quad 2.23$$

donde N y m^* corresponden a la densidad y masa efectiva de los electrones respectivamente.

Para el caso del GaAs (tipo n), despreciando las constantes de amortiguación Γ_l y γ_e , las frecuencias de los modos acoplados son obtenidas haciendo $\text{Re}\{\epsilon(\omega)\} = 0$. Luego, la solución de la primera ecuación es dada por

$$\omega_\pm^1 = \frac{1}{2} \left\{ (\omega_p^2 + \omega_{LO}^2)^2 \pm [(\omega_p^2 - \omega_{LO}^2) + 4\omega_p^2(\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2)]^{1/2} \right\} \quad 2.24$$

En el caso de la aleación $Al_xGa_{1-x}As$ dopada con Si, la función dieléctrica en el límite de grandes longitudes de onda, es dada también por la ecuación 2.20, pero en este caso debemos considerar la contribución del GaAs y del AlAs. De esta forma, la función dieléctrica total ϵ es dada por:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty \frac{\omega_{LO1}^2 - \omega_{TO1}^2}{\omega_{TO1}^2 - \omega^2 - i\Gamma_{l1}\omega} + \epsilon_\infty \frac{\omega_{LO2}^2 - \omega_{TO2}^2}{\omega_{TO2}^2 - \omega^2 - i\Gamma_{l2}\omega} + \epsilon_\infty \frac{\omega_p^2}{\omega_{ij}^2 - \omega^2 - i\gamma_e\omega} \quad 2.25$$

En este caso, las frecuencias de los modos acoplados son obtenidas haciendo $\text{Re}\{\epsilon(\omega)\} = 0$. Luego, la solución viene dada por:

$$\omega^3 - (\omega_{LO1}^2 + \omega_{LO2}^2 + \omega_p^2)\omega^2 + \left(\omega_{LO1}^2 \omega_{TO2}^2 + \omega_{TO1}^2 \omega_{LO2}^2 - \omega_{TO1}^2 \omega_{TO2}^2 + \omega_{TO1}^2 \omega_p^2 + \omega_{TO2}^2 \omega_p^2 \right) \omega - \omega_{TO1}^2 \omega_{TO2}^2 \omega_p^2 = 0 \quad 2.26$$

En estas aleaciones $Al_xGa_{1-x}As:Si$ existen dos tipos de fonón LO: los que son debidos a las capas del GaAs (tipo GaAs) y los que son debidos a las capas del AlAs (tipo AlAs). Estos fonones se acoplan con los electrones libres produciendo dos modos ópticos acoplados ω_1^+ y ω_2^+ , el primero de ellos debido al acoplamiento de los fonones LO del GaAs mientras que el segundo se origina de los fonones LO del AlAs.

CAPITULO 3

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

3.1 INTRODUCCIÓN

Una de las premisas para la producción de dispositivos opto-electrónicos, es sin lugar a duda la obtención de materiales de muy buena calidad para fabricarlos con las características deseadas. La heteroestructura $Al_xGa_{1-x}As$ ha demostrado ser uno de los más útiles debido a la gran variedad de aplicaciones. Por ejemplo, las películas epitaxiales de estos materiales se usan en la elaboración de diodos láser, foto detectores, dispositivos ultra-rápidos como los HEMT's (High Electrón Mobility Transistors), entre otras aplicaciones.

Con el desarrollo de técnicas de crecimiento altamente refinadas como MBE (Molecular Beam Epitaxy) es posible controlar el crecimiento de cristales a escala atómica y alterar las propiedades químicas, estructurales, electrónicas y ópticas de estos materiales, lo que es de vital importancia tanto para la comprensión de fenómenos físicos observados como para la fabricación de dispositivos opto-electrónicos.

Aún cuando sobre la aleación de $Al_xGa_{1-x}As$ se han publicado un gran número de artículos, en el crecimiento de películas epitaxiales se presentan importantes dificultades debido a efectos de segregación. Es por ello, que el control de la concentración de portadores se hace importante.

Por otro lado, la espectroscopía Raman constituye una técnica muy interesante en la investigación de heteroestructuras ya que permite estudiar la conductividad eléctrica y los efectos de localización en estructuras semiconductoras periódicas sin la aplicación del campo eléctrico externo, lo que podría perturbar el potencial electrónico periódico. De esta manera, el objetivo de nuestro trabajo es analizar, de forma sistemática, el comportamiento de los modos acoplados fonón LO-plasmón, sus frecuencias, las formas de las líneas Raman (asimetría) y los efectos de desorden debido a la presencia de impurezas. Además, esta técnica presenta otras ventajas, tales como, la rapidez en adquisición de datos, no es destructiva, no es necesario hacer otro tratamiento a muestra.

3.2 MUESTRAS ESTUDIADAS

En este trabajo fueron analizadas aleaciones $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dopadas con Silicio crecidas en el Laboratorio M.B.E. del Instituto de Física de la USP de Sao Carlos. Las muestras fueron crecidas por Epitaxia de Haces Moleculares entre 580 y 600 °C de temperatura, y con una tasa de crecimiento de 0,7 monocapas por segundo. Las muestras tienen un espesor de 1 μm y fueron depositadas sobre un substrato de GaAs (100) con Aluminio de $x = 0.2$ de concentración y con diferente concentración de portadores libres N . Las medidas fueron realizadas a baja temperatura ($T \approx 8 \text{ K}$) con la finalidad de obtener líneas más intensas y con mayores definiciones.

En la Tabla 4, se detallan las muestras analizadas indicando las concentraciones nominales de portadores de carga dada por el fabricante:

$\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}:\text{Si}$	Concentración nominal de portadores (N)
895	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
908	$1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
905	$2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

Tabla 4: Concentración nominal de las muestras dadas por el fabricante.

3.3 EXPERIMENTO RAMAN

Como la intensidad del esparcimiento Raman es muy débil comparada a la intensidad de la luz de excitación (del orden de 10^{-8} de la radiación incidente), se requiere una fuente de luz monocromática muy intensa, un sistema dispersivo y detectores altamente sensibles para detectar la señal. La fuente de luz generalmente utilizada es un láser, debido a su alta potencia, resolución y estabilidad. La elección de un determinado láser, depende de las frecuencias que se desea utilizar, así como la potencia que se requiere en el experimento Raman.

La fuente de luz utilizada en este trabajo, fue un láser de Argón operando en la longitud de onda central de 5145 Å. Este láser emite un haz colimado de 1,0 mm de diámetro ajustado para proveer una potencia local de 200 mW. En la experiencia, se usó una lente cilíndrica para focalizar el eje en forma de línea, y así reducir la densidad de la potencia incidente para minimizar el calentamiento de la muestra.

Los sistemas dispersivos disponibles para experimentos Raman son los monocromadores dobles o triples debido al alto rechazo de luz cuando comparado a los monocromadores simples. En este trabajo, se utilizó un monocromador triple Jobin-Yvon T64000 con rejillas holográficas de 1800 líneas/mm para la detección en la región de longitudes de onda entre 450 y 950 nm. El conjunto T64000 funciona en los modos macro-Raman y micro-Raman. En el modo micro-Raman posee un microscopio acoplado con objetivas de 50× de largo alcance (11 mm).

Existen dos tipos de detectores que se pueden usar en estos experimentos: la cámara CCD y la foto-multiplicadora. La elección de ellos, depende de las características deseadas en el experimento. Por ejemplo, la fotomultiplicadora tiene mayor sensibilidad, mayor tolerancia al ruido y es posible hacer largos tiempo de adquisición. Mientras que la cámara CCD, tiene mayor velocidad de adquisición, menor sensibilidad y es capaz de medir una región entera del espectro (aunque es más afectado por fuentes de ruido como los rayos cósmicos). La lectura de la intensidad de luz, fue realizada con

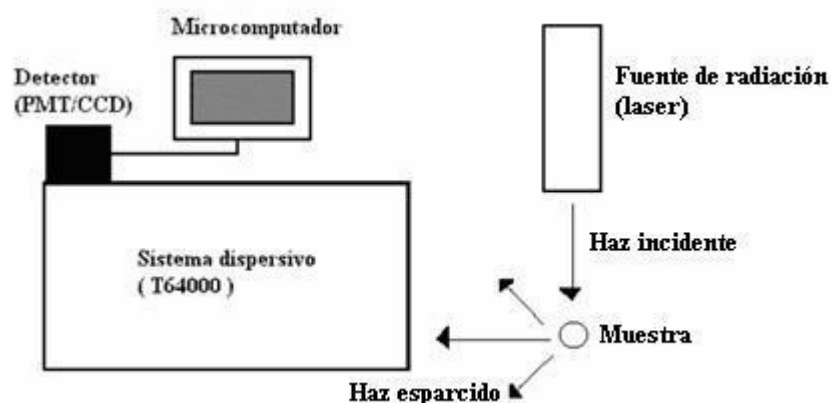


Figura 10: Representación del conjunto experimental empleado en espectroscopia Raman.

un sistema CCD acoplado a un microcomputador responsable por la adquisición y almacenamiento de datos. La figura 10 muestra el diagrama esquemático del espectrómetro Raman. Este sistema puede operar en una de dos configuraciones: aditiva o substractiva. En este trabajo se uso solamente la configuración substractiva. En la configuración substractiva, los monocromadores triples son dispuestos de tal forma que un monocromador deshace lo que el anterior hizo (substracción de efectos), de tal forma que separa la luz filtrada para análisis. Esta configuración es representada en la Figura 11.

Para obtener líneas Raman más intensas y con mayor definición, las medidas de macro-Raman fueron realizadas a baja temperatura ($T \sim 10$ K). Para esto, fue usado un criostato de ciclo cerrado de Helio líquido. Las medidas Raman fueron realizadas usando la geometría de retro-esparcimiento.

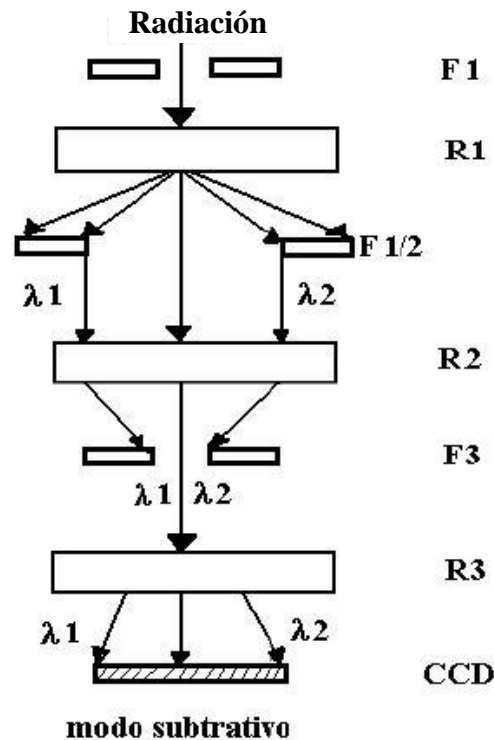


Figura 11: Configuración del modo subtrativo del espectrómetro T64000. F1, F1/2, F3 son las aberturas de entrada, intermedia y salida respectivamente. R1, R2 y R3 son las redes.

3.4 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este trabajo, fueron analizadas tres muestras de aleaciones $Al_{0,2} Ga_{0,8}As:Si$. En estas muestras se puede observar efectos de desorden composicional debido a que se ha variado la concentración electrónica mientras la concentración de Aluminio se mantuvo fija ($x = 0,2$). Los espectros son mostrados en las Figuras 12, 13 y 14.

Las líneas indexadas por ω_1^+ y ω_2^+ , corresponden a los modos acoplados fonón LO-plasmón del tipo $GaAs$ y $AlAs$ respectivamente. Así mismo fue observado un modo LO

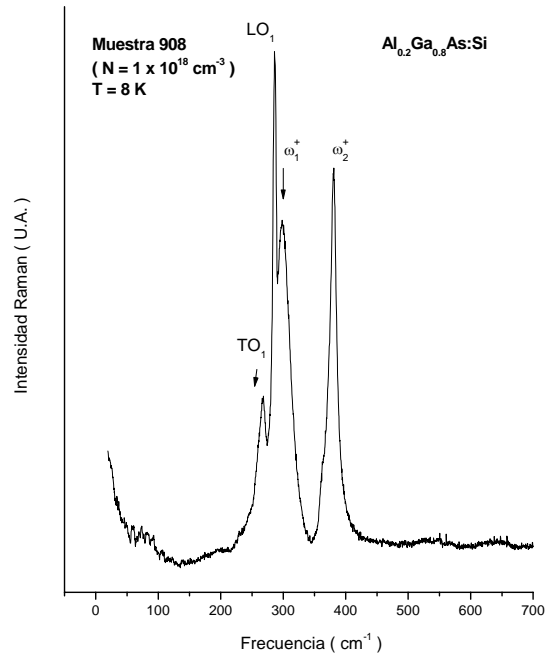


Figura 12: Espectro Raman de las aleaciones $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}:\text{Si}$ con densidad electrónica igual a $N = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

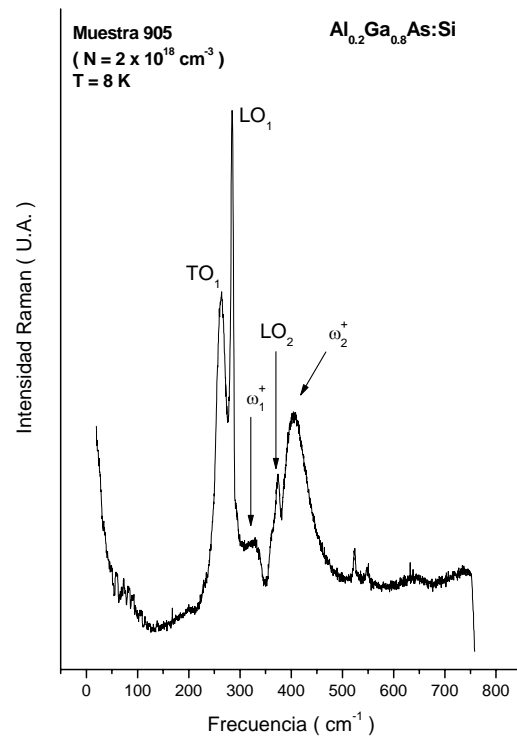


Figura 13: Espectro Raman de las aleaciones $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}:\text{Si}$ con densidad electrónica igual a $N = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

(no acoplado) de la capa del GaAs en 285 cm^{-1} . El aparecimiento de esta línea, tiene su

origen en la capa de depleción, en virtud de la transferencia de electrones de la primera capa para estados de superficie generando un campo eléctrico. En las muestras con concentración $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ y $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ se puede observar un modo TO en 266 cm^{-1} correspondiente a la capa de *GaAs*. En la muestra con concentración $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ se observó también un modo acoplado ω_1^- debido a la alta concentración de dopaje. Este modo se presenta bastante intenso ya que se superpone al modo TO del *GaAs*.

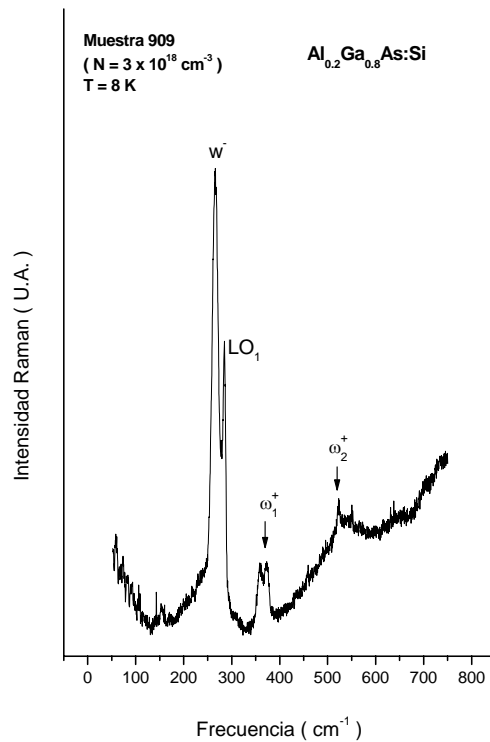


Figura 14: Espectro Raman de las aleaciones $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}:\text{Si}$ con densidad electrónica igual a $N = 3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Como se ha mostrado en [17], la asimetría, el desplazamiento y el ensanchamiento de las líneas Raman están relacionadas entre sí, a través de la relación de dispersión $\omega(k)$ de las excitaciones colectivas. En la Figura 15, podemos observar, que la forma de la línea Raman se altera drásticamente. Estas asimetrías en las líneas son provocadas por el desorden estructural de la muestra, debido a la quiebra de simetría traslacional de la red cristalina.

Además, el acoplamiento de los fonones con los plasmones produce un desplazamiento de la línea para regiones de frecuencias más altas a medida que

aumenta la concentración de portadores. Este comportamiento está de acuerdo con los cálculos teóricos mostrados en la Figura 16.

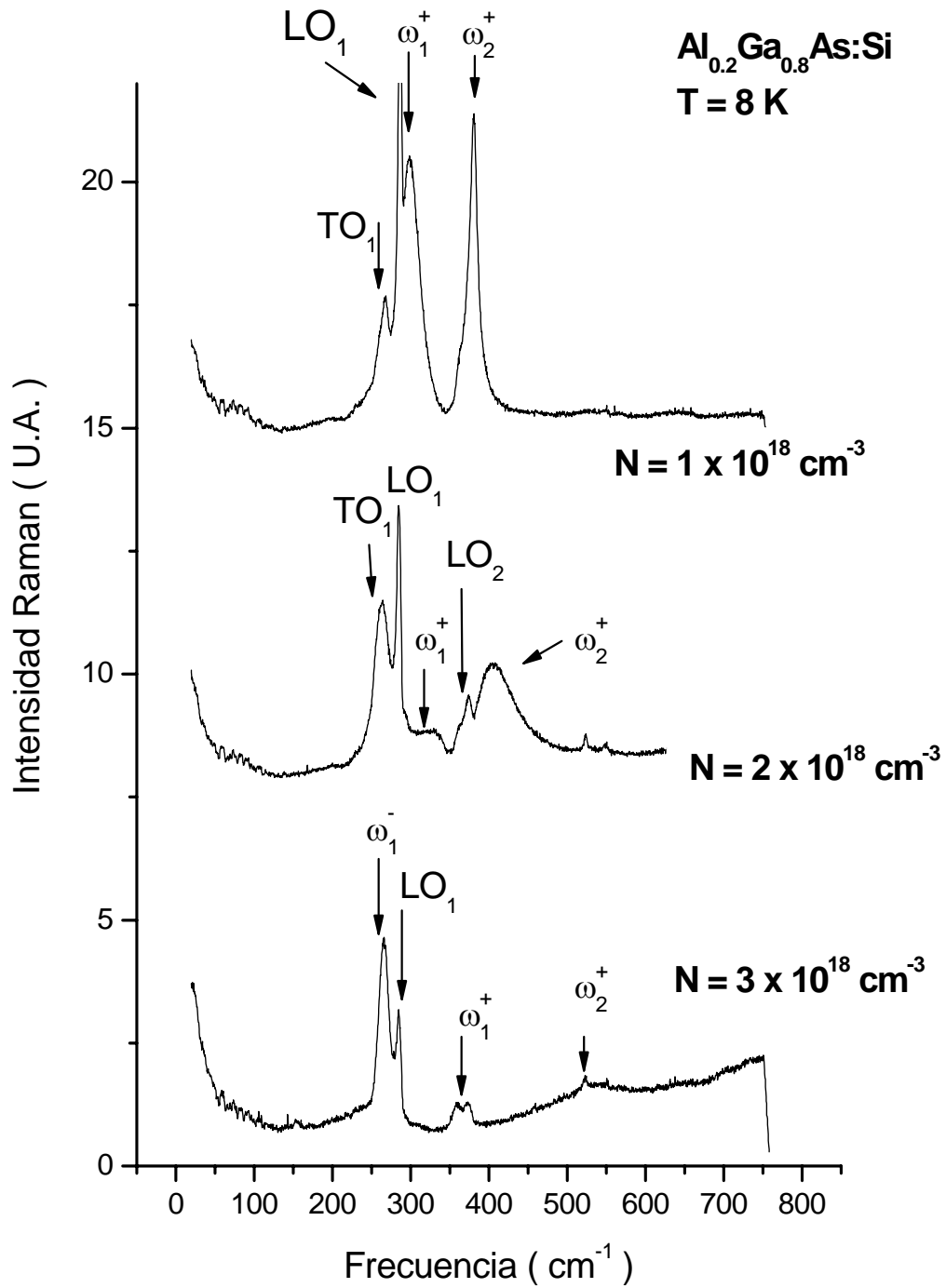


Figura 15: Asimetría de las líneas Raman para los modos acoplado fonón LO – plasmón tipo $GaAs$ y tipo $AlAs$.

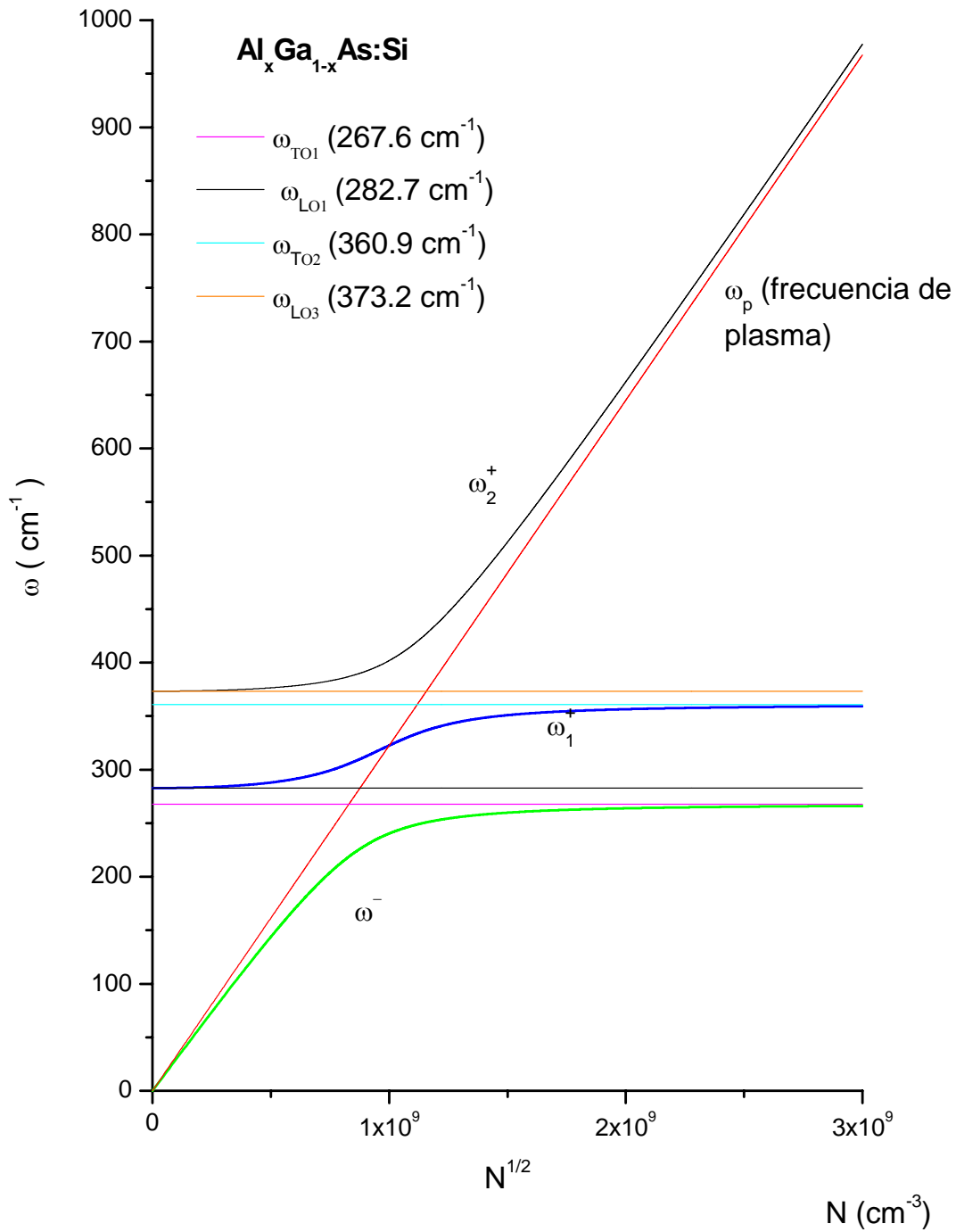


Figura 16: Gráfico de los modos acoplados en aleaciones semiconductoras $Al_x Ga_{1-x} As:Si$ en función de la concentración de portadores.

El ajuste de los espectros fue realizado utilizando un programa comercial para ajuste de funciones conocido como *Peakfit*. De esta forma se obtuvieron las frecuencias de los picos más evidentes, que al ser comparado con las de la literatura hizo posible determinar los tipos de modos excitados. El ajuste es mostrado en la Figura 17.

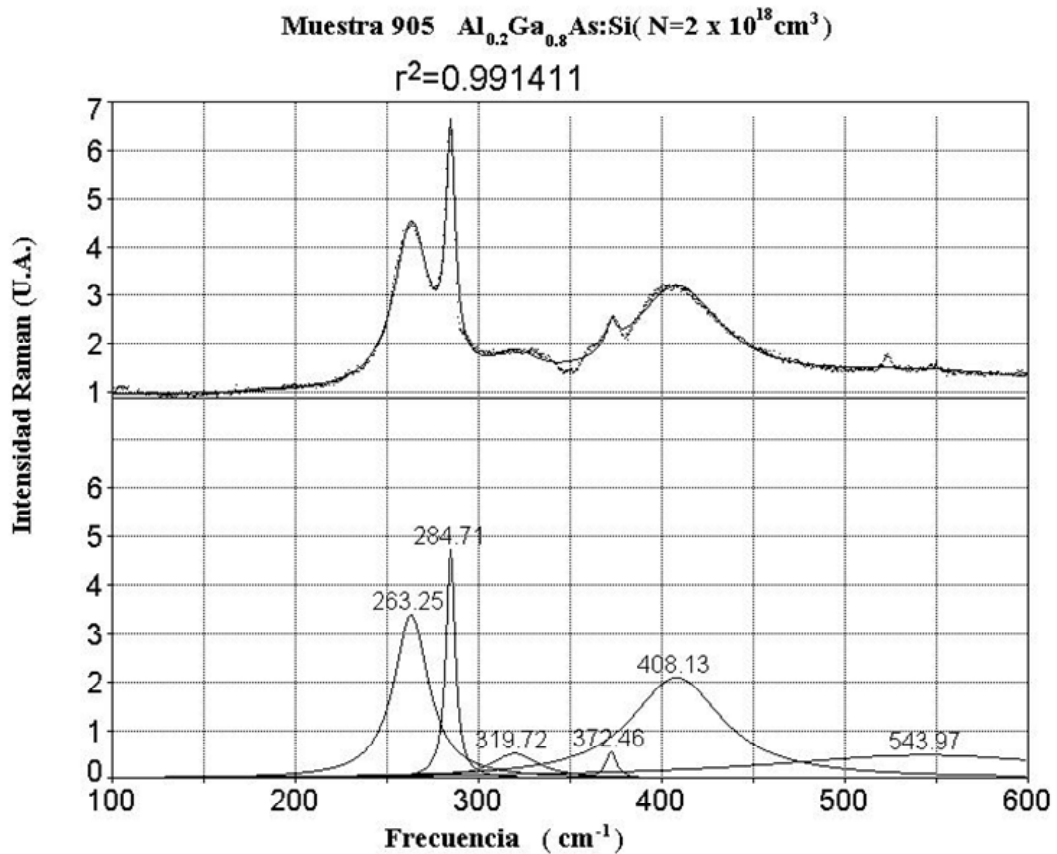


Figura 17: Ajustes de los espectros de la muestra 905 realizado en Peakfit

La Figura 16 muestra gráficamente el comportamiento de los modos acoplados, los cuales son raíces de la ecuación 2.26. En la Figura 18 se muestra dicho gráfico $\omega \times \sqrt{N}$ para nuestra aleación junto con los resultados experimentales de los modos acoplados ω_2^+ , ω_1^+ y ω^- . Se puede notar que los modos acoplados ω_2^+ están encima de la curva calculada a través de la ecuación 2.26. Esto se explica por el hecho de que las frecuencias de los modos ω_2^+ fueron tomadas como referencia para determinar las concentraciones N de portadores, ya que estos modos [ω_2^+ (tipo $AlAs$)] son más sensibles al cambio en la concentración de portadores.

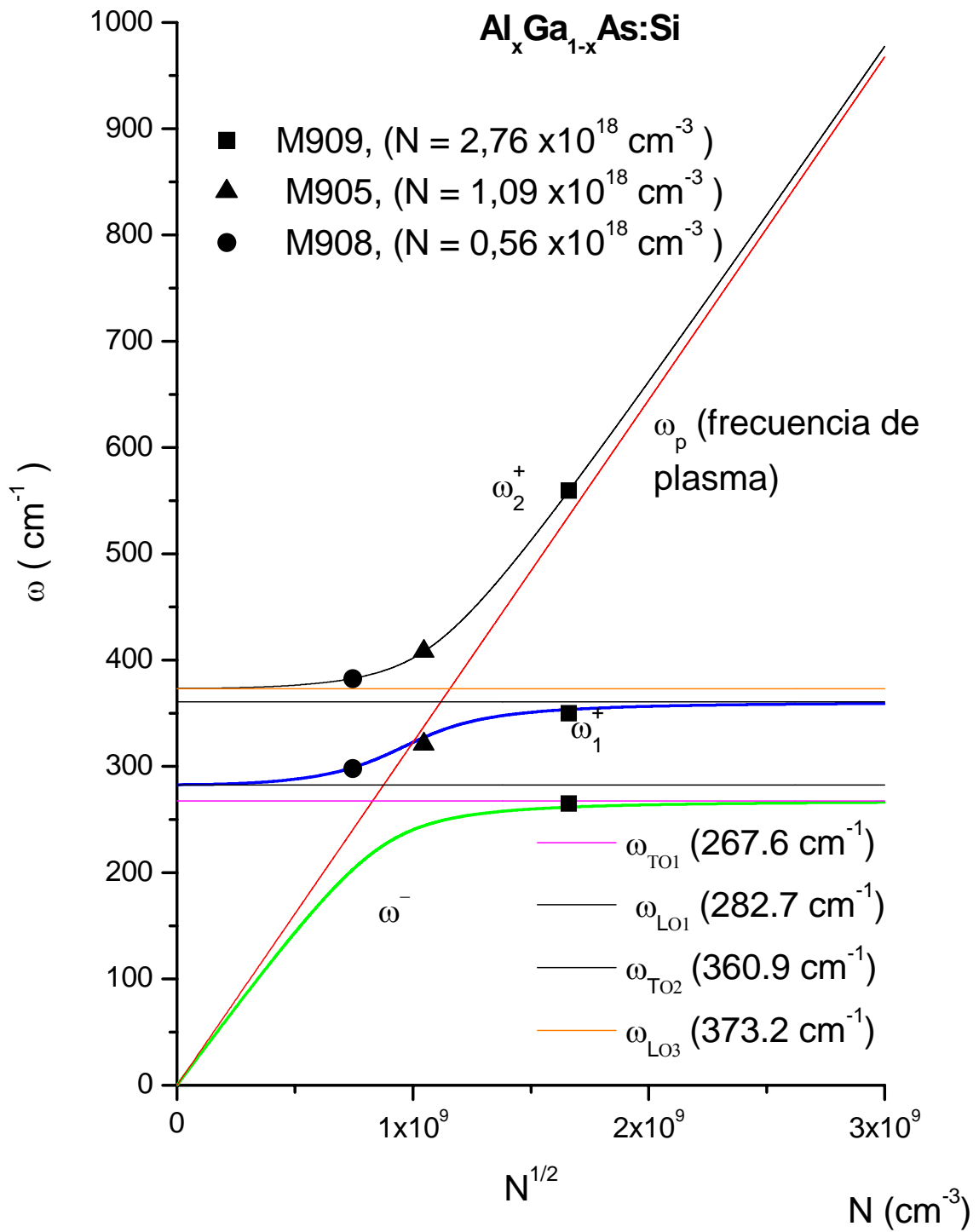


Figura 18: Comparación entre los modos acoplados obtenidos a través de la ecuación 2.26 y a través de los resultados experimentales.

Se puede observar también que los resultados experimentales y teóricos concuerdan bastante bien para los modos acoplados ω_1^+ . No podemos decir lo mismo para los modos ω^- debido a que dicho modo solo se observó en una muestra.

Otra técnica complementaria utilizada para hallar la concentración de portadores es la técnica de Capacitancia versus Voltaje. Esta es una caracterización eléctrica del material que consiste en la salida de electrones de la región de depleción en función de la variación del voltaje aplicado.

$Al_{0.2}Ga_{0.8}As: Si$	N fabricante (cm^{-3})	N efectivo (Raman) (cm^{-3})	N efectivo (C-V) (cm^{-3})
908	1×10^{18}	0.56×10^{18}	$0,7 \times 10^{18}$
905	2×10^{18}	$1,09 \times 10^{18}$	$0,7 \times 10^{18}$
909	3×10^{18}	$2,76 \times 10^{18}$	-

Tabla 5: Concentración de portadores obtenidos por el fabricante, por medidas Raman y por medidas de Capacitancia versus Voltaje

La Tabla 5 muestra la concentración nominal dada por el fabricante, la concentración efectiva obtenida por espectroscopía Raman y la concentración efectiva obtenida por medidas Capacitancia vs Voltaje.

Comparando los resultados presentados en la tabla 5, notamos que la concentración efectiva medida en C – V es bastante próxima a la obtenida por Raman para las diferentes muestras. Con ello se ha mostrado la potencialidad de la espectroscopía Raman en el análisis de materiales semiconductores dopados con la ventaja de que no es una técnica destructiva y no es necesario colocar contactos eléctricos como en el caso de medidas por Capacitancia.

La diferencia entre los valores nominales y efectivos puede ser explicada debido a las pérdidas durante el proceso de evaporación de silicio en la fabricación de las muestras, o por el exceso de tiempo de exposición de evaporación.

CAPITULO 4

CONCLUSIONES

A través de la espectroscopía Raman fue posible estudiar los modos vibracionales colectivos fonón LO-plasmón que ocurren en estructuras y heteroestructuras semiconductoras dopadas. Como discutido en el transcurso de este trabajo, estos modos colectivos son observados debido a la presencia de electrones libres los cuales se acoplan a los fonones longitudinales ópticos LO.

En este trabajo fueron analizadas tres muestras de aleaciones $Al_{0.2}Ga_{0.8}As:Si$ con diferentes concentraciones de portadores. La introducción de estas impurezas, introduce fluctuaciones en el potencial electrónico lo que causa una quiebra de la simetría de traslación, resultando en un desplazamiento, ensanchamiento y asimetría de las líneas Raman. El análisis de la forma de estas líneas espectrales nos permitió un conocimiento más amplio de la estructura cristalina. Por ejemplo, la existencia del modo LO de la capa del GaAs que aparece en los tres espectros (Fig.12,13 y14) es debido a la capa de deplección del material lo que concuerda con la referencia [2].

También se pudo observar, el modo acústico ω_1^- en la muestra 909 (concentración de portadores $3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) debido a la alta concentración de dopaje. El modo ω_1^- , se presenta bastante intenso ya que se superpone al modo TO del GaAs. Su comportamiento está de acuerdo con la relación de dispersión en las aleaciones $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ dopadas con Si, como mostrado en la Figura 16.

También fueron observadas en los espectros Raman, la modificación del carácter de los modos colectivos ω_1^+ , ω_2^+ (fonón – plasmón), a medida que la concentración de portadores aumenta. Igualmente, estudiamos el comportamiento del sistema fonón LO- plasmón dentro del formalismo de la función Respuesta Dieléctrica de una aleación, posibilitando el levantamiento de las curvas de dispersión de los modos acoplados fonón LO – plasmón. Utilizamos los modos ω_2^+ como referencia para determinar las concentraciones N de portadores, ya que estos modos [ω_2^+ (tipo AlAs)] son más sensibles a la variación de la concentración de portadores.

Los resultados muestran que las concentraciones de portadores N obtenidas por la técnica Raman difieren de los valores nominales dados por el fabricante. Podemos concluir que, ni siempre la concentración nominal es de hecho un valor efectivo. Tales diferencias pueden ser explicadas, por posibles pérdidas durante el proceso de evaporación de silicio en la fabricación de las muestras o por el exceso de tiempo de exposición de evaporación del silicio. Para confirmar nuestros resultados, se usó otra técnica complementaria: Capacitancia versus Voltaje. Comparando los resultados de estas dos técnicas, notamos que los valores obtenidos son bastante próximos conforme se muestra en la tabla 5. Mostrando, de esta manera, la potencialidad de la espectroscopía Raman en la obtención de la concentración efectiva de portadores N de materiales semiconductores dopados, con la ventaja de que esta no es una técnica destructiva.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] K. Uesugi, T. Obinda, I. Suemune, H. Kumano; Applied Physics Letters 68 (6), 1996 , pág. 844-846.
- [2] Yu. Pusep, M.T.O.Silva, J.C. Galzerani, N.T. Moshegov, P. Basmaji; Physical Review B, V 58, 16 (1998).
- [3] M Asada, Y Migamoto, Y Suematsu; IEEE J QE -22, 19856 pág 1925-1926.
- [4] J Singh: Physics of Semiconductors and their Heterostructures, Mc Graw Hill New York, 1993 pág 524.
- [5] C Weisbuch, B Vinter: Quantum Semiconductor Structures, Fundamentals and Aplications, Academia San Dieo, CA, 1991.
- [6] H.Richter, Z.P. Wang, and L.Ley, Solid State Commun. 39, 625(1981).
- [7] P.Yu and M.Cardona : Fundamentals of Semiconductors-Physics and Materials Properties, ed. by Springer-Verlag, Berlin, 1996.
- [8] C. V. Raman: Nature 121, 619 (1928).
- [9] D. J. Gardiner, P. R. Graves: Practical Raman Spectroscopy, Capítulo 1, Springer- Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, London , Paris, Tokio.
- [10] W. Hayes and R. Loudon, in Scattering of Light by Crystals (Wiley, New York 1978).
- [11] M. Cardona and G.Güntherodt (eds.): Light Scattering in Solids II, Topics in Applied Physics, Vol.50, Springer-Verlag, 1982, pgs.19 e 62.
- [12] W.H. Louisell, Quantum Statistical Properties of Radiation, ed. by John Wiley Sons, Inc., 1990.
- [13] G. Zanelatto: Estudo de Espectroscopia Raman de Interfaces em nanoestructuras semicondutoras crescidas por MBE- Super-redes e Pontos Quânticos autoorganizados, Tese de Doutorado, Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos-SP, 1999.
- [14] S. A. Solin, A. K. Ramdas, Phys. Rev. B 1,1687 (1970).

- [15] SPIE Vol.452 Spectroscopic Characterization Techniques for Semiconductor Technology (1983).
- [16] R. Shuker and R. Gammon, Phys. Rev. Lett. 25,222 (1970).
- [17] Yu.A. Pusep, M.T.O. Silva, N.T. Moshegov, J.C. Galzerani: Phys. Rev. B 61, 4441 (2000).
- [18] Leandro H. Freire de Andrade: Espalhamento intervalos na liga $\text{Al}_{0.48}\text{Ga}_{0.53}\text{As}$, Tese de Mestrado, Unicamp, Campinas-SP, 1992.
- [19] Dove, Martin T.: Introduction to Lattice Dynamics, Cambridge University Press, 1993.
- [20] G.D.Mahan, Many-Particle Physics, Plenum Press, New-York, London, 1981.
- [21] N.W.Ashcroft, and N.D.Mermin (eds.): Solid State Physics (Holt, Reinhart and Winston, New York, 1976), pg.547.
- [22] S. Adachi: J. Appl. Phys. 58 (3) 1 Agosto 1985.
- [23] B. B. Varga: Phys. Rev. 137A, 1896 (1965).
- [24] A. Mlayah, R. Carles, E. Bedel, A. Muñoz-Yagüe: J. Appl. Phys. 74(2), 1072.