

Observación Experimental de Efectos de Confinamiento sobre Aceptores en Superredes de Si/Si_{1-x}Ge_x.

H. Navarro*

Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas",
Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. J-48, Puebla, Pue. México 72570

T. Timusk, W. R. Datars

Department of Physics McMaster University Hamilton, Ontario, Canada L8S 4M1

D. C. Houghton

Division of Physics, National Research Council, Ottawa, Ontario, Canada K1A 0R6

Hemos aplicado la técnica de espectroscopía por ionización fototérmica (PTIS, por sus siglas en inglés) al estudio de aceptores de boro en *p*-Si/Si_{1-x}Ge_x, crecidos sobre substratos de *n*-Si por la técnica de epitaxia por haces moleculares. Las capas de Si_{1-x}Ge_x fueron impurificadas con boro en concentraciones de 10¹⁷ a 10¹⁸ cm⁻³. Se observó que al mantener las capas de Si con anchura constante, a anchuras de 100 Å y menores de las capas de Si_{1-x}Ge_x aparecen bandas de fotoconductividad entre 150 a 300 cm⁻¹, provenientes de transiciones entre estados ligados de los aceptores confinados en estas capas. Encima de 300 cm⁻¹ la señal de PTIS se encuentra dominada por la de las capas de *p*-Si y en algunos casos por la del *n*-Si del substrato. Las muestras estudiadas de 100 Å de anchura no muestran dependencia apreciable de la concentración de Ge en las capas de la aleación de Si_{1-x}Ge_x en los efectos de confinamiento observados.

INTRODUCCION

Desde que se propusieron y se fabricaron las primeras superredes de materiales semiconductores se tuvo la necesidad de entender una gran cantidad de situaciones físicas nuevas que éstas plantean. En particular, el efecto del "confinamiento" de las nubes electrónicas de los diferentes estados cuánticos de impurezas emparedadas entre capas contiguas de los materiales que constituyen la superred atrajo inmediatamente la atención de investigadores diversos. Desde los primeros momentos del estudio de estos materiales artificiales se efectuaron trabajos teóricos para tratar de predecir los efectos que produce en el espectro energético de impurezas hidrogenicas la compresión de las nubes electrónicas debida a la confinación.[1,2,3] Estos se aplicaron con buen éxito para explicar los resultados sobre la dependencia observada de la energía de ionización de donadores con el tamaño de los "pozos" (capas) en que se encuentran.[4,5,6]

El tema de los efectos de confinamiento en los niveles energéticos de estados aceptores requiere de algunas consideraciones particulares que trascienden las predicciones de un modelo hidrogenico simple, especialmente en el caso en que el rompimiento de la degeneración de las bandas de valencia en $k = 0$ para los materiales con estructura zinc-blenda, no las separe suficientemente en energía. Este rompimiento se debe al efecto de la reducción de la simetría por la nueva periodicidad de la superred a lo largo del eje de crecimiento de ésta y a los mismos efectos de confinamiento, factor que origina subbandas correspondientes a los estados ligados de una sucesión unidimensional de pozos rectangulares.[1] Esto da origen a la formación de una primer subbanda de hoyos pesados, que es la mas alta energéticamente, y una a menores energías de hoyos

ligeros.[2] Este efecto es reforzado en las superredes de Si/SiGe por estar sujetas las capas de Si_{1-x}Ge_x a enormes compresiones, del orden de 10⁵ atmosferas.[23] El problema teórico fue analizado por Masselink *et. al.*[7] para aceptores en superredes no tensionadas, como las del sistema de GaAs/AlGaAs, quien obtuvo resultados que proporcionan un buen acuerdo para las mediciones experimentales de la dependencia con el tamaño de los pozos de la energía de ionización de aceptores de carbono y berilio en estos sistemas.[8,9,10]

En las superredes de Si/SiGe se espera una separación relativa entre las subbandas de hoyos pesados y ligeros del mismo orden o menor que la energía de ionización de los aceptores para concentraciones en las aleaciones de Si_{1-x}Ge_x de Ge menores al 30 %.[24] Esto hace más imperiosa la necesidad de estudiar de manera aún más especial el cálculo de las autoenergías de los estados aceptores en estas superredes. Este problema teórico y su dependencia en las dimensiones del pozo en las superredes tensionadas de Si/SiGe sigue pendiente de tratarse.

La técnica experimental por excelencia que se ha usado para extraer la mayor cantidad de información sobre esta dependencia en el tamaño del pozo de las energías de estados aceptores ha sido la fotoluminiscencia en el caso de las superredes de GaAs/AlGaAs.[4,5,5,8] Sin embargo, siendo el Si, el Ge y las aleaciones de Si_{1-x}Ge_x materiales con ancho de banda energético prohibido indirecto, las recombinaciones fotolumiscentes banda de conducción-aceptor para las superredes compuestas de estos materiales son mucho menos probables que para las del sistema GaAs/AlGaAs. Siendo la espectroscopía de la conductividad fototérmica (PTIS) altamente sensible para la detección en el infrarrojo mediano y lejano de estados de impurezas

aceptoras y donadoras se presenta en este trabajo un estudio de PTIS de superredes de Si/SiGe con las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ impurificadas con el aceptor boro con anchos de las mismas de 200, 100 y 30 Å. Como se presenta y discute más adelante esta es la primer observación exitosa de los efectos de confinamiento sobre los estados aceptores en estas superredes. El comportamiento observado coincide cualitativamente con las predicciones de la teoría sobre estado hidrogenoides.[1] Estas observaciones se espera sirvan de motivación para que la teoría se desarrolle para atender el problema de estados aceptores en superredes tensionadas.

EXPERIMENTAL

Las muestras estudiadas se enlistan en la tabla I, junto con sus características físicas más relevantes. Típicamente estas consisten de una capa epitaxial de $p\text{-Ge}$, de 5000 to 9000 Å de anchura, crecidos por la técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE, por sus siglas en inglés) encima de caras cristalográficas (100) de obleas de $n\text{-Si}$, de 500 μm anchura y de concentraciones de 10^{15} por cm^{-3} de impurezas residuales. En la Tabla I se enlistan las características físicas de las muestras estudiadas. Para recolectar las señales de fotoconductividad y de conductividad fototérmica se evaporaron contactos de aluminio en forma de barra encima de las capas crecidas por MBE, con un 1mm de separación entre contactos. Después de la evaporación, se colocó a las muestras en un horno precalentado a 250 °C. La formación de contactos óhmicos de buena calidad se efectuó mediante el recocido de la muestra con los contactos ya evaporados, en un flujo laminar de gas argón a 500 °C por 15 min. enfriando subsecuentemente a la rapidez de la inercia térmica del horno al ser apagado. Los espectros de fotoconductividad se obtuvieron con un interferómetro de Michelson para lejano infrarrojo, de transformada rápida de Fourier, de barrido continuo, con una resolución de 1 cm^{-1} . Las muestras se montaron en un dedo frío de un criostato de la compañía Infrared Laboratories Inc. HD-3L. La temperatura de la muestra se midió con un diodo de silicio, colocado adyacente a la muestra.

La radiación del interferómetro se enfocó sobre las muestras mediante un cono parabólico de 2.2 mm de apertura. Normalmente se tomaron espectros con la radiación del interferómetro filtrada a través de polietileno negro y por la ventana de propileno del criostato. Para todas las muestras se tomaron también espectros bajo iluminación simultánea con luz blanca, removiendo los filtros, que incluye frecuencias con energías correspondientes y mayores a las del ancho de banda energético prohibido. A esta radiación se le denomina luz del ancho de banda prohibida (BGL por sus siglas en inglés). Esta técnica permite la observación simultánea de la señal de las impurezas minoritarias y mayoritarias en experimentos de transmisión y fotoconductividad en el infrarrojo lejano.[11] Los espectros fueron tomados con divisores de haz de 2 μm o 6 μm de material mylar, los cuales tienen su primer pasabanda espectral entre ~ 20 a 1900 cm^{-1} y entre ~ 20 a 600 cm^{-1} con máximos de transmisión en 850 y 300 cm^{-1} , respectivamente.

vamente.

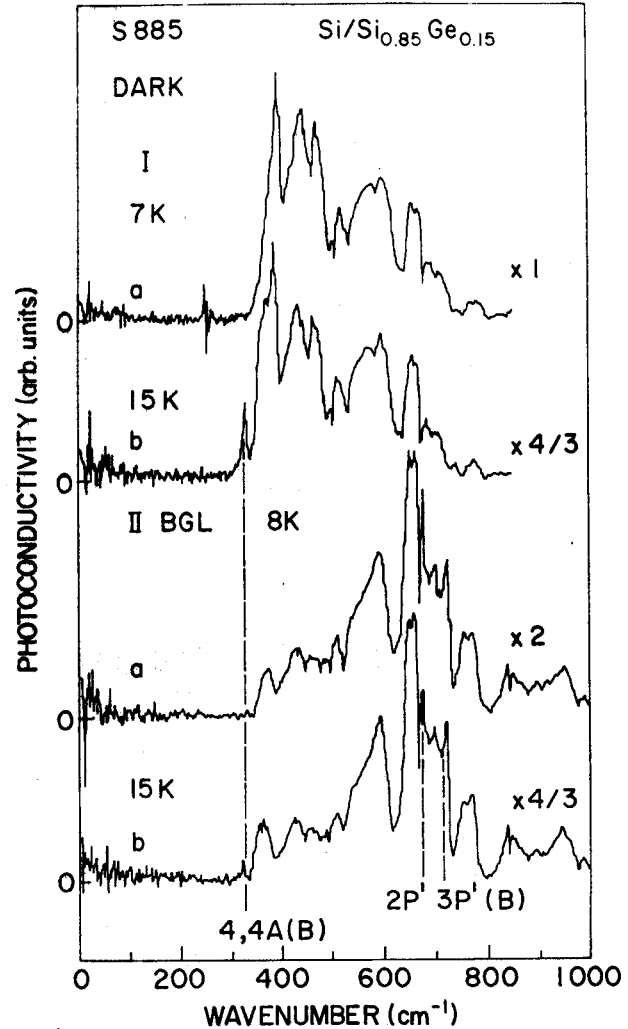


Fig. 1 El espectro de conductividad fototérmica de la muestra 885 que consiste de una superred de $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$, de anchura por capa 200/200 Å con boro como impurificante en las capas de $\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$, I: medidos bajo condiciones de "oscuridad", a) a 7 K y b) a 15 K; II: bajo iluminación BGL, a) a 8 K y b) 15 K. Los mínimos en 390, 480, 520, 720 y 850 cm^{-1} son causados instrumentalmente. Los mínimos en 605, 770-790 cm^{-1} son producidos por el carbono, carbono y nitrógeno contenidos en la muestra, respectivamente.

En la Fig. 1 se muestran algunos espectros de PTIS obtenidos de la muestra 885, que consiste de una superred de $\text{Si}/\text{Si}_{0.85}\text{Ge}_{0.15}$, 200/200 Å de anchuras en las capas respectivas. En las Figs. 1-I(a) y (b) se muestran los espectros de fotoconductividad para esta muestra a temperaturas de 7 y 15 K, respectivamente, espectros tomados únicamente con la radiación infrarroja del interferómetro, lo que denominaremos medición en oscuro (dark condi-

tions). Las Figs. 1-II (a) y (b) muestran los espectros medidos a 8 K y 15 K bajo iluminación adicional de luz blanca (BGL). Los espectros mostrados de PTIS muestran una gran cantidad de estructura. Los mínimos visibles a 385, 440, 480, 520, 720 y 850 cm^{-1} se originan en bandas de absorción del divisor de haces de mylar del interferómetro o de la ventana de polipropileno del criostato.[12] Los mínimos en 605 y 770 cm^{-1} tiene su origen en bandas vibracionales del carbono en el Si.[13] La última de estas bandas de absorción se sobrepone con la banda a 790 cm^{-1} que se origina en una banda vibracional del nitrógeno en el Si.[14]

El continuo de fotoconductividad (CFC) que empieza por encima de 320 cm^{-1} en los espectros de PTIS mostrados en este trabajo, y en la Fig. 1-I se conoce bien en la literatura que está asociado a transiciones entre el estado base de los aceptores de boro a su continuo de ionización, en la banda de valencia más cercana en el *p*-Si.[11] La Fig. 1-II muestra como este CFC cambia bajo iluminación BGL para esta misma superred. Son visibles algunos cambios importantes para frecuencias con números de onda entre 500-1000 cm^{-1} . Los detalles espectrales más interesantes son las dos líneas de transiciones muy agudas en 669.2 y 692.4 cm^{-1} que han sido identificadas como transiciones provenientes del boro desde su estado base a los estados aceptores 2P' and 3P' que esta impureza forma asociados con la llamada banda de valencia "split-off" del Si, observadas por primera vez por Onton *et. al.*[11,15]

En la Fig. 2 se muestran los espectros PTIS de un sustrato desnudo de *p*-Si crecido por la técnica de "float-zone", adquirido comercialmente y que se sabe tiene boro como impureza mayoritaria $|N_a - N_d| = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ para propósitos de comparación con los espectros de PTIS observados en las superredes presentados en este trabajo. Las Figs. 2-I(a) y (b) muestran los espectros de PTIS del boro en el silicio a 8 K y 15 K bajo condiciones de "oscuridad". En las Fig. 2-II (a) y (b) se presentan los espectros del mismo aceptor de boro en el Si a 10 K y 15 K bajo iluminación BGL. Comparando los espectros de las Figuras 1 y 2 se observa que estos son casi idénticos para igualdad de condiciones de observación. Solo existen diferencias mínimas para las transiciones discretas entre los estados ligados del boro visibles alrededor de 320 cm^{-1} en la Fig. 2-II(b) bajo iluminación BGL las cuales normalmente no se manifiestan a estas bajas temperaturas para el boro en el silicio. Las líneas de transiciones del boro aparecen en las posiciones reportadas en la literatura.[11,15] Para la muestra 885 la única transición discreta visible es la que aparece a 318 cm^{-1} , clasificada como 4-boro en la literatura, que es siempre la de máxima intensidad en PTIS.[11]

En la Fig. 3 se muestran los espectros de PTIS a 7 K y 16 K bajo condiciones de oscuridad para una muestra de *n*-Si, Impurificada con fósforo $|N_d - N_a| \sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Comparando estos espectros con los correspondientes de las Figs 1-I(a) y 1-II(a) observamos que se puede eliminar cualquier posibilidad de que el *n*-sustrato está contribuyendo significativamente a los espectros PTIS de la muestra 885 o de los de las otras superredes presentados en este trabajo con la excepción de los de la muestra 989,

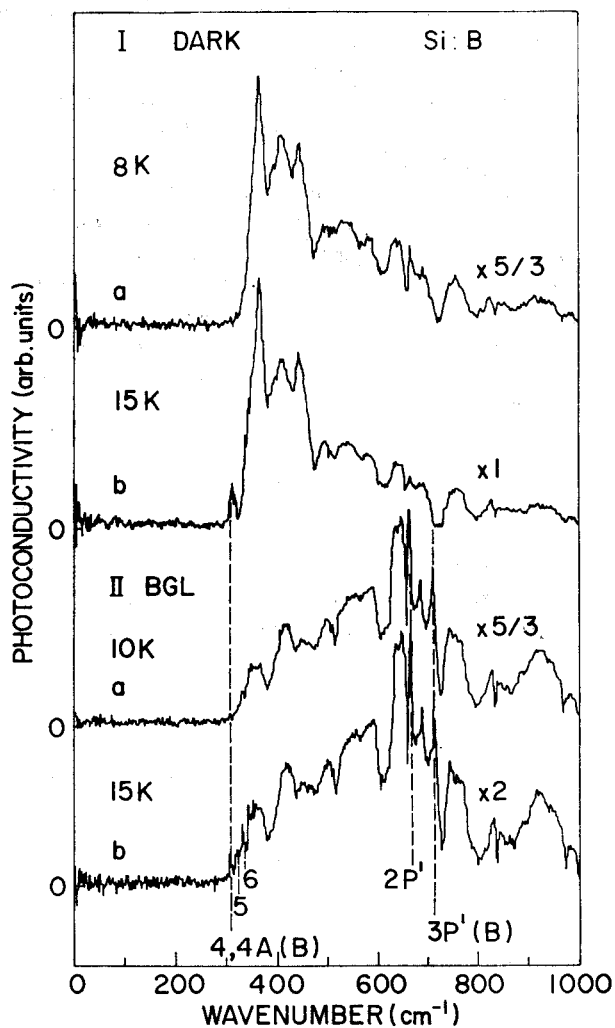


Fig. 2 El espectro de conductividad fototérmica de boro en *p*-Si, I: bajo condiciones de "oscuridad", a) a 8 K y b) a 15 K; II: bajo iluminación BGL, a) a 10 K y b) a 15 K.

Figs. 5 y 6-I. Los espectros bajo iluminación BGL para este *n*-Si mostraron una dependencia notable del voltage de polarización aplicado y tienen huellas espectrales muy diferentes a los de los espectros de BGL de cualquier superred estudiada en este trabajo, (por ejem. ver Figs. 1-II o 2-II).

Espectros muy similares a los de la muestra 885 (y del boro en *p*-Si) fueron observados para las muestras 873 y 886 que tienen las mismas dimensiones en las capas de Si y de las aleaciones $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Solo difieren en el contenido del germanio de las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$: estas tienen 10 y 20 %, respectivamente. Para estas dos muestras solo se pudieron observar los espectros bajo iluminación BGL, pero de traza espectral casi idéntica a los de las Figs. 1-II (o 2-II).

En la Fig. 4 se muestran los espectros PTIS de la muestra 871. Esta muestra consiste de una superred de Si/Si_{0.90}Ge_{0.10} con capas alternantes de 200/100 Å de anchura. Es claramente contrastante en los espectros de PTIS de esta muestra el continuo que aparece iniciándose a 120 cm^{-1} , visible a 7.5 K bajo condiciones de oscuridad, Fig. 4-

I(a), y su desaparición gradual cuando se eleva la temperatura. En la Fig. 4-I(b), a 15 K, también bajo condiciones de "oscuridad", esta banda de transiciones se ve desplazada en su umbral a 225 cm^{-1} . Es también notable como la señal de fotoconductividad (SFC) encima de 500 cm^{-1} difiere de la del boro en el *p*-Si. Estas dos diferencias necesariamente deben tener su origen en las dimensiones más reducidas de las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en la superred ya que en todo lo demás es idéntica a la muestra 873 antes mencionada. Fig. 4-II muestra el espectro de PTIS de la misma muestra bajo iluminación BGL. En este caso no son visibles trazas de la misma banda de transiciones, a temperaturas tan bajas como 11.5 K. Sin embargo, la señal de fotoconductividad SFC encima de 500 cm^{-1} muestra los mismos detalles de superred que los de los espectros, en "oscuro". Bajo iluminación BGL, Fig 4-II, la señal del boro de las capas del *p*-Si ha dominado casi totalmente a la señal proveniente de las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, particularmente a frecuencias por abajo de 500 cm^{-1} . Estos dos hechos experimentales nos permiten aseverar que los espectros medidos en condiciones de "oscuridad" se originan principalmente de las capas de $\text{Si}_{0.90}\text{Ge}_{0.10}$ de esta superred.

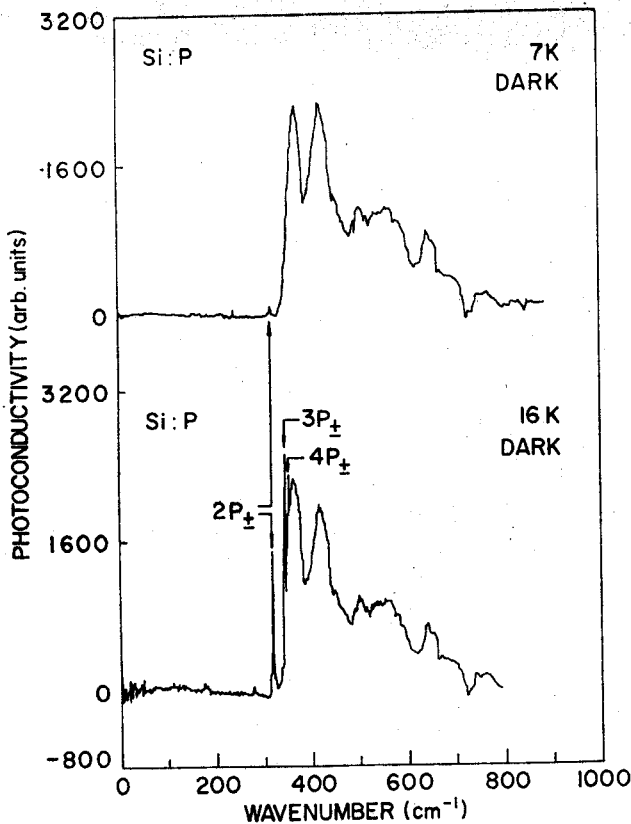


Fig. 3 El espectro de conductividad fototérmico de una muestra *n*-Si, a) a 7 K, y b) a 16 K, ambos bajo condiciones de oscuridad.

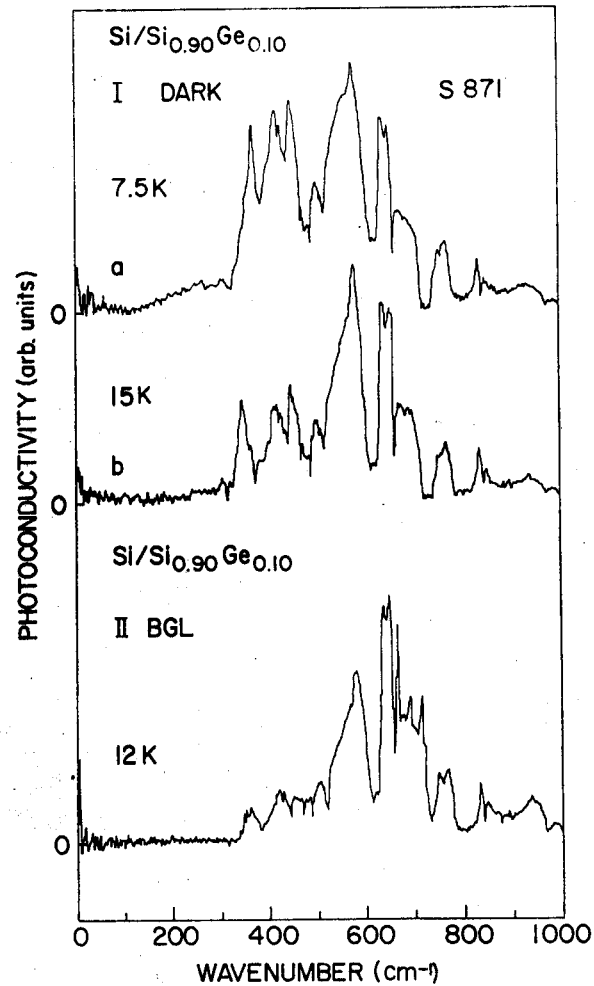


Fig. 4 El espectro de fotoconductividad de la muestra 871 que consiste de una superred de $\text{Si}/\text{Si}_{0.90}\text{Ge}_{0.10}$, de anchura por capas de $200/100 \text{ \AA}$, I: bajo condiciones de "oscuridad", a) a 7.5 K y b) a 15 K; II: bajo iluminación BGL a 12 K. En II-a) es claramente visible la banda de transiciones que comienzan a 120 cm^{-1} producida por el confinamiento del boro en las capas de $\text{Si}_{0.90}\text{Ge}_{0.10}$.

En la Fig. 5, (a)-(d), se muestran los espectros PTIS de la muestra 989. Esta consiste de una superred $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$, $200/100 \text{ \AA}$ por capa alternante. Por lo tanto, es idéntica en dimensiones a la muestra 871 de la Fig. 4. La única diferencia es el contenido de Ge en las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ y en que la muestra 989 fue intencionalmente impurificada con erbio (Tabla I). La superred se creció encima de una capa "buffer" de silicio no-impurificado, también crecida por MBE, 2000 \AA de anchura, la cual a su vez se creció sobre de un sustrato *p*-Si. Los espectros (a)-(c) muestran de manera muy clara una banda de transiciones entre $120\text{-}320 \text{ cm}^{-1}$. En este continuo son visibles cuatro mínimos, localizados en $244.4, 277.4, 309.0$ y 319.5 cm^{-1} que se originan por absorciones por el aceptor boro en las capas de Si, correspondientes a las transiciones B1, B2, B3,

B4+B4A, bien documentadas en la literatura.[11,15] A estas bajas temperaturas se conoce que estas transiciones no producen una señal conductiva fototérmica.[11] La SFC de la nueva banda de transiciones muestran una fuerte dependencia con la temperatura: aparece apenas visible a 4.8 K, curva (a), luego crece en intensidad a temperaturas crecientes alcanzando una intensidad máxima a 10 K, curvas (b) y (c), relativo al continuo de fotoconductividad encima de 320 cm^{-1} , y luego decreciendo monotónicamente en intensidad a 13 K para desaparecer a temperaturas mayores de 16 K, curva (d).

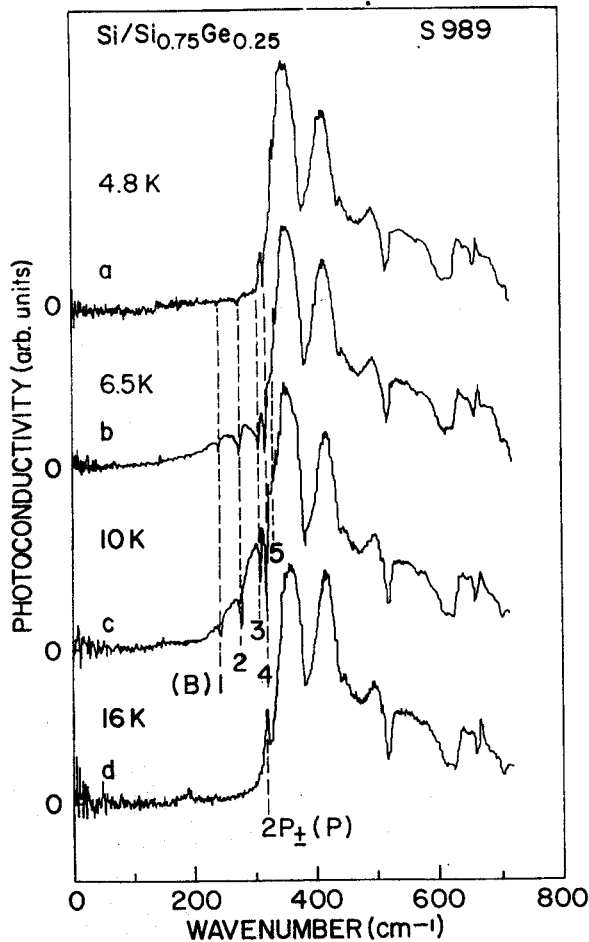


Fig. 5 El espectro de conductividad fototérmica de la muestra 989 que consiste de una superred de $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$, $200/100 \text{ \AA}$ de anchura por capa, crecida encima de una capa "buffer" de Si no impurificado, de 2000 \AA de anchura. Todos los espectros se midieron bajo condiciones de "oscuridad", a) a 4.8 K, b) a 6.5 K, c) a 10 K y d) a 16 K. En b-c es claramente visible una banda de transiciones entre $120\text{-}320 \text{ cm}^{-1}$ producida por los aceptores confinados en las capas de $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$.

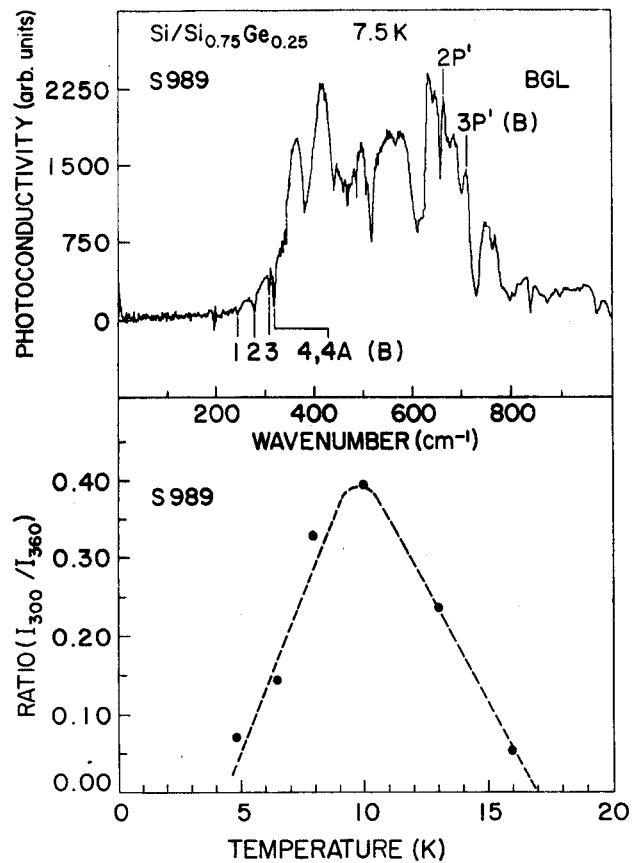


Fig. 6 I: El espectro de conductividad fototérmica de la muestra 989 bajo iluminación BGL a 7.5 K que muestra la persistencia de la banda de las transiciones entre estados aceptores confinados en las capas de $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$. II: La figura muestra la razón entre la intensidad de la transición a 300 cm^{-1} , proveniente de los aceptores confinados a la de 360 cm^{-1} que se origina por el fósforo en el sustrato de Si.

En la Fig. 6-I se muestra el espectro de PTI de la muestra 989 bajo iluminación BGL a 7.5 K. Bajo estas condiciones se puede observar que aunque la señal de PTI del boro en Si está presente, particularmente para la región espectral encima 500 cm^{-1} , la señal de las capas de $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ no ha sido enmascarada para esta muestra, i.e., la señal del continuo de transiciones debajo de 320 cm^{-1} es aún claramente visible. Este hecho sugiere que la movilidad de las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en esta muestra debe de ser sustancialmente mayor que para las otras muestras examinadas. Para las otras muestras la menor movilidad muy probablemente se debe a la muy alta impurificación intencional con el boro en el centro de cada capa de aleación de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, un hecho que tiende a decrementar a la movilidad muy severamente. La muestra 989 tiene erbio como impureza en todas las capas de $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$. El erbio no se ha observado que forme estados eléctricamente activos en el Si,[18] aunque sí lo hace en el Ge,[19] pero es una incógnita

si lo hará en una aleación de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Nuestro resultado de la movilidad relativamente alta para esta muestra sugiere que el Er no forma estados aceptores en cantidades significativas en las capas tensionadas de aleación de $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$. La banda de transiciones entre estados aceptores entre $120\text{-}320\text{ cm}^{-1}$ se debe muy probablemente al boro residual que siempre existe en el Si y Ge como contaminante, y en consecuencia en el material crecido por MBE, que es difícil de preparar con menos de $|N_a - N_d| \leq 10^{16}\text{ cm}^{-3}$.

La Fig. 6-II muestra graficada la razón entre las magnitudes de las señales a 300 cm^{-1} de esta banda, que es una frecuencia muy cercana a la de su intensidad máxima, dividida entre la señal a 360 cm^{-1} , i.e que corresponde al primer máximo observado para el CFC del boro en esta muestra. Este diagrama muestra sin ambigüedades que la señal de fotoconductividad de esta banda de estados aceptores se origina de transiciones entre un estado base a una banda de **estados ligados** que subsecuentemente son ionizados térmicamente. La señal de fotoionización directa desde estados que tienen $\epsilon_i \simeq 15\text{ meV}$ (120 cm^{-1}) puede únicamente disminuir para temperaturas crecientes de la red huésped, debido a la creciente ionización térmica normal y al hecho adicional muy bien conocido de que la movilidad de los portadores tiende a decrecer con temperaturas crecientes. Por otro lado, de manera similar la ionización térmica desde estados **ligados** fotoexcitados por la radiación del infrarrojo lejano incidente, proveniente del interferómetro decrece con temperaturas crecientes, debido al incremento de la población de fonones acústicos,[11] lo que contribuye a aumentar la señal fotoconductiva. La competencia entre estos tres fenómenos produce el comportamiento observado en esta figura.

En la Fig. 7 se presenta una comparación de los espectros de fotoconductividad observados en las muestras a) 989, b) 871 y c) de Si:B a 8 K, para números de onda por debajo de 450 cm^{-1} . En la Fig. resalta la diferencia de las transiciones debajo de 320 cm^{-1} que provienen de los aceptores confinados en las capas de las aleaciones de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ para las muestras 989 y 871. Las líneas de absorción en el espectro de la muestra 989, a) ya hemos discutido que se deben a boro residual en las capas alternantes de Si.

Finalmente, en la Fig. 8 se muestra el espectro PTIS de la muestra 846. Esta muestra consiste de una superred $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$, de $200/30\text{ \AA}$ por anchura de capa respectiva, crecida por MBE encima de un sustrato de *p*-Si. La Fig. 8-I muestra como bajo iluminación de luz BGL aparece una banda de fotoconductividad por debajo del umbral de las transiciones del boro a 320 cm^{-1} que se extiende desde $\simeq 260\text{ cm}^{-1}$ y que se une con el CFC del boro, a 10 y 13 K. Esta banda de fotoconductividad tiene que ser nuevamente la manifestación de los efectos de confinamiento del boro en las capas de $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$, que para esta muestra son de dimensiones aún más pequeñas comparadas con el radio de Bohr efectivo a_0 del aceptor en este material. La señal para frecuencias mayores a 600 cm^{-1} de estos espectros luce muy similar a la del boro en Si pero muy realzada en magnitud. La Fig. 8-II presenta un espec-

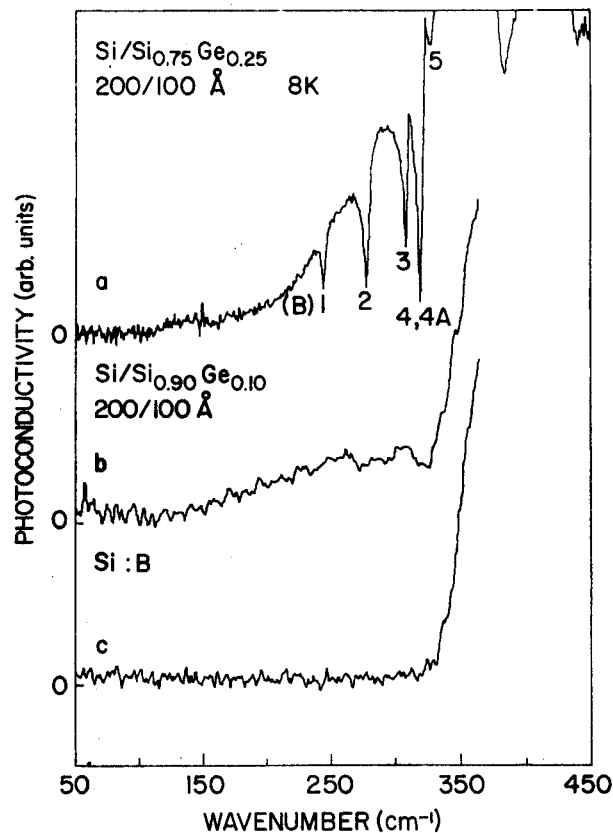


Fig. 7 Comparación entre los espectros de fotoconductividad a 8 K de: a) la muestra 989, superred $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$, b) la muestra 871, superred $\text{Si}/\text{Si}_{0.90}\text{Ge}_{0.10}$, ambas de $200/100\text{ \AA}$ de anchura por capa, y c) un sustrato de Si con boro como impureza mayoritaria.

tro de esta muestra a 10.4 K bajo condiciones de "oscuridad", tomado con un divisor de haces del interferómetro diferente (de $6\text{ }\mu\text{m}$ de anchura). La señal es muy similar a la del Si:B en condiciones similares y la señal de los aceptores confinados en la capa de $\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ ya no es visible. Algunas transiciones discretas aparecen a 339.54 , 343.99 , 347.55 y 352.01 cm^{-1} producidas por transiciones entre estados aceptores del boro, clasificadas como 6, 7, 8, 9 en la literatura.[11]

DISCUSION

Todas las superredes examinadas tienen en común la misma dimensión de las capas alternantes de silicio, 200 \AA . Ellas solo difieren en las dimensiones y concentraciones de Ge en las capas de la aleación de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Para superredes con dimensiones de la capa de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ de 200 \AA y para concentraciones de 10, 15, 20 y 25% de Ge no observamos novedades espectrales relevantes diferentes a las del *p*-silicio ordinario con boro como impureza mayoritaria. Solo para muestras con dimensión de las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ de 100 \AA y menores observamos nuevos detalles espectrales debajo del umbral de las transiciones del boro

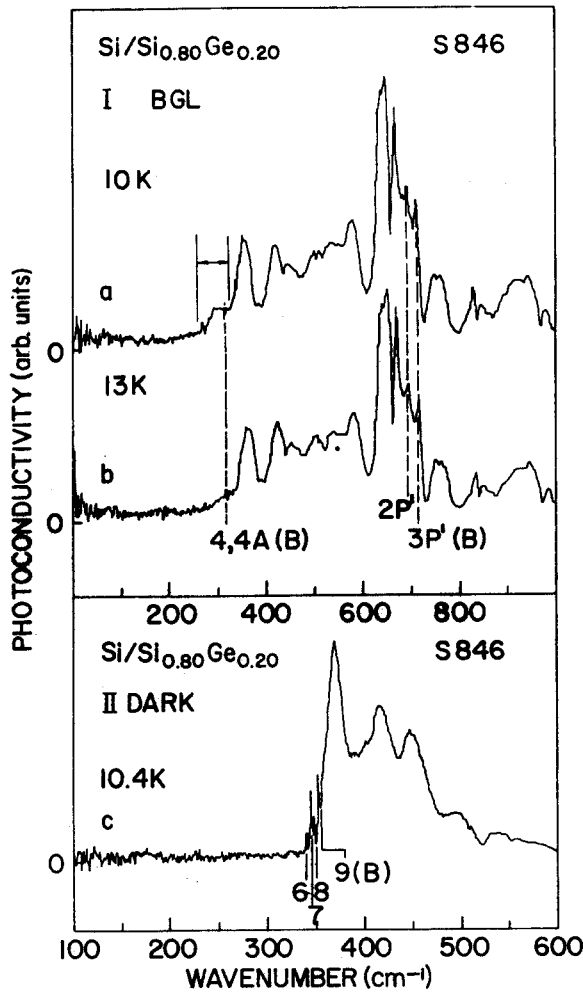


Fig. 8 El espectro de conductividad fototérmica de la muestra 846 que consiste de una superred de $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$, 200/30 Å de anchura por capa. I: bajo condiciones de "oscuridad", a) a 10 K, y b) a 13 K. II: bajo iluminación BGL, c) a 10.4 K.

en Si. Esto indica que los atributos espectrales diferentes de las muestras estudiadas en este trabajo deben originarse en las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

El hecho de que en las señales espectrales para este tipo de muestras sean siempre observables las características del boro en el silicio en "bulto", que solo existe en forma neutral en las capas alternante de $p\text{-Si}$ de la superred, sugiere que en general la señal del sustrato tipo- n ha sido suprimida en gran grado. Esto se debe al fenómeno muy bien documentado de que los portadores generados en esta región tienen que atravesar una estructura $p\text{-}n\text{-}p$ para llegar a los contactos que recogen la señal fotoconductiva.[12,16]

El boro en las aleaciones de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ no va a producir la misma secuencia de energías para los estados aceptores que produce en el silicio puro. Por lo tanto esto refuerza la interpretación de que las señales observadas en las muestras 846, 871, y 989 debajo de 320 cm^{-1} son generadas por

el boro presente en las capas tipo- p de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ impurificadas con el boro ambas intencional y no intencionalmente. El boro en el silicio domina casi siempre (excepto para la muestra 989) las señales por encima de 320 cm^{-1} con las mismas características y lo único probable es de nuevo que provengan de las capas de 200 Å de Si con impurificación residual de boro. Es claro que para estas capas el período no es suficientemente pequeño para afectar la distribución de los niveles energéticos del aceptor boro. Los espectros observados para la muestra 989 muestran espectros característicos del donador fósforo en el Si. No podemos eliminar la posibilidad de que en esto intervenga el hecho de que se creció en este caso la superred de $\text{Si}/\text{Si}_{0.75}\text{Ge}_{0.25}$ sobre una capa "buffer" no dopada de silicio de 2000 Å de ancho cuyo tipo eléctrico nos es desconocido.

Para las muestras 846 y 871, se observa que bajo iluminación con luz blanca BGL la banda de transiciones provenientes de las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ ya no es visible. La razón más probable de esto es que la razón de recombinación de las impurezas en estas capas es demasiado lenta en forma tal que al ser desdoblados por la iluminación con luz blanca la probabilidad de recombinación no alcanza a compensar la de desdoblamiento. Adicionalmente hay que considerar los siguientes posibles mecanismos físicos que influyen en disminuir la señal de fotoconductividad de estas impurezas: las capas de Si se esperan ser de mayor conductividad que las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, esto es por las muy diferentes concentraciones de impurezas en ellas, las que difieren por lo menos en un factor 100 relativo entre ellas; esto incide en que la movilidad de los portadores decrezca y sea relativamente pequeña en las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en estas superredes, lo que ha sido ya observado,[16] en comparación con la de los portadores en el Si, situación que es realizada aún más por el incremento en la movilidad en el material iluminado, debido a la neutralización eléctrica de las impurezas minoritarias y las correspondientes mayoritarias que las compensaban; y finalmente, existe el hecho de que los portadores producidos en las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ tienen que remontar los "band offsets",[17] es decir diferencias energéticas entre las bandas de las capas de Si y las de las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, que tienen bandas energéticamente menores. Todos estos factores contribuyen a reducir las señales de fotoconductividad que se originan en las capas de las aleaciones de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

El radio de Bohr efectivo para los aceptores de boro en Si con $\epsilon_i = 45.71\text{ meV}$ resulta en 13.5 Å calculado de la expresión

$$a_1 = (E_0/E_1)(k_0/k_1)a_0 \quad (1)$$

donde a_0 y E_0 representan el radio de Bohr y la energía de ionización del átomo de hidrógeno, a_1 y E_1 los mismos parámetros del aceptor en el material semiconductor, k_0 y k_1 representan las constantes dieléctricas del vacío y del semiconductor, respectivamente.

Un cálculo preliminar dentro de la aproximación esférica del Hamiltoniano para aceptores,[20,21] de las energías de ionización del estado base de los aceptores de boro en aleaciones de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ muestra que los radios de Bohr

de éstos varían en proporciones relativas que corresponden en el presente caso a 14, 14.6, 15.3, 15.9 y 16.5 Å para porcentajes de germanio en las aleaciones de 5, 10, 15, 20 y 25 %. Entonces para las capas de 200 Å la razón entre la dimensión de la capa L a la del radio de Bohr del aceptor de boro varía de 14.8 a 12.1, del silicio puro a la aleación con 25 % de germanio. Observamos que los efectos de confinamiento para los aceptores empiezan a ser importantes a dimensiones de 100 Å es decir para una razón $L/a_0 \approx 6$. Para la muestra 846 esta razón es casi $L/a_0 \approx 2$. Comparando con los cálculos para estados hidrogénicos en superredes de GaAs/AlGaAs,[1] se ve que para valores de $L/a_0 \geq 10$ se espera un cambio muy poco apreciable (≤ 5 % hacia mayores energías) en el valor de la energía de ionización de un aceptor en el centro del pozo. Sin embargo este cambio es ya del orden de 20 y 80 % para valores de L/a_0 de 6 y 2, respectivamente, y ambos hacia energías mayores. Esta comparación que solo debe considerarse de valor cualitativo ya que para esos resultados existe una dependencia en las masas efectivas y en la constante dieléctrica del GaAs, por lo que no son directamente escalables al caso de las superredes de Si/SiGe, con la complicación de estar estas tensadas, y de que estamos estudiando aceptores para los cuales hemos dicho ya que este modelo es aún menos adecuado. Nuestras observaciones sugieren prácticamente ningún cambio para las superredes de Si/SiGe con $L/a_0=12$ (200 Å), y cambios importantes, no fácilmente cuantificables, para los casos de $L/a_0=6$ y 2 (100 y 30 Å).

Aunque la aproximación esférica del Hamiltoniano para los aceptores en materiales cúbicos con la red tipo zincblenda da valores que subestiman hasta en un 40 % las energías de ionización para aceptores en Si y 10 % para los en Ge, no son esperables cambios relativos drásticamente diferentes entre las energías de ionización tomando los valores experimentales como referencia y corrigiéndolos por los factores que proporciona este modelo para las aleaciones $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Podemos considerar así confiable esta estimación para L/a_0 . Adicionalmente, se ve que efectuando las correcciones arriba discutidas para las energías de ionización de aceptores de boro en aleaciones de SiGe en bulto que estas se espera sean: 42, 40, 37.5, 35.5 y 33.5 meV para $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ con 5, 10, 15, 20 y 25 %. Dado que para la muestra 989 se observa el inicio de transiciones entre estados ligados desde 150 hasta valores mayores a 320 cm^{-1} (de 19 a 40 meV), se ve claramente de esto que la energía de ionización de los aceptores confinados se ha corrido ha energías mayores, posiblemente por un amplio factor ya que en el caso del modelo esférico se espera una energía de amarre del primer nivel excitado del orden de 8 meV,[8] aunque esta estimación lo más probablemente es que sea muy poco adecuada para los aceptores confinados. Este es justamente el tipo de comportamiento que es siempre predicho para impurezas hidrogénicas confinadas.[1,2,3,4,7]

En la aleación en "bulto" de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ se esperaría una secuencia discreta de niveles energéticos para el aceptor de boro, reflejado en una secuencia correspondiente de transiciones discretas como es el caso para el boro en Si, Figs. 5, 6 y 7. En una superred de Si/SiGe se altera esta secuencia

y se modifica esta imagen. Esto lo ocasiona el hecho de que se espera que para dimensiones del ancho de la capa en la superred L del orden de la del radio de Bohr de la impureza la energía de cualquier nivel de esta sea una función de la posición y medida con respecto al centro de la capa, es decir $E = E(L/2, y)$. Esto proporciona inmediatamente un continuo de niveles energéticos para lo que será todo nivel ligado discreto del aceptor en el material libre. Esto es lo que se refleja en los espectros de las superredes de las muestras 846, 871 y 989.

Esta aproximación esférica del Hamiltoniano de masas efectivas para los aceptores predice reducciones en las energías de ionización para los aceptores en el "bulto" de las aleaciones de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ con respecto a las que tienen en el silicio casi proporcionales al porcentaje de Ge. Esto implica que las ϵ_i esperadas para el boro serían de aproximadamente 42.5, 40, 37.5, 35 y 32.5 meV para las aleaciones de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ con 5, 10, 15, 20 y 25 % de Ge. Esto indica que el umbral para el continuo de fotoconductividad se espera que se corra a 260 y 320 cm^{-1} (sin tensiones aplicadas) para las aleaciones de 25 y 10 % de Ge como es el caso de las superredes de las muestras 989 y 871 estudiadas. Hay que considerar la situación física de que las capas de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ al tener una constante de red mayor que la de las capas de silicio, aquellas se encuentran sujetas a grandes tensiones. Esto ocasiona que los estados ligados se rompan y sean desplazados energéticamente de los valores iniciales para la red no tensionada, particularmente para el continuo de ionización.[12] Esto se refleja en corrimientos a valores energéticos menores de las transiciones entre los niveles aceptores.[12,22] Si las tensiones son homogéneas, como se ha observado y se espera para estas superredes,[23] los espectros tensionados resultantes consistirán también de transiciones discretas, pero desplazadas a menores energías.[22] La dependencia con la temperatura de las transiciones al menos igual y por debajo de 300 cm^{-1} para los aceptores confinados de la muestra 989 mostrado en la Fig. 6-II muestra que el confinamiento altera sustancialmente esta imagen y que se espera un continuo de ionización con ϵ_i sustancialmente mayor al predicho de $\approx 260 \text{ cm}^{-1}$ ($\approx 32.5 \text{ meV}$).

Las muestras 871 y 989, que tienen concentraciones respectivas de Ge de 10 y 25 % en las capas de aleación de SiGe y con la misma dimensión $L=100 \text{ Å}$, presentan espectros casi idénticos de aceptores confinados, Figs. 4 y 5. La más probable explicación de esto es que los radios de Bohr de estos aceptores es casi idéntico para los dos tipos de aleación y en consecuencia para las dos superredes vale que $L/a_0=6$. Aparte existe la situación física de que en la muestra 871 los aceptores se encuentran concentrados en una región $L/3$, mientras que en la muestra 989 están esparcidos en toda la dimensión L . Dado que hemos discutido que las energías de los estados en el pozo son funciones de la posición la extensión muy similar en la energía de las transiciones observadas para estas dos muestras parece indicar que en la muestra 871 los aceptores se distribuyeron en toda la capa de la aleación fuera de la región deseada de $L/3$.

CONCLUSIONES

Hemos observado en espectros de fotoconductividad de lejano infrarrojo que al mantener las capas de Si con anchura constante, en superredes de Si/Si_{1-x}Ge_x a anchuras de 100 Å y menores de las capas de Si_{1-x}Ge_x aparecen bandas de transiciones entre 150 a 300 cm⁻¹, provenientes de los aceptores confinados en estas capas. El comportamiento observado de estas bandas de transiciones con la temperatura, nos permite establecer sin ambigüedades que estas se originan de transiciones entre las bandas de estados base a bandas de estados ligados, como se espera de la dependencia energética de estos niveles de la posición de la impureza aceptora con respecto al centro de la capa de la aleación. Encima de 300 cm⁻¹ la señal de PTIS se encuentra dominada por la de las capas de p-Si y en algunos casos por la del n-Si del substrato. Las muestras estudiadas de 100 Å de anchura no muestran dependencia apreciable de la concentración de Ge en las capas de la aleación de Si_{1-x}Ge_x en los efectos de confinamiento observados. Dado que no existen espectros energéticos calculados para los estados ligados de aceptores en estas superredes de Si/SiGe y que los datos que existen en la literatura para GaAs/Al_xGa_{1-x}As no son adaptables fácilmente por ser calculados libre de tensiones, los resultados espectrales que presentamos en el presente trabajo deberán esperar el avance de la teoría para ser plenamente identificados.

AGRADECIMIENTOS

H. N. agradece la hospitalidad del grupo del Prof. T. Timusk y de la Universidad de McMaster durante los veranos de 1989 y 1990, así como apoyo financiero de la agencia: Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada, a través de un: International Scientific Exchange Award; y de CONACyT-México a través de "Apoyos Especiales" por apoyar el viaje aéreo en el verano de 1989.

REFERENCIAS

1. G. Bastard, *Phys. Rev. B* **24**, 4714 (1981).
2. G. Bastard and J.A. Brum, *III J. Quantum Electronics QE-22*, 1625 (1986).
3. R.L. Greene and K.K. Bajaj, *Solid State Commun.* **45**, 825 (1983). Ver también: R.L. Greene and K.K. Bajaj, *Phys. Rev. B* **31**, 913 (1985).
4. D.C. Reynolds, K.K. Bajaj, C.W. Litton, P.W. Yu, W.T. Massenlik, R. Fischer and H. Morkoc, *Phys. Rev. B* **29**, 7038 (1984).
5. N.C. Jarosik, B.D. McCombe, B.V. Shanabrook, J. Comas, J. Ralston and G. Wicks, *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1283 (1985).
6. J.M. Mercy, N.C. Jarosik, B.D. McCombe, J. Ralston and G. Wicks, *J. Vac. Sci. Technol. B* **4**, 1011 (1986).
7. W.T. Massenlik, Y. Ching Chang and H. Morkoc, *Phys. Rev. B* **28**, 7373 (1983). W.T. Massenlik, Y. Ching Chang and H. Morkoc, *Phys. Rev. B* **32**, 5190 (1985).
8. R.C. Miller, A.C. Gossard, W.T. Tsang and O. Munteanu, *Phys. Rev. B* **25**, 3871 (1982).
9. D. Gammon, R. Merlin, W.T. Massenlik and H. Morkoc, *Phys. Rev. B* **33**, 2919 (1986).
10. A.A. Reeder, B.D. McCombe, F.A. Chambers and G.P. Devane, *Phys. Rev. B* **38**, 4318 (1988).
11. Para una revisión del tema de los niveles de energía de impurezas en semiconductores y de las técnicas espectroscópicas que se han usado para caracterizarlos se recomienda leer: A.K. Ramdas and S. Rodríguez, *Rep. Prog. Phys.* **44**, 1297 (1981); Sh. Kogan and T.M. Lifshits, *Phys. Status Solidi a* **39**, 11 (1977).
12. H. Navarro, T. Timusk, W.R. Datars and D.C. Houghton, a publicarse (1991).
13. A.S. Oates, R.C. Newman, R. Woolley, G. Davies, E.C. Lightowlers, M.J. Binns and J.G. Wilkes, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 705 (1985).
14. Y. Itoh, T. Nozaki, T. Masui and T. Abe, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 488 (1985).
15. A. Onton, P. Fisher and A.K. Ramdas, *Phys. Rev.* **163**, 686 (1967).
16. H.F. Jang, W.R. Datars, T. Timusk, A.A. Berezin and D.C. Houghton, *Can. J. Phys.* **67**, 321 (1989).
17. R. People and J.C. Bean, *Appl. Phys. Lett.* **48**, 538 (1986).
18. H. Ennen, J. Schneider, G. Pomrenke, and A. Axmann, *Appl. Phys. Lett.* **43**, 943 (1983). Ver también: T. Oestereich, C. Swiatkowski, and I. Broser, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 446 (1990).
19. S. J. Pearton, *Phys. Stat. Sol. (b)* **109**, K135 (1982). Ver también: H. Navarro, T. Timusk, W.R. Datars and D.C. Houghton, para publicarse (1991).
20. A. Baldereschi, and N.O. Lipari, *Phys. Rev. B* **9**, 1525 (1974).
21. H. Navarro, R. Brito-Orta and T. Tello-Martínez, para publicarse (1991).
22. R.L. Jones and P. Fisher, *Phys. Rev. B* **2**, 2016 (1970).
23. R. People and J.C. Bean, *Appl. Phys. Lett.* **47**, 322 (1985).
24. R. People, *Phys. Rev. B* **32**, 1405 (1985).

(*) También en tiempo parcial en el Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

TABLAS

Table 1: Características físicas las superredes Si/Si_{1-x}Ge_x estudiadas en este trabajo.

Muestra	Ge %	Períodos	d Si Å	d Si _{1-x} Ge _x Å	anchura impurific. Å	Dopaje cm ⁻³	Dopaje del Substrato cm ⁻³
873	10	20	200	200	60	B 10 ¹⁸	n 2x10 ¹⁵
885	15	20	200	200	60	B 10 ¹⁸	n ~10 ¹⁵
886	20	20	200	200	60	B 10 ¹⁸	n ~10 ¹⁵
847	25	5	200	200	60	B 10 ¹⁷	p ~10 ¹⁵
871	10	20	200	100	30	B 10 ¹⁷	n 2x10 ¹⁵ .
846	20	25	200	30	10	B 10 ¹⁸	p ~10 ¹⁵
989	25	50	200	100	100	Er 5x10 ¹⁸	p ~10 ¹⁵