Como calcular o gap da liga tensionada de InGaAS

Euzi Conceição Fernandes da Silva
Abril/2010

Índice

1 Determinação da altura da barreira para um elétron e um buraco confinados em um QD de InAs com barreira de GaAs

Para determinar as energias de confinamento de um elétron ou de um buraco confinados em um poço de potencial precisamos conhecer a altura da barreira de potencial. Vamos mostrar inicialmente como se determina a altura da barreira V_0 quando o poço de potencial (que pode ser um poço quântico ou um ponto quântico, por exemplo) é formado por InAs e a barreira ao seu redor é formada pelo GaAs.

Seja $E_{g,GaAs}$ a energia do gap do GaAs e $E_{g,InAs}$ a energia do gap do InAs. A descontinuidade do gap entre estes dois materiais, ΔE_g, é dada por:

$$\Delta E_g = E_{g,GaAs} - E_{g,InAs} \tag{1}$$

A barreira de energia potencial V_0 do elétron confinado no QD de InAs é uma porcentagen da descontinuidade ΔE_g. O valor mais aceito para esta porcentagem é de 54%. Logo, a barreira para o elétron é dada por:

$$V_0 = 0,54 \times \Delta E_g, \quad \textbf{para elétron} \tag{2}$$

e

$$V_0 = 0,46 \times \Delta E_g, \quad \textbf{para buraco}. \tag{3}$$

A energia do gap do GaAs em T=300 K é $E_{g,GaAs} = 1,4240$ eV e do InAs é $E_{g,InAs} = 0,702932$ eV. Com estes valores obtemos ΔE_g =721 meV (eq. 1) e $V_0 = 389$ meV para elétrons (eq. 2) e $V_h = 332$ meV para buracos (eq. 3).

2 Determinação da altura da barreira para um elétron e um buraco confinados em um QD de $\mathrm{In_xGa_{1-x}As}$ com barreira de GaAs

Em nosso trabalho analisaremos fotodetectores de QDs de InAs e outros contendo QDs de InGaAs. Para isso, devemos também determinar a altura da barreira V_0 para o elétron e para o buraco confinado em um QDs de $\mathrm{In_xGa_{1-x}As}$. O material semicondutor que compõe os QDs está tensionado pois tem seu parâmeto de rede adaptado ao parâmetro de rede do GaAs. Desta forma, para determinar a barreira de potencial devemos utilizar a energia do gap da liga ternária de $\mathrm{In_xGa_{1-x}As}$ **tensionada** (que tem valor diferente do gap da mesma liga não tensionda) e que pode ser calculada de acordo com a seguinte expressão:[1]

$$E_g^t(x) = E_g^{nt}(x) + 2a(x)\left[\frac{C_{11}(x) - C_{12}(x)}{C_{11}(x)}\right]\epsilon(x) - b(x)\left[\frac{C_{11}(x) + 2C_{12}(x)}{C_{11}(x)}\right]\epsilon(x) \tag{4}$$

sendo

$$\epsilon(x) = \frac{a_{GaAs} - a_{InGaAs}}{a_{InGaAs}} \tag{5}$$

onde

- $E_g^t(x)$ é o gap de liga ternária de $\mathrm{In_xGa_{1-x}As}$ **tensionada**,
- $E_g^{nt}(x)$ é o gap de liga ternária de $\mathrm{In_xGa_{1-x}As}$ **não tensionada**,
- a(x) é o potencial de deformação hidrostática e pode ser calculado como:

$$a = -\left[\frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}\right]\frac{dE_g}{dP}, \tag{6}$$

- b(x) é potencial de deformação uniaxial,
- $C_{ij}(x)$ são constantes elásticas,
- a_{InGaAs} é o parâmetro de rede do InGaAs.
- a_{GaAs} é o parâmetro de rede do GaAs.

Observe que para calcular a energia do gap do material tensionado devemos conhecer o gap da liga ternária não tensionada ($E_g^{nt}(x)$) para diferentes concentrações de In. Neste trabalho utilizaremos:

- $E_g^{nt}(x) = 1.43 - 1.53x + 0.45x^2$ (eV) para T=300 K (ref. 2)

- $E_g^{nt}(x) = 1.508 - 1.47x + 0.375x^2$ (eV) para T=77 K (ref. 3)

- $E_g^{nt}(x) = 1.5192 - 1.5837x + 0.475x^2$ (eV) para T=2 K (ref. 4)

Devemos também conhecer os demais parâmetros que aparecem nas expressões eq. 4 e 5 para diferentes concentrações de In. No entanto, não se conhece estes parâmtros para todas as concentrações de In e o procedimento adotado para calcular estas grandezas para as ligas ternárias é realizar uma interpolação linear entre os valores dos parâmetros do GaAs e do InAs. Para fazer as interpolações utilizaremos os dados para as ligas binárias apresentados na Tabela 1.

Para fazer as interpolações para um dado parâmetro P utilizaremos a seguinte relação:

$$P_{InGaAs} = P_{GaAs} + (P_{InAs} - P_{GaAs})x \tag{7}$$

Utilizando a expressão 7 e os parâmetros apresentados na Tabela 1 obtemos os dados apresentados na Tabela 2.

Em nossos cálculos usaremos para a massa efetiva do elétron (m_e^*) e do buraco pesado (m_{hh}^*) as seguintes expressões:[5]

$$m_e^* = 0.067(1 - 0.426x)m_0 \tag{8}$$

$$m_{hh}^* = 0.34(1 + 0.117x)m_0 \tag{9}$$

onde x é a concentração de índio na liga de $In_xGa_{1-x}As$

Referências

[1] L. C. Andreani et al, J. Appl. Phys. Lett. **78** 6745 (1995).

[2] S. Adachi, J. Appl. Phys. **53**, 8775(1982).

[3] Y. T. Leu, F. A. Thiel, H. Scheiber, B. I. Miller, and J. Bachmann, J. Electron Mater. **8**, 663 (1979).

[4] K. H. Goetz, D. Bimberg, H. Jur, J. Selders, A. V. Solomonov, G. F. Glinksii, J. Appl. Phys. **58**, R1 (1985).

[5] J. A. Porto and J. Sánchez-Dehesa, Phys. Rev. B **51** 14352 (1995).

Tabela 1: Parâmetro de rede a_{rede}, potencias de deformação (a e b), constantes elásticas C_{ij}, e dependência do gap com a pressão dE_g/dP dos compostos binários GaAs e InAs.

	GaAs	InAs
$[\mathrm{a_{rede}(T)}](\mathrm{Å})$	$5.65325 + 3.88 \times 10^{-5}(T - 300)$	$6.0583 + 2.74 \times 10^{-5}(T - 300)$
[a](eV)	-9.2	-5.8
[b](eV)	-2.0	-1.8
$[\mathrm{C_{11}(x)}](10^{11}\ \mathrm{dyn/cm^2})$	12.21	8.329
$[\mathrm{C_{12}(x)}](10^{11}\ \mathrm{dyn/cm^2})$	5.66	4.526
$\frac{\mathrm{dE_g}}{\mathrm{dP}}(10^{-12}\mathrm{eV\ cm^2/dyn})$	11.7	10

Tabela 2: Parâmetro de rede a_{InGaAs}, potencias de deformação (a e b), constantes elásticas C_{ij} que serão utilizadas para o cálculo da energia do gap da liga de $\mathrm{In_xGa_{1-x}As}$ tensionada.

$[\mathrm{a_{InGaAs}(T)}](\mathrm{Å})$	$5.65325 + 3.88 \times 10^{-5}(T - 300) + [0.40505 - 1.14 \times 10^{-5}(T - 300)x]$
$[\mathrm{a_{InGaAs}(T = 300\ K)}](\mathrm{Å})$	$5.65325 + 0.40504x$
$[\mathrm{a_{InGaAs}(T = 77\ K)}](\mathrm{Å})$	$5.6446 + 0.407582x$
$[\mathrm{a_{InGaAs}(T = 2\ K)}](\mathrm{Å})$	$5.64169 + 0.408437x$
[a](eV)	-9.2+3.4x
[b](eV)	-2.0+0.2x
$[\mathrm{C_{11}(x)}](10^{11}\ \mathrm{dyn/cm^2})$	12.21-3.88x
$[\mathrm{C_{12}(x)}](10^{11}\ \mathrm{dyn/cm^2})$	5.66-1.13x
$\frac{\mathrm{dE_g}}{\mathrm{dP}}(10^{-12}\mathrm{eV\ cm^2/dyn})$	11.7-1.7x