

Relajación de deformaciones en films delgados crecidos sobre superredes

S.J. SFERCO⁽¹⁾, E.A. ALBANESI⁽¹⁾ y C. PRIESTER⁽²⁾

⁽¹⁾ INTEC, Güemes 3450 - (3000) SANTA FE - ARGENTINA

⁽²⁾ IEMN, Département ISEN, 59046 Lille Cedex - FRANCIA.

Hemos analizado la posible formación de alambres cuánticos, en sistemas formados por pozos cuánticos crecidos epitaxialmente sobre una superred que actúa como sustrato. Utilizando el método de campo de fuerzas de valencia, hemos calculado teóricamente la relajación de las deformaciones inducidas por la superred, sobre el pozo cuántico. Nuestros resultados no permiten inferir la formación de alambres cuánticos como resultado de un confinamiento adicional producido por la deformación lateral de la superred. De formarse alambres cuánticos, éstos podrían estar localizados solamente en la zona de la interface con la superred.

Introducción

Existe un enorme interés en la fabricación y caracterización de estructuras de baja dimensionalidad, debido a su potencial utilización en opto y microelectrónica. Ejemplos de tales estructuras son los pozos, alambres y puntos cuánticos formados a partir de materiales semiconductores. En particular, recientes experiencias de fotoluminiscencia, registradas sobre muestras formadas por un pozo cuántico (confinamiento bidimensional) crecido epitaxialmente sobre un sustrato formado por una superred, han sugerido la formación de alambres cuánticos (confinamiento unidimensional) en la región del pozo cuántico. El mismo tipo de señal ha sido observado para muestras de GaAs¹ y de CdTe^{2,3}, que fueron preparadas de manera similar. Ya que en este trabajo hemos considerado modelizaciones de las muestras de CdTe, describimos brevemente a continuación, como han sido preparadas. Sobre un sustrato de Cd_{0.88}Zn_{0.12}Te, se han depositado mediante la técnica de epitaxia por haces moleculares, diversos films en dos pasos sucesivos. El primer paso ha sido crecer una superred en la dirección [001]. Para este fin, se depositan una capa de Cd_{0.23}Zn_{0.77}Te de 100 Å de espesor, y luego otra capa de CdTe, también de 100 Å de espesor. La superred se forma al repetir 100 veces el procedimiento anterior. El segundo paso, consiste en clivar lateralmente la superred y su sustrato, y efectuar una nueva epitaxia según la dirección [110], depositando tres films que forman un pozo cuántico. Estos

films son Cd_xZn_{1-x}Te / CdTe / Cd_xZn_{1-x}Te (con x=0.08 ó x=0.23). El pozo cuántico se forma en la capa de CdTe, intermedia entre los tres films mencionados. Estas muestras han sido cuidadosamente preparadas, de manera tal de que no haya dislocaciones presentes en ellas. De esta forma, se obtienen muestras donde las tensiones en los diferentes films, pueden relajar solamente a través de deformaciones, pero no dislocaciones.

Volviendo a la formación de alambres cuánticos en las muestras anteriores, los grupos experimentales han sugerido que los diferentes estados de tensión, presentes en las capas que forman la superred, son lateralmente

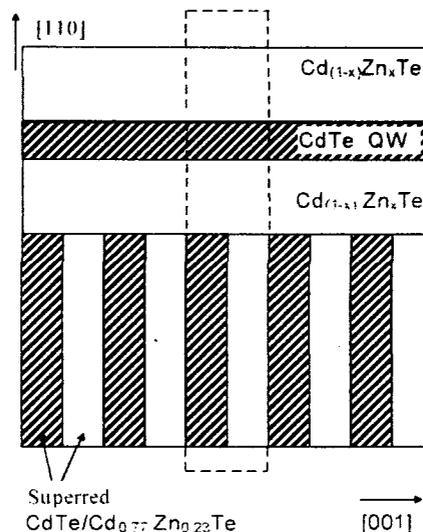


Fig.1: Representación esquemática de la configuración experimental, vista a lo largo de la dirección [-110]. En línea de trazos se indica la "celda" utilizada en nuestros cálculos. Cada capa de la superred tiene 100Å de espesor, en la dirección [001]. QW representa el pozo cuántico.

transmitidos hasta el pozo cuántico crecido en la dirección [110], produciendo un confinamiento adicional en esta capa de CdTe, dando lugar a confinamientos unidimensionales o alambres cuánticos. Estos alambres cuánticos se localizarían en el film de CdTe que forma el pozo cuántico, justo por encima de las capas de CdTe que forman la superred (véase la Fig. 1). Habría, según esta interpretación, toda una serie de alambres cuánticos paralelos, responsables de la señal de fotoluminiscencia observada.

En este trabajo presentamos resultados teóricos de la relajación de las deformaciones en los sistemas descritos anteriormente, con el fin de verificar si las deformaciones presentes en la superred pueden ser transmitidas hasta la zona del pozo cuántico, dando lugar así a un confinamiento adicional y produciendo alambres cuánticos.

Modelo teórico

Para describir las tensiones y deformaciones presentes en la superred, y evaluar como se van relajando a medida que nos movemos en la dirección [110], es decir, en la dirección donde se ha depositado el pozo cuántico, hemos utilizado la aproximación de campos de fuerzas de valencia (Valence Force Field), en la versión dada por Keating.⁴ En esta aproximación, la energía elástica (y las fuerzas sobre los átomos) están parametrizadas en términos de constantes de fuerzas, cuyos valores, para los compuestos estequiométricos puros, han sido ajustados para reproducir los valores experimentales de las constantes elásticas.⁵ Para los compuestos no estequiométricos hemos tomado para estas constantes, los valores obtenidos como promedios pesados por sus respectivas concentraciones. De esta forma, calculamos la fuerza sobre cada átomo del sistema y, a través del método de gradientes conjugados,⁶ iteramos hasta obtener la situación de equilibrio, dada por la condición de obtener fuerzas nulas sobre todos los átomos simultáneamente. La Fig. 1 describe la "celda" que hemos utilizado para modelar los sistemas experimentales. Dado que los sistemas experimentales contenían 100 períodos de la superred, hemos considerado

condiciones periódicas de contorno en la dirección [001]. Esto es equivalente a considerar que la superred es infinita en esa dirección. Hemos efectuado cálculos para los cuatro sistemas reportados experimentalmente, cuya variación está dada en los espesores de las capas del film 1 y del pozo cuántico, y que se detallan en la Tabla 1. De esta forma, nuestras "celdas" llegan a considerar hasta 28260 átomos, que pueden variar su posición para disminuir la energía elástica total del sistema.

Tabla 1: Espesores de los films (en Å) para las cuatro situaciones experimentales analizadas en este trabajo (véase Fig. 1). QW representa el pozo cuántico.

	8 % de Zn		23% Zn	
	(a)	(b)	(c)	(d)
film 1	200	100	0	200
QW	100	100	100	50
film 3	200	200	200	200

(a) Ref. 3; (b) y (c) Ref. 7; (d) Ref. 2.

Resultados y discusión

Un análisis completo de las relajaciones de los átomos, consiste en proporcionar las componentes del tensor deformación ϵ_{ij} para cada átomo. Si bien hemos realizado este cálculo, cuyo resultado es una enorme tabla de números, preferimos expresar los resultados en forma gráfica a través de la Fig. 2. Esta figura corresponde a los resultados del sistema rotulado (d) en la Tabla 1. Las abscisas para ambas partes (a) y (b) de la Fig. 2, corresponden a la distancia a lo largo de la dirección [110] donde se depositó el pozo cuántico. El origen de abscisas está ubicado en la interface entre la superred clivada y el primer film, de los tres que definen el pozo cuántico. En el eje vertical de la Fig. 2(a), hemos indicado la distancia entre planos sucesivos de átomos (a lo largo de la dirección [001]), en el medio de la capa de CdTe de la superred (círculos grandes), y la misma magnitud en el medio de la capa de

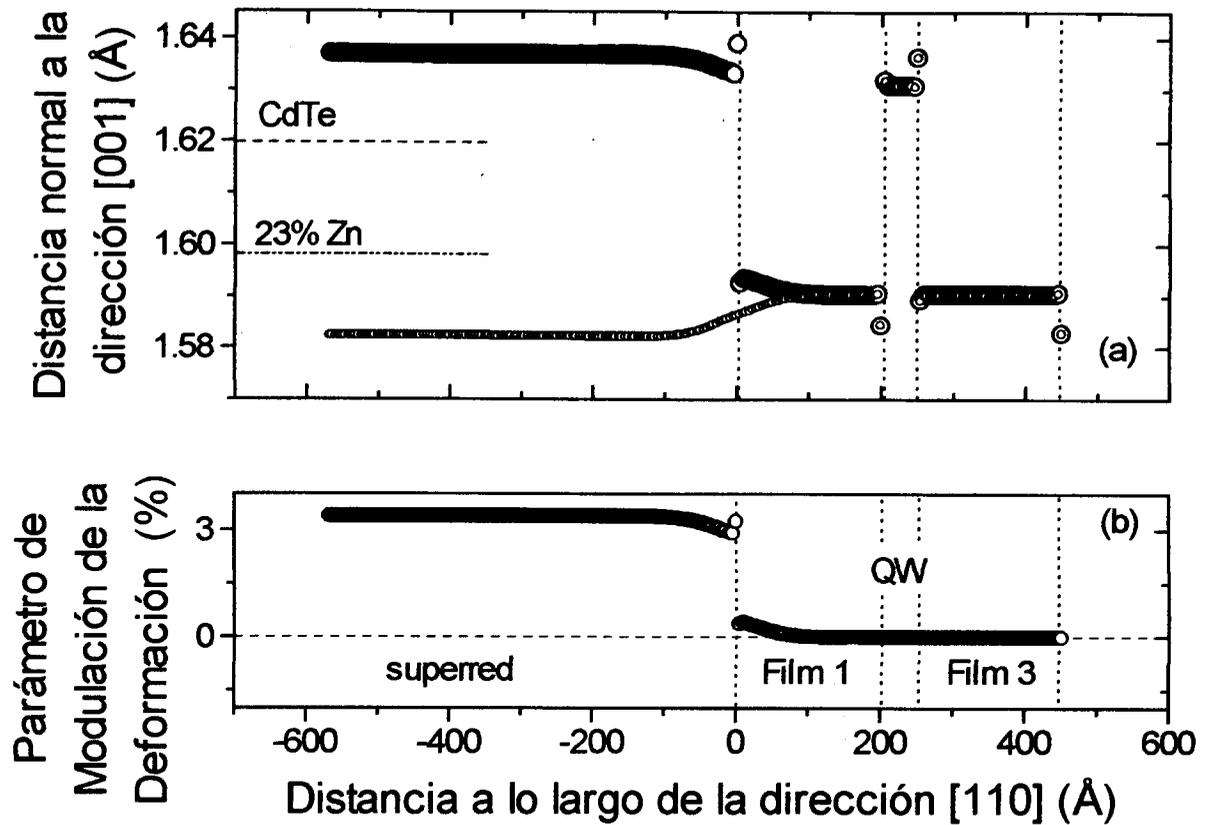


Fig. 2: Resultados de la relajación de deformaciones para el sistema rotulado (d) en la Tabla 1. (a) Distancia entre planos adyacentes (normales a la dirección [001]), en el centro de la capa de CdTe de la superred (círculos grandes), y en el centro de la capa de 23% de Zn (círculos pequeños), como función de la distancia a lo largo de la dirección [110]. Como referencia, se han indicado esas mismas distancias para el CdTe puro (—) y el valor correspondiente a un promedio pesado con la composición, para la capa con 23% de Zn (-.-.).

(b) Parámetro de modulación de las deformaciones (definido en el texto), como función de la distancia a lo largo de [110]. El valor cero (líneas de trazos), corresponde a la situación donde la modulación de deformación se ha perdido completamente. El origen a lo largo de [110] está ubicado sobre la interface con la superred. QW representa el pozo cuántico.

$\text{Cd}_{0.77}\text{Zn}_{0.23}\text{Te}$ de la superred (círculos pequeños).

A medida que nos movemos a lo largo de la dirección [110], vemos que estas distancias ya no difieren entre sí, si se calculan sobre una u otra de las capas que forman la superred. Esto significa que el diferente estado de deformación presente en las capas de la superred se iguala progresivamente, a medida que nos movemos hacia el pozo cuántico. O, dicho aun de otra manera, el estado de deformación de la superred, no se transmite al pozo cuántico, ya que se amortigua mas allá de unas cuantas capas atómicas de la interface con la superred. En la Fig. 2(b), se muestra en el eje vertical, el "parámetro de modulación de la deformación",

definido como $((\text{distancia entre los planos centrales de la capa de CdTe}) - (\text{distancia entre los planos centrales de la capa Cd}_{0.77}\text{Zn}_{0.23}\text{Te})) / (\text{el promedio de ambas distancias})$, expresado en %. El valor cero (representado en líneas de trazos), representa una atenuación completa de la deformación inducida por el substrato superred. El caso opuesto, donde toda la deformación es transmitida sin atenuación al pozo cuántico, daría líneas horizontales en ambas partes de la Fig. 2. Como vemos, no es posible tener en la zona del pozo cuántico, diferentes estados de deformación, como los que sí hay presentes en las capas de la superred. Los resultados numéricos del tensor de deformaciones, para átomos dentro del pozo

cuántico, confirman este resultado. Los resultados que hemos obtenido están en un todo de acuerdo con aquellos obtenidos por Kash et al.,⁸ quienes efectuaron un cálculo por elementos finitos para el sistema de GaAs. Si bien nuestro cálculo es microscópico, la gran cantidad de átomos considerada en nuestro modelo, nos permite predecir que nuestros resultados no diferirán demasiado de aquellos obtenidos con métodos propios de la teoría de la elasticidad. Por lo tanto, nuestros resultados no predicen la formación de alambres cuánticos para este sistema, como fue sugerido por los grupos experimentales. Queda abierto el problema de explicar el espectro de fotoluminiscencia observado, que según nuestros cálculos, no se debe a la presencia de alambres cuánticos en la zona del pozo cuántico.

Hemos obtenido resultados similares para los sistemas rotulados (a) y (b) en la Tabla 1. Dado que el "estado de deformación" se propaga solo unas cuantas capas atómicas, la única posibilidad de tener un confinamiento adicional por deformación lateral, corresponde al sistema rotulado (c) en la Tabla 1, donde la capa de CdTe está directamente en contacto con la interface. Esto significa que si se forman alambres cuánticos en estos sistemas, estos podrían ser resultados de confinamientos sólo en la interfase con la superred.

Dado que el espesor del sustrato sobre el cual se deposita la superred, es mucho más grande que el tamaño de la superred, estamos implementando una corrección a nuestro modelo, que ya no considere que la superred es infinita, y por lo tanto, incluya la interface (001) de la superred con el sustrato, y la superficie libre (001) de la superred, en forma explícita en nuestro modelo.

Conclusiones

Utilizando el método de campo de fuerzas de valencia, hemos calculado la relajación de las deformaciones en los pozos cuánticos crecidos epitaxialmente sobre superredes, en materiales basados en CdTe. Con un modelo que considera que la superred es de extensión infinita, nuestros resultados indican que no es posible tener un

confinamiento adicional en la zona del pozo cuántico (como para formar alambres cuánticos), inducido por deformaciones transmitidas lateralmente por las diferentes capas que forman la superred. Si bien queda por explicar que es lo que se observa en los espectros de fotoluminiscencia de estos sistemas, nuestra conclusión es que no se debe a la formación de alambres cuánticos en la zona del pozo cuántico. La única posibilidad de que existan alambres cuánticos es en la interface con la superred. Estamos trabajando en una mejora del modelo, que incluya explícitamente las superficies (001) de estos sistemas.

Agradecimientos: Este trabajo fue realizado en el marco de una colaboración CONICET-CNRS.

Referencias:

- ¹ D. Gershoni, J.S. Weiner, S.N.G. Chu, G. Baraff, J.M. Vandenberg, L.N. Pfeiffer, K. West, R.A. Logan and T. Tanbun-Ek, *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 1631 (1990).
- ² L.S. Dang, C. Gourgon, N. Magnea, H. Mariette and C. Vieu, *Semicond. Sci. Technol.*, **9**, 1953 (1994).
- ³ H. Mariette, C. Gourgon, L.S. Dang, C. Vieu, N. Pelekanos and W.W. Rühle, in *Proc. of European Workshop on II-VI Semiconductors*. Ed. by H. Heinrich and J.B. Mullin, Trans Tech, Switzerland, (1995).
- ⁴ P.N. Keating, *Phys. Rev.*, **145**, 637 (1966).
- ⁵ R.M. Martin, *Phys. Rev. B* **1**, 4005 (1970).
- ⁶ M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias and J.D. Joannopoulos, *Rev. Mod. Phys.*, **64**, 1045 (1992).
- ⁷ H. Mariette, comunicación privada.
- ⁸ K. Kash, D.D. Mahoney and H.M. Cox, *Phys. Rev. Lett.*, **66**, 1374 (1991).