

**ANISOTROPIAS OPTICAS EN CRISTALES DE  
TELURO DE CADMIO**

Tesis que para obtener el grado de  
Maestro en Ciencias  
(Física)

Presenta:

**Jorge Adalberto Huerta Ruelas**

Posgrado en Física  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Mayo 1995

**ANISOTROPIAS OPTICAS EN CRISTALES DE  
TELURO DE CADMIO**

Tesis que para obtener el grado de  
Maestro en Ciencias  
(Física)

Presenta:

**Jorge Adalberto Huerta Ruelas**

Posgrado en Física  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Mayo 1995

**ANISOTROPIAS OPTICAS EN CRISTALES DE  
TELURO DE CADMIO**

Tesis que para obtener el grado de  
Maestro en Ciencias  
(Física)

Presenta:

**Jorge Adalberto Huerta Ruelas**

Posgrado en Física  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Mayo 1995

## Agradecimientos

Agradezco al Dr. Alfonso Lastras Martínez la asesoría para la realización de este trabajo.

Al Dr. Ciro Falcony Guajardo (examinador externo), Dr. Jesús Dorantes Dávila, Dr. Hugo Navarro Contreras y Dr. Francisco de Anda Salazar, miembros de jurado calificador, por sus valiosos comentarios y recomendaciones.

Al M. en C. Luis Felipe Lastras Martínez y M. en C. Raul Balderas Navarro por su apoyo incondicional en la realización de este trabajo y su amistad.

A todo el personal del Instituto de Investigación en Comunicación Óptica.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la beca asignada para la realización de mis estudios.

A la Facultad de Ingeniería de la Universidad Autónoma de Zacatecas por las facilidades otorgadas para la realización de esta tesis.

• Dedicatoria

• A mis padres

• A Paty, Jorge y Andrés

• A mis hermanos

RESUMEN.....	2
<b>CAPITULO I. INTRODUCCIÓN.....</b>	<b>3</b>
<b>CAPITULO II. TÉCNICAS EXPERIMENTALES.....</b>	<b>6</b>
A. ESPECTROSCOPIA DE REFLECTIVIDAD DIFERENCIAL.....	6
1. Descripción de la técnica.....	7
2. Descripción del espectrómetro.....	7
3. Análisis óptico del espectrómetro.....	9
4. Ejecución del experimento.....	12
B. ESPECTROSCOPIA DE FOTORREFLECTANCIA.....	14
1. Descripción del espectrómetro de fotorreflectancia.....	15
<b>CAPITULO III. RESULTADOS EXPERIMENTALES.....</b>	<b>16</b>
A. ANISOTROPIAS OPTICAS.....	16
B. FOTORREFLECTANCIA.....	19
C. EVOLUCION EN EL TIEMPO DEL ESPECTRO DE ANISOTROPIAS OPTICAS.....	20
<b>CAPITULO IV. ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS.....</b>	<b>22</b>
A. INTERPRETACION DE LA COMPONENTE DE VOLUMEN.....	23
B. DETERMINACIÓN DE LAS ENERGÍAS DE LOS PUNTOS CRÍTICOS.....	32
C. DETERMINACIÓN DE LAS ENERGÍAS DE DESDOBLAMIENTO.....	33
D. EVOLUCION DEL ESPECTRO DE ANISOTROPIAS ÓPTICAS.....	36
<b>CAPITULO V. CONCLUSIONES.....</b>	<b>38</b>
APÉNDICE A. PROPIEDADES FÍSICAS Y APLICACIONES DEL CDTe.....	41
APÉNDICE B. ORIENTACION DE LAS SUPERFICIES.....	4
APÉNDICE C. ESPECTROS DE MODULACION Y LA FUNCION DIELECTRICA.....	44
1. Relación entre la teoría y el experimento.....	44
2. Modelo parabólico simple.....	46
APÉNDICE D. ACOPLAMIENTO SPIN-ORBITA.....	47
REFERENCIAS.....	48

## Resumen

En el presente trabajo, se realizaron mediciones de anisotropías ópticas mediante la técnica de espectroscopía de reflectividad diferencial (ERD), en cristales de Telurio de Cadmio para las superficies (100), (211) y (110), en el rango de energías de 1.24 a 5.4 eV. Los espectros obtenidos son similares a los obtenidos en materiales del grupo III-V en el sentido que se observan al menos dos componentes: Una llamada de volumen y otra de trasfondo. Se encontró que alrededor de la transición fundamental  $E_0(1.51 \text{ eV})$  se da un rompimiento de la degeneración de la banda de huecos pesados y ligeros, atribuido a la existencia de dislocaciones que originan la pérdida de la simetría cúbica del cristal. También se ha determinado que para procesos superficiales en CdTe, la máxima variación en el espectro de reflectividad diferencial ocurre alrededor de 2.2 eV. Estos resultados prueban que es posible utilizar la técnica de ERD en el estudio *in situ* y en tiempo real, en el crecimiento de películas epitaxiales basadas en CdTe, pudiendo controlar la dinámica de la superficie y la deformación producida por defectos. Para el CdTe se concluye que las mejores longitudes de onda para el monitoreo de procesos superficiales se encuentran en el intervalo de 2 a 2.5 eV, y para el estudio de defectos en un intervalo alrededor de  $E_0$ .

# CAPITULO I.

## INTRODUCCIÓN

En la última década, la técnica de espectroscopia de reflectividad diferencial (ERD), se ha desarrollado como sonda óptica para el estudio y la caracterización de fenómenos superficiales en semiconductores cúbicos. Entre las aplicaciones que se le ha dado a la ERD citaremos las de mayor interés:

- 1) Caracterización *in situ*, en tiempo real del crecimiento epitaxial de películas de GaAs y (GaAl)As por Hazes Moleculares (MBE)<sup>1</sup> y por Epitaxia en Fase de Vapor por medio de compuestos organometálicos (MO-CVD).<sup>2</sup>
- 2) Determinación *in situ* y tiempo real del nivel y tipo de impurificación de películas epitaxiales en reactores de MO-CVD.<sup>3</sup>
- 3) Estudios en tiempo real del crecimiento de superredes de GaInP-GaAs por MOCVD en los cuales se determinaron con precisión los tiempos y cantidades de flujo necesarios para obtener las composiciones requeridas de las películas epitaxiales.<sup>4</sup>
- 4) Estudio de procesos electroquímicos en interfaces electrolito-semiconductor.<sup>5</sup>
- 5) Estudio *in situ* de superficies reconstruidas de la superficie (100) de GaAs preparadas en ultra alto vacío por MBE y simultáneamente caracterizadas por difracción de electrones reflejados de alta energía (RHEED).<sup>6</sup>

- 6) Estudio de crecimiento epitaxial por haces moleculares metalorgánicos (MOMBE) con precisión del crecimiento de una monocapa de AlAs.<sup>7</sup>
- 7) Caracterización del crecimiento de películas submonocapa de silicio depositadas en substratos de GaAs(001) con sensibilidad a la superficie del orden de  $\frac{1}{200}$  de una monocapa.<sup>8</sup>

La técnica de ERD puede ser utilizada en ambientes a presión ambiental, a bajas y altas temperaturas, que la hacen ideal para aplicaciones en reactores de MO-CVD. En relación a esto, mencionaremos que ERD tiene ventajas sobre la elipsometría espectroscópica, en el sentido de que mientras esta última es sensible a las propiedades de volumen de la película epitaxial bajo estudio, ERD es sensible principalmente a las propiedades ópticas de la superficie.

La técnica de ERD consiste en medir la diferencia en reflectividad de luz polarizada incidiendo paralela a los ejes ópticos del cristal.<sup>9</sup> El principio físico de esta espectroscopía, esta basado en la presencia de la superficie que rompe la simetría de las propiedades ópticas del volumen que, nominalmente, son isotrópicas para semiconductores cúbicos, por lo que cualquier anisotropía medida provendrá principalmente de la superficie.

Los mecanismos físicos que dan origen a los espectros de reflectividad diferencial no están completamente entendidos en la actualidad. Existen varios mecanismos que contribuyen parcialmente al espectro: efectos de campo local,<sup>10</sup> reconstrucción superficial,<sup>11</sup> fenómenos de dispersión espacial,<sup>12</sup> efectos electro-ópticos lineales<sup>13</sup> y cuadráticos,<sup>14</sup> y generación anisotrópica de dislocaciones.<sup>15</sup>

La diversidad de fenómenos que contribuyen a los espectros de ERD y la importancia de las aplicaciones que se han encontrado para esta espectroscopía, justifica la investigación de la fenomenología asociada a la ERD en tantos materiales como sea posible, a fin de clarificar los mecanismos físicos involucrados. Tomando esto en cuenta, el objetivo de esta tesis fue la de medir anisotropías ópticas en el rango de 230-1000 nm (1.24 eV - 5.39 eV), para el material Telurio de Cadmio<sup>†</sup> (CdTe) en las superficies (100), (211) y (110), a fin de compararlos con espectros similares de semiconductores IV y III-V. El rango de energías elegido es para incluir en el estudio, la transición fundamental  $E_0$  (1.51 eV) del CdTe y las transiciones  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ , que es en el rango que se ha trabajado en las referencias dadas al inicio de esta introducción. Se hace notar que el presente estudio es el primero que se lleva a cabo en un semiconductor de la familia II-VI. Además de lo anterior, se llevaron a cabo mediciones de fotorreflectancia en los mismos cristales de CdTe, las cuales nos ayudaron a interpretar los espectros de RD obtenidos.

Esta tesis está organizada como sigue. En el capítulo II se describen las técnicas experimentales que fueron utilizadas en este trabajo. En el capítulo III se presentan los resultados experimentales. En el capítulo IV se analizan dichos resultados, y finalmente, en el capítulo V, se dan las conclusiones de esta tesis y se mencionan las perspectivas y el trabajo a continuar en este tema.

---

<sup>†</sup> Ver apéndice A donde se dan algunos parámetros del CdTe y se citan algunas de sus aplicaciones

## CAPITULO II.

### TÉCNICAS EXPERIMENTALES

El objetivo de las espectroscopías moduladas es cambiar algún parámetro de la muestra (modulación externa) o del sistema de medición (modulación interna), con la finalidad de producir un cambio en la reflectividad óptica de la muestra bajo estudio. De las técnicas experimentales empleadas en este trabajo, la reflectancia diferencial correspondería a una modulación interna, mientras que la fotorreflectancia lo sería a una modulación externa. En ambos casos, los cambios de reflectividad producidos son típicamente menores a las milésimas de la reflectividad promedio, por lo que para su medición se requiere de técnicas de detección sincrónica (detección sensitiva a la fase).

En este capítulo se describe primeramente la técnica de reflectividad diferencial. En seguida, se hace una descripción del espectrómetro empleado, incluyendo un análisis óptico del mismo. Se incluye igualmente, el procedimiento para llevar a cabo las mediciones de reflectividad diferencial. En la última parte del capítulo se describe también la técnica de fotorreflectancia, la configuración del espectrómetro, y la ejecución del experimento.

## ***A. Espectroscopía de reflectividad diferencial***

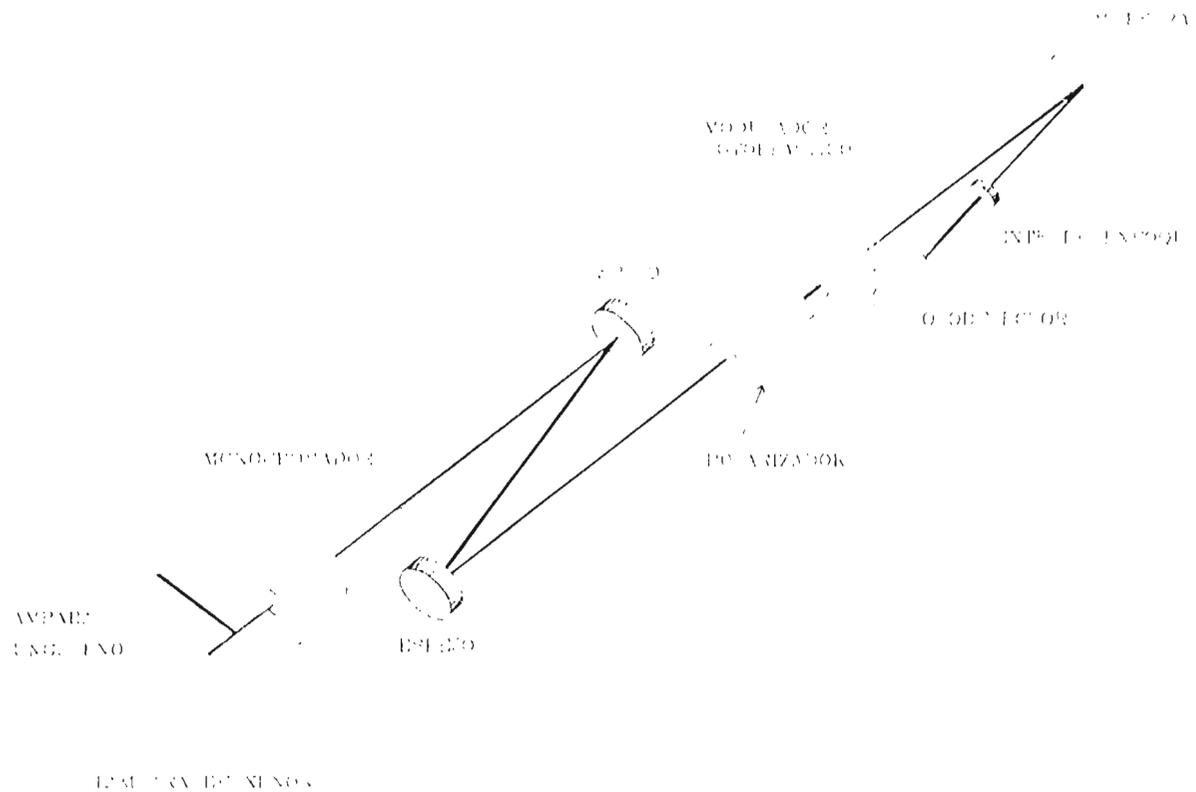
### **1. Descripción de la técnica**

La espectroscopía de reflectividad diferencial para la determinación de anisotropías ópticas, consiste en hacer incidir en forma normal a la superficie del cristal, luz linealmente polarizada, con vectores de polarización a lo largo de dos ejes ópticos, calculando la diferencia en reflectividad normalizada. Para las dos orientaciones de polarización, esta diferencia en reflectividad se origina por la pérdida de la simetría cúbica (que discutiremos durante el trabajo) del semiconductor en la superficie del cristal. La ERD es de gran importancia, porque nos permite caracterizar superficies para control de procesos en tiempo real.

### **2. Descripción del espectrómetro**

Las mediciones fueron realizadas en el espectrómetro de modulador fotoelástico descrito en un trabajo anterior<sup>16</sup>. Dicho sistema está esquemáticamente mostrado en la figura 1. Con el objeto de medir en un rango mayor de energía, se emplearon dos lámparas, una lámpara de Xenón de 75 Watts (Kratos LH 150/1, con fuente de poder Kratos LPS 25HR), y otra de Tungsteno de 75 Watts (lámpara de halógeno de proyector). Esto nos permitió realizar mediciones en los rangos de 1.77-5.39 eV y 1.24-1.77 eV, respectivamente. Para cambiar de una lámpara a otra se empleó un espejo en una base móvil que permite seleccionar la lámpara deseada. Al cambiar de lámpara, es necesario cambiar la rejilla de difracción del monocromador. Para la lámpara de Xenón se usa una rejilla de difracción de

1200 líneas por milímetro optimizada a 240 nm y para la de Halógeno una de 590 líneas por milímetro optimizada a 1000 nm.



*Figura 1. Diagrama del espectrómetro para medición de la reflectividad diferencial.*

La luz que se obtiene del monocromador se enfoca en la muestra mediante dos espejos de longitud focal 50 cm (oriel 44470). Antes de incidir en la muestra, la luz es polarizada y modulada. La polarización se realiza mediante un prisma rochon (Optics for Research PUR-12) a un ángulo de  $45^\circ$  con respecto al plano de incidencia. A continuación pasa por el modulador fotoelástico (Hinds International PFM-80), el cual consiste de un cristal que se vuelve birrefringente con la aplicación de un esfuerzo mecánico a lo largo de un eje óptico del cristal, obteniéndose una señal modulada a 50 Khz. La luz reflejada se

enfoca con una lente de cuarzo de longitud focal 5 cm en un fotodetector de silicio con preamplificador integrado (United Detector Technology UDT-455). La señal eléctrica producida por el detector es una señal de AC con un nivel de DC mayor en tres ordenes de magnitud aproximadamente (esto depende del tamaño de la anisotropía en la muestra). La señal del detector es amplificada en un preamplificador corriente-voltaje. Posteriormente se divide en dos para medir el DC y la AC. La amplitud de la componente de AC es medida con un amplificador sensible a la fase ("Lock-in" SR530 Stanford Research Systems). La componente de DC es medida con un multímetro digital (Keithley 199 DMM/Scanner). Ambos equipos son controlados por la computadora mediante la interfaz IEEE-488

Durante las mediciones, la muestra es montada de un plato rotante controlado por computadora en pasos de 0.9° grados. El sistema de montaje consiste de dos platos de aluminio de 4 pulgadas de diámetro unidos con un resorte y tres tornillos que permiten ajustar el plano de la muestra perpendicular al eje de rotación. Esto permite realizar mediciones con diferentes posiciones angulares a fin de maximizar la señal. El arreglo permite también eliminar las señales parásitas, tal como se describe en la pág. 14.

### 3. Análisis óptico del espectrómetro

El análisis óptico del espectrómetro, se describe con las convenciones de la Figura 2. El vector de Jones de la luz incidente en la muestra después de que pasa por el prisma rochon y el modulador fotoelástico es

$$\mathbf{E} = |\mathbf{E}| T = |\mathbf{E}| \begin{bmatrix} e^{i\delta} \sin\beta \\ \cos\beta \end{bmatrix}, \quad (1)$$

donde  $T$  es la matriz de Jones de transformación debida al polarizador y al modulador fotoelástico,  $\mu$  es el ángulo de orientación del vector de polarización al salir del prisma, y  $\delta$  es el retraso en fase dependiente del tiempo introducido por el modulador fotoelástico en la componente  $x$  del vector de polarización referido a la componente  $y$ . Para un retraso de fase pico de  $+\pi$ ,  $\delta$  tiene una dependencia en el tiempo dada por  $\delta = \pi \sin(\omega t)$ , donde  $\omega$  es la frecuencia del modulador fotoelástico (50 KHz).

Para simplificar el análisis, se considera incidencia normal<sup>‡</sup>, donde la respuesta óptica de la superficie de la muestra esta caracterizada por la matriz de Jones,

$$M = \begin{bmatrix} r_1 \cos^2 \varphi + r_2 \sin^2 \varphi & (\Delta r) \sin \varphi \cos \varphi \\ (\Delta r) \sin \varphi \cos \varphi & r_2 \cos^2 \varphi + r_1 \sin^2 \varphi \end{bmatrix}, \quad (2)$$

donde  $r_1$  y  $r_2$  son las reflectividades de la muestra para los vectores de polarización paralelos a los dos ejes principales de la muestra,  $\Delta r = r_1 - r_2$ , y  $\varphi$  es el ángulo de orientación del eje óptico de la muestra como se muestra en la Figura 2.

---

<sup>‡</sup> Para un calculo más detallado consultar la referencia [16]

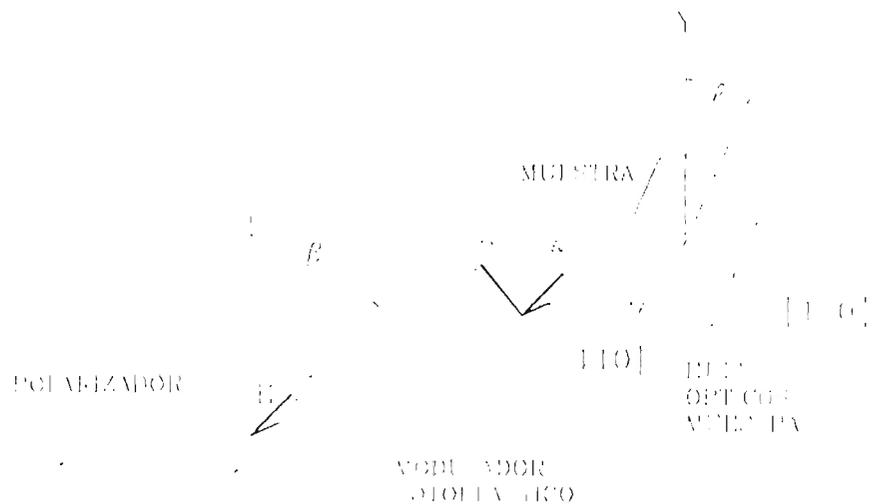


Figura 2. Análisis óptico del espectrómetro. Convenciones utilizadas para los ángulos que aparecen en el texto.

La intensidad de la señal óptica que llega al detector esta dada por

$$I(t) = C |\mathbf{E}|^2 (MT)^t (MT), \quad (3)$$

donde  $C$  es una constante que depende de la muestra.

Sustituyendo Ecs. (1) y (2) en la ec. (3) y haciendo  $\beta = \pi / 4$ , como se encuentra en el espectrómetro, se obtiene

$$I(t) = C |\mathbf{E}|^2 R + \frac{1}{2} C \Delta R |\mathbf{E}|^2 \text{sen}(2\varphi) \cos \delta, \quad (4)$$

donde

$$R := \frac{1}{2} (|r_1|^2 + |r_2|^2) \quad \text{y} \quad \Delta R := (|r_1|^2 - |r_2|^2)$$

Una transformada de Fourier de  $\cos \delta$  muestra únicamente armónicos pares. Entonces se sintoniza el amplificador sensible a la fase a una frecuencia  $2\omega$ , obteniéndose una señal de

salida producida únicamente por el segundo armónico de  $\cos \delta$ , ya que el amplificador utilizado contiene una respuesta armónica despreciable. Además, como el coeficiente de Fourier del segundo armónico es cercano a uno, se consideran únicamente los términos que contribuyen a la señal a la salida del amplificador, permitiéndonos escribir con la ayuda de la ecuación (4)

$$\Delta I(t) / I = \frac{1}{2} [\Delta R) / R] \operatorname{sen} (2\varphi) \cos (2\omega t) + I_p(t), \quad (5)$$

donde  $\Delta I(t) / I$  es la señal óptica incidente normalizada en el detector,  $(\Delta R) / R$  es la señal de reflectancia diferencial, e  $I_p$  es una señal parásita que tiene frecuencia  $2\omega$  pero no depende de  $\varphi$ , y que será eliminada con el método de medición utilizado.

Finalmente, la señal eléctrica normalizada a la salida del amplificador esta dada por

$$\Delta S / S = [\Delta R) / R] \operatorname{sen} (2\varphi) + S_p, \quad (6)$$

donde  $S_p$  es alguna posible señal parásita.

#### 4. Ejecución del experimento

Las muestras fueron medidas, tanto como las proporcionó el fabricante sin ninguna preparación adicional, como pulidas con un procedimiento mecánico-químico empleando una solución de Bromo y Metanol en una proporción aproximada de 0.5:100 (0.5 Br<sub>2</sub> CH<sub>3</sub>OH).<sup>17</sup> El tratamiento químico mecánico se lleva a cabo frotando el cristal contra un papel filtro empapado con la solución de Bromo y Metanol, siguiendo una trayectoria en forma de ocho.

Para realizar la alineación de la muestra en el espectrómetro, el monocromador se coloca primeramente a una longitud de onda de 550 nm, ya que en este valor se tiene la mayor intensidad luz proveniente de la lámpara. En seguida, la muestra se fija al plato giratorio, con pasta adhesiva. Se evita el exceso de pasta, para no tener reflejos que generen una señal parásita. Se verifica que al rotar el plato, la mancha de luz no salga de la muestra.

Para medir la diferencia en reflectividad es necesario rotar la muestra. Para evitar que el ángulo de reflexión de la luz varíe al rotar, se utiliza un láser de He-Ne para ajustar los tornillos del plato hasta que el punto reflejado deja de preceder, manteniéndose en un punto. A continuación se pone a girar la muestra en forma continua. Esto genera en el amplificador una señal de periodo  $2F$ , donde  $F$  es la frecuencia de rotación del plato. Si el sistema está bien alineado, la diferencia de reflectividad medida por el amplificador, será una señal senoidal centrada en cero.<sup>18</sup>

La señal de referencia para el amplificador sensible a la fase (*lock-in*) es proporcionada por el modulador fotoelástico. La diferencia de fase entre la señal a medir y la de referencia se ajusta para obtener la máxima señal de anisotropía.

Después de ajustar la fase, se rota la muestra en pasos de  $0.9^\circ$  grados, hasta que la señal en el amplificador sea máxima. En esta posición uno de los ejes ópticos de la muestra coincide con el ángulo de la luz polarizada, con lo cual se considera que la muestra ha sido alineada.

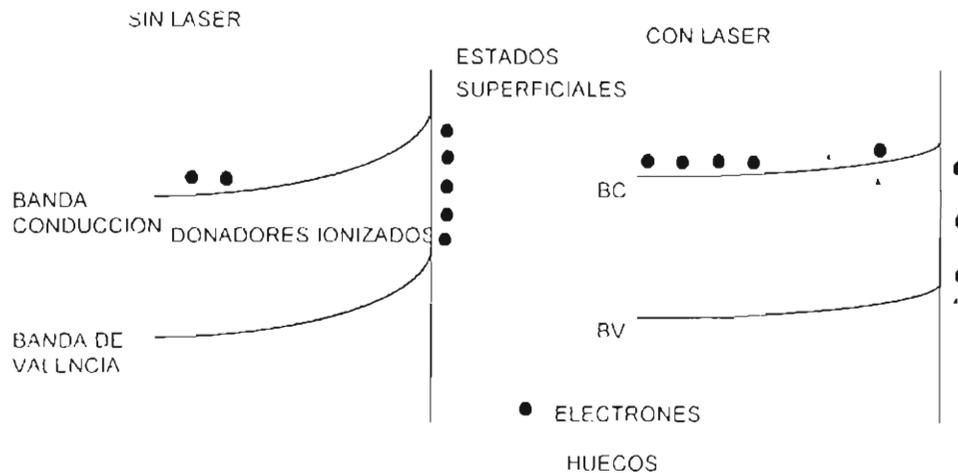
Podemos dividir en dos partes la adquisición de datos del experimento: a) medición para altas energías (1.77-5.39 eV), y b) medición en bajas energías (1.24-1.77 eV). A continuación se describe la primera parte.

Después de alinear la muestra, se ejecuta el experimento en el rango de energía seleccionado, para (1.77-5.39 eV) se utiliza la lámpara de Xe y para (1.24-1.77 eV) la de Tungsteno. Se realizan dos mediciones: la muestra alineada y después girada  $90^\circ$ , los cuales se restan y el resultado se divide entre dos. Este procedimiento nos permite eliminar la señal parásita  $S_p$  mencionada en el análisis óptico, ya que ésta no depende del ángulo entre los ejes ópticos y la luz polarizada.

Para medición en bajas energías (1.24-1.77 eV), se cambia la lámpara y la rejilla, y se sigue el mismo procedimiento.

### ***B. Espectroscopía de Fotorreflectancia***

La fotorreflectancia es una técnica de espectroscopía de electromodulación sin contactos, que aprovecha el hecho que el nivel de Fermi está amarrado en la superficie. La distribución de carga originada por los estados superficiales, produce un campo eléctrico que puede ser modulado con portadores fotoexcitados (Ver Figura 3). Al iluminar la muestra con luz de mayor energía que el intervalo de energía prohibida, la curvatura de las bandas cambia, disminuyendo el campo eléctrico superficial, debido a la neutralización de la carga en los estados superficiales, causada por los portadores libres.<sup>19</sup>



*Figura 3. Efecto fotoeléctrico. La luz crea pares electrón hueco. Portadores minoritarios reducen carga en los estados superficiales.*

### 1. Descripción del espectrómetro de fotorreflectancia

El espectrómetro utilizado para la medición de fotorreflectancia, fue el mismo que el utilizado para la reflectividad diferencial, con algunas modificaciones que a continuación se explican. La luz se enfoca sobre la muestra bajo estudio de la misma manera que en el caso del experimento de reflectividad diferencial. Puesto que para la fotorreflectancia no es necesario polarizar la luz incidente, se elimina el prisma polarizador y se desconecta el modulador fotoelástico. Además, en la misma área de la muestra en donde incide la luz monocromática, se hace incidir el haz de un láser de He-Ne, previamente modulado con una frecuencia de varios cientos de Hertz por medio de un recortador de haces (Bentham 218). El haz del láser es abierto con una lente convexa para que la mancha de luz sobre la muestra sea aproximadamente del mismo tamaño que la de la luz que proviene del monocromador. El recortador del haz provee al amplificador sensible a la fase, la señal de referencia para la detección de la componente de AC. La detección de la señal y procesamiento se realiza de la misma manera que en las mediciones de anisotropías ópticas.

## CAPITULO III.

### Resultados Experimentales

En esta sección se presentan los resultados experimentales de nuestro trabajo. Se considerarán primeramente las mediciones de anisotropías ópticas, las cuales fueron realizadas para las superficies (100), (211) y (110) de CdTe, en el rango 230-1000 nm (1.24 eV - 5.39 eV). Después, se describen las mediciones de fotorreflectancia, que se llevaron a cabo alrededor de las energías de los puntos críticos del CdTe. En la última parte del capítulo se comparan varios espectros de anisotropía tomados a diferentes tiempos para la superficie (110), con la finalidad de mostrar la sensibilidad de la técnica a la oxidación y en general al estudio de la dinámica de los procesos superficiales.

#### *A. Anisotropías ópticas*

En la Figura 4 se muestran los espectros de anisotropías ópticas de Telurio de Cadmio en el rango de energías de 1.24 eV a 5.4 eV, para las tres superficies (100), (211) y (110)<sup>§</sup>. Se hace notar que no se identificaron las direcciones cristalográficas de las muestras, por lo que el signo de la amplitud de los espectros se encuentra indeterminado. Como puede verse de la Figura 4, los espectros de RD tienen una componente con estructura relativamente

---

<sup>§</sup> En el Apéndice B se consideran los aspectos geométricos y los arreglos atómicos que corresponden a dichas superficies.

aguda alrededor de las energías de los puntos críticos del CdTe<sup>\*\*</sup>, que por razones que se aclararán en el próximo capítulo, se denominará "componente de volumen", además de una componente de "trasfondo", con un espectro considerablemente más suave. Notamos asimismo, que mientras la forma de línea de las componentes de volumen de los tres espectros coincide alrededor de  $E_0$ , a las energías  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ <sup>††</sup> dichas formas de línea para las superficies (100) y (211) aparecen invertidas con respecto a la forma de línea para la superficie (110). También podemos observar que la anisotropía es considerablemente mayor para la superficie (100) que para las otras superficies.

La determinación de la forma del espectro de anisotropía alrededor del punto crítico  $E_3$  (5.2 eV) se vuelve difícil ya que a partir de 5 eV la cantidad de luz disponible en el espectrómetro disminuye considerablemente.

---

<sup>\*\*</sup> En el apéndice A se muestra una figura del diagrama de bandas del CdTe, en donde se señalan las transiciones predominantes que originan los puntos críticos.

<sup>††</sup> En el apéndice D, se da una breve explicación del origen de este punto crítico y su importancia en el CdTe.

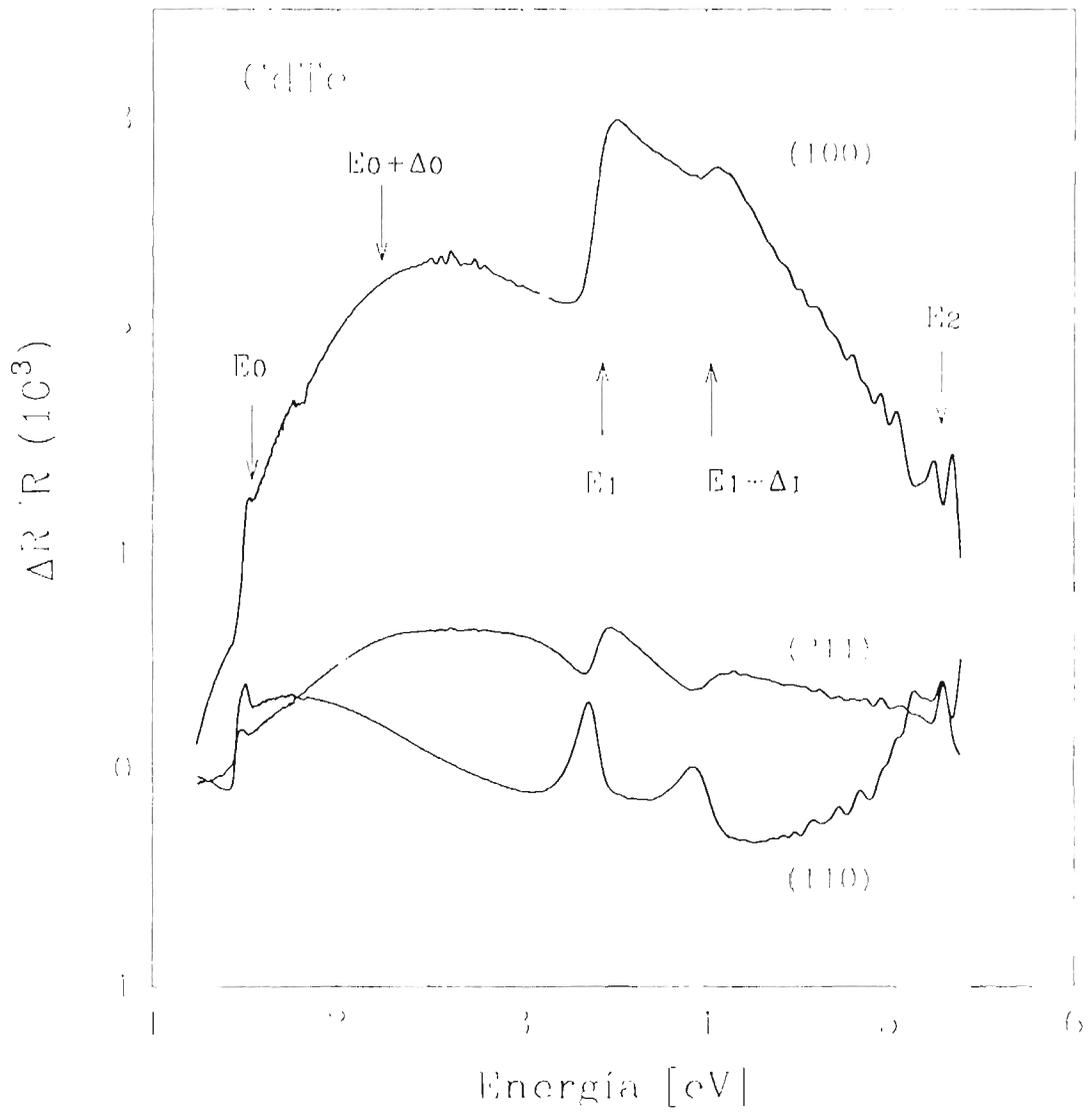


Figura 4. Espectro de anisotropías ópticas para la superficies (100), (111) y (110) de Telurio de Cadmio en el rango de 1.24 eV a 5.4 eV.

## B. Fotorreflectancia

En la Figura 5 se muestran, para los mismos cristales de la sección anterior, espectros de fotorreflectancia en intervalos de energía centrados en la brecha de energía prohibida ( $E_0$ ) y de las transiciones  $E_1$  y  $E_1+\Delta_1$  del Telurio de Cadmio. Dichos espectros de fotorreflectancia coinciden en lo substancial con espectros anteriormente reportados.<sup>20</sup>

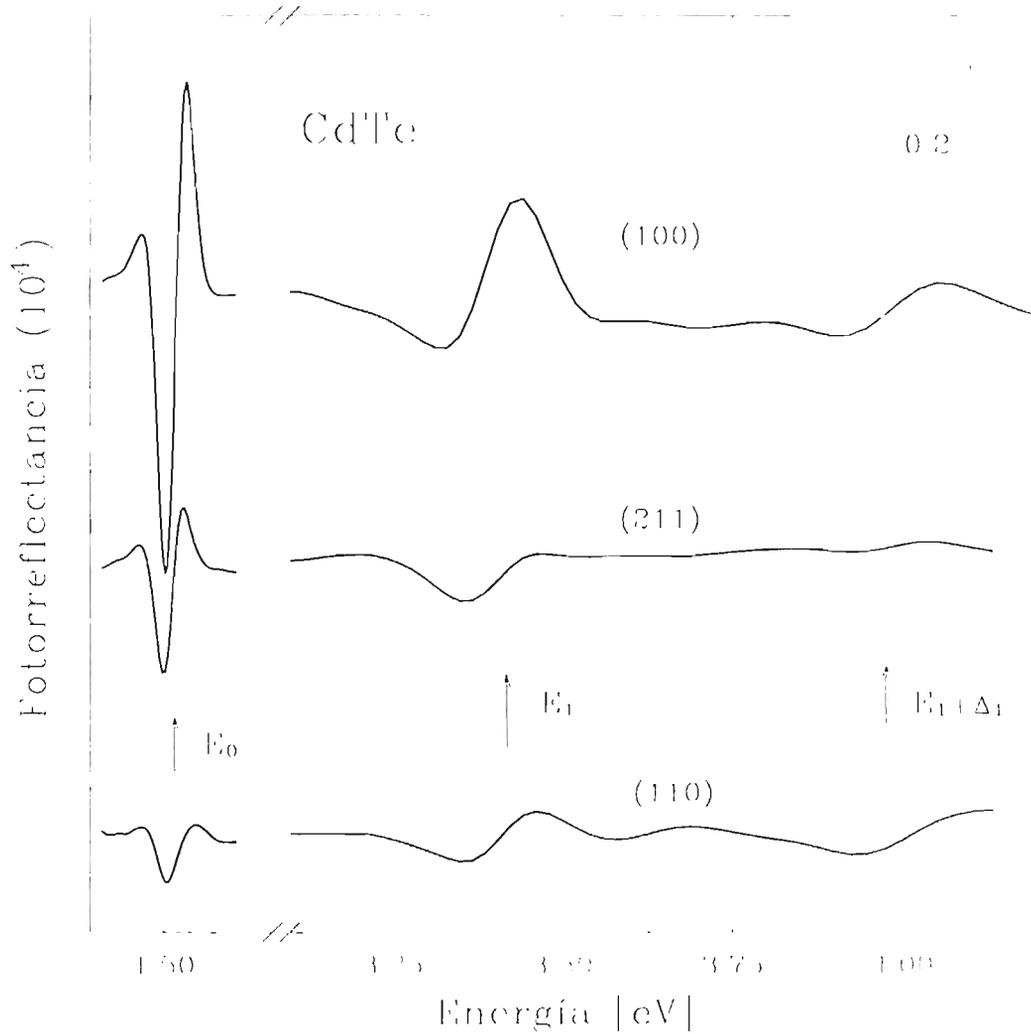


Figura 5. Espectros de fotorreflectancia alrededor de los puntos críticos para las superficies (100), (211) y (110).

### *C. Evolución en el tiempo del espectro de anisotropías ópticas*

En la Figura 6, se muestran espectros de anisotropías ópticas para la superficie (110), en diferentes condiciones superficiales. El espectro (a) corresponde a la muestra sin tratamiento alguno, es decir, tal como se recibió del fabricante. El espectro (b) se obtuvo inmediatamente después de pulir la superficie por el procedimiento mecánico-químico descrito en la pág. 12. Los espectros (c) y (d) corresponden a mediciones llevadas a cabo 16 horas y un mes después del pulido, respectivamente.

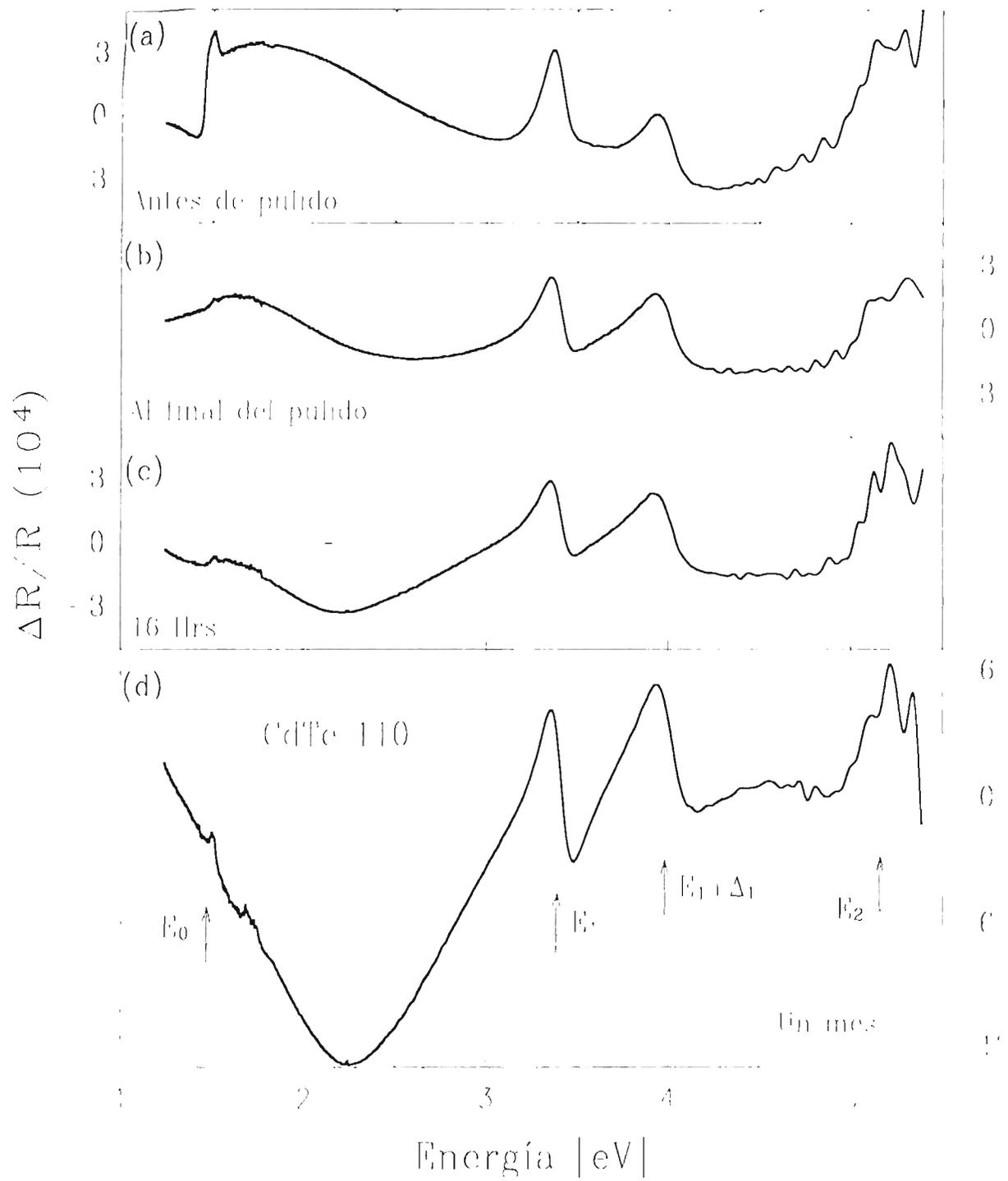


Figura 6. Evolución en el tiempo del espectro de anisotropías ópticas para una muestra de CdTe (110).

## CAPITULO IV.

### Análisis de los resultados

Como se hizo notar en el capítulo anterior, de un análisis de la Figura 4 y de la Figura 6, podemos concluir que los espectros de anisotropía del CdTe muestran una estructura aguda para energías alrededor de los puntos críticos del CdTe, específicamente alrededor de  $F_0(1.51 \text{ eV})$ ,  $E_1(3.4)$ ,  $E_1+\Lambda_1(4.0)$  y  $E_2(-5.2)$ . Además de esto, los espectros muestran una estructura superpuesta, que llamaremos "trasfondo", la cual resulta considerablemente menos aguda que la estructura alrededor de los puntos críticos. La Figura 6, por otro lado, nos indica que mientras la estructura más aguda es relativamente insensible a las condiciones de la superficie del CdTe, el trasfondo depende fuertemente de éstas. Todo lo anterior nos lleva a la conclusión de que los espectros de anisotropías ópticas están formados por cuando menos dos componentes: (1) el trasfondo que se originaría en las primeras capas superficiales, y (2) la estructura alrededor de los puntos críticos de CdTe, que llamaremos "componente de volumen", la cual estaría asociada a una capa superficial del material (0.1-1  $\mu\text{m}$  en espesor), con propiedades ópticas aproximadamente iguales a las de CdTe.

Este capítulo está organizado como sigue: En la sección A trataremos el origen de la componente de volumen, en la sección B se determinan los puntos críticos por medio de ajustes para la interpretación de la estructura asociada a la componente de volumen, en la

sección C se discute el origen del desdoblamiento en  $E_0$  y se determina la separación de las bandas por el rompimiento de la degeneración.

Finalmente, en la sección D se analiza la dinámica del espectro de anisotropías, resaltando el efecto de la otra componente, denominada el trasfondo.

### ***A. Interpretación de la componente de volumen***

En la Figura 7 se muestran los espectros de RD de la Figura 4 derivados doblemente con respecto a la energía, juntamente con un espectro de fotorreflectancia de la Figura 5, alrededor del punto crítico  $E_0$ . Como complemento a los espectros de la Figura 7, en la Figura 8 se muestran un espectro de fotorreflectancia para energías alrededor de  $E_1$  y  $E_1+\Delta_1$ , juntamente con las segundas derivadas de los espectros de reflectancia diferencial. Las líneas continuas en la Figura 7 y la Figura 8, corresponde a ajustes que serán comentados en la sección siguiente.

Como se puede observar de la Figura 8, para energías alrededor de  $E_1$  y  $E_1+\Delta_1$  existe una coincidencia notable entre las segundas derivadas de los espectros de RD y los de fotorreflectancia. Esto es una indicación de que la componente de volumen esta asociada a una primera derivada del espectro de reflectividad del CdTe, puesto que se sabe que el espectro de fotorreflectancia en el límite de campo bajo está asociado a la tercera derivada de la reflectividad.<sup>21</sup>

En contraste, de la Figura 7 podemos observar que en  $E_0$  los espectros de anisotropía derivados muestran un desdoblamiento que será discutido en la sección C'.

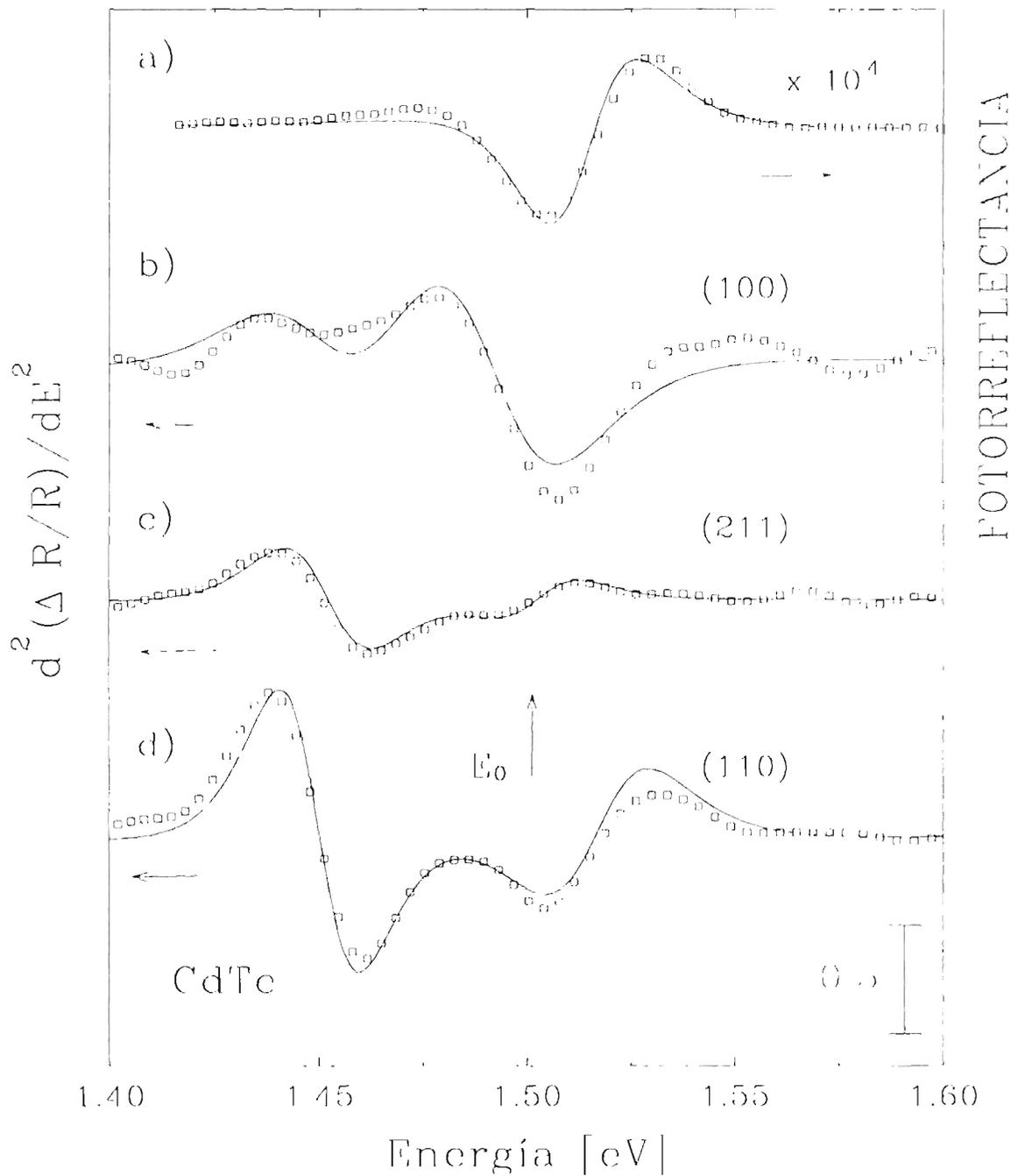


Figura 7 a) Espectro de fotorreflectancia, b), c) y d) espectros de anisotropías ópticas doblemente derivados con respecto a la energía en las superficie (100), (211) y (110), respectivamente. Las líneas continuas son ajustes Lorentzianos, en el rango de 1.4 eV a 1.6 eV.

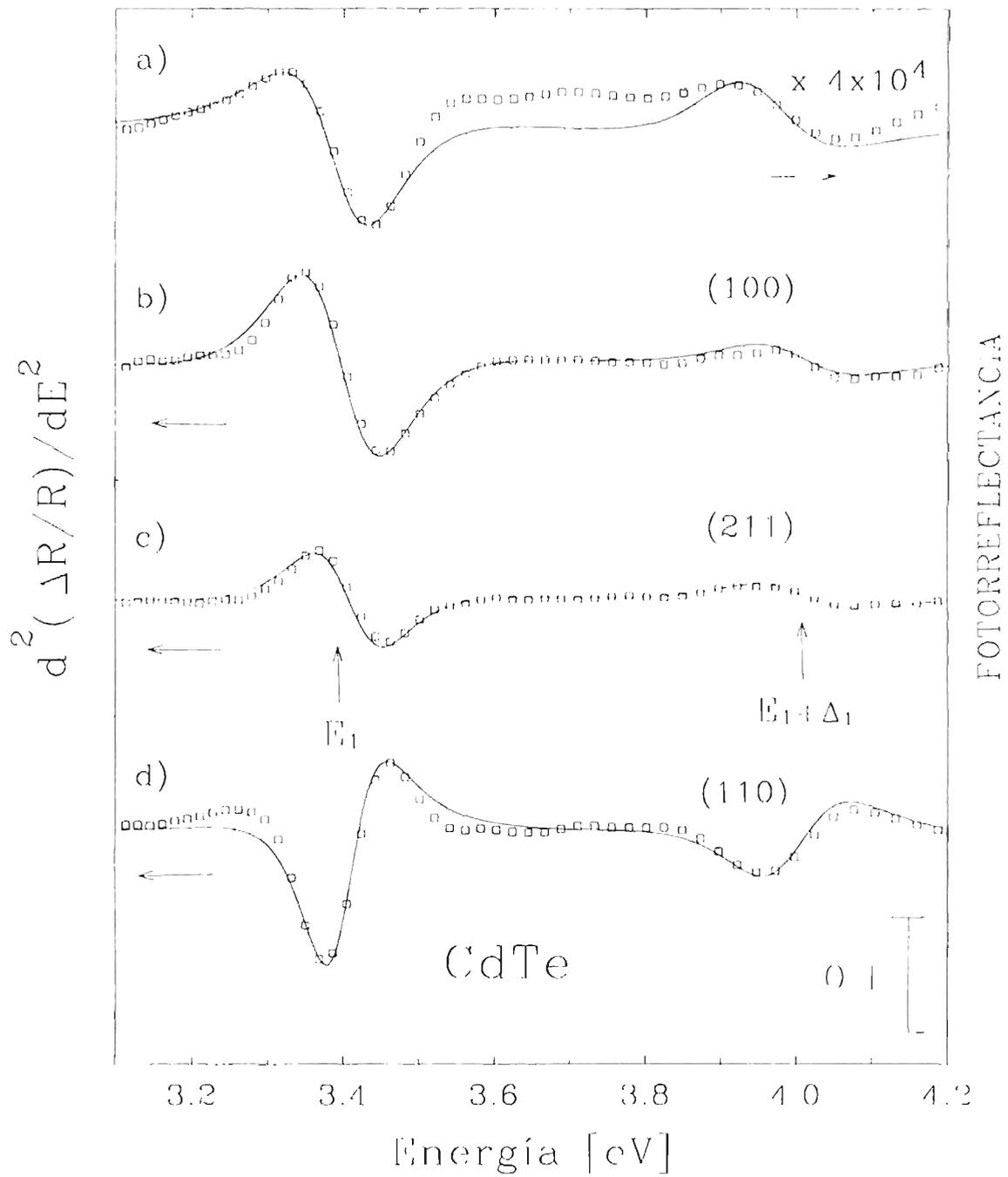


Figura 8. a) Espectro de fotorreflectancia, b), c) y d) espectros de anisotropías ópticas doblemente derivados con respecto a la energía en las superficie (100), (211) y (110), respectivamente. Las líneas continuas son ajustes Lorentzianos. en el rango de 3.0 eV a 4.2 eV

Podemos también comparar los espectros de reflectancia diferencial con mediciones del espectro de reflectividad absoluta. Estos espectros fueron proporcionados por S. Adachi<sup>22</sup> y fueron medidos con elipsometría en muestras de CdTe con una preparación muy similar a la nuestra. En la Figura 9 se comparan espectros de anisotropías ópticas con el espectro de reflectividad absoluta derivado respecto a la energía, en la que podemos observar que el espectro de anisotropías ópticas efectivamente tiene una componente de volumen. También se encuentra que existe una ligera diferencia en los valores de los puntos críticos tanto en posición como en forma (en la siguiente sección se muestran los valores calculados).

En la Figura 10 se comparan espectros de anisotropías ópticas derivados respecto a la energía, con el espectro de reflectividad absoluta doblemente derivado. La derivación se ha realizado con el objeto de eliminar o disminuir la componente superficial (el trasfondo) del espectro de anisotropías. La diferencia en fase que ocurre alrededor de  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ , entre las superficies (100) y (211) respecto a la superficie (110), puede ser debida a la distribución tanto en cantidad, tipo y orientación de las dislocaciones, al igual que sucede en muestras de GaAs semiaislante, en las que se han realizado experimentos en los que se pulieron muestras de la superficie (100) en las direcciones  $[011]$  y  $[0\bar{1}1]$  para generar dislocaciones preferenciales en una dirección, esto produjo la inversión de los puntos críticos  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ .<sup>15</sup> Esto motiva a que se realice un estudio teórico y experimental más general, sobre las dislocaciones que se generan en CdTe en muestras con superficies diferentes, que traten de explicar el comportamiento del espectro de anisotropías.

Otra posible explicación, menos probable, es el tipo de portadores de la muestra ya que se ha determinado que para muestras impurificadas de GaAs se genera un campo eléctrico superficial (efecto electro óptico) que da origen a la anisotropía y que al cambiar de tipo p a tipo n, se invierte la oscilación en el espectro de anisotropías.<sup>23</sup> Motivado por esto se intentó medir efecto Hall en las muestras de CdTe. Esto no fue posible por la alta resistividad de las muestras y el tipo de material (Indio) que fue utilizado para realizar los contactos, no lográndose que éstos fueran ohmicos.

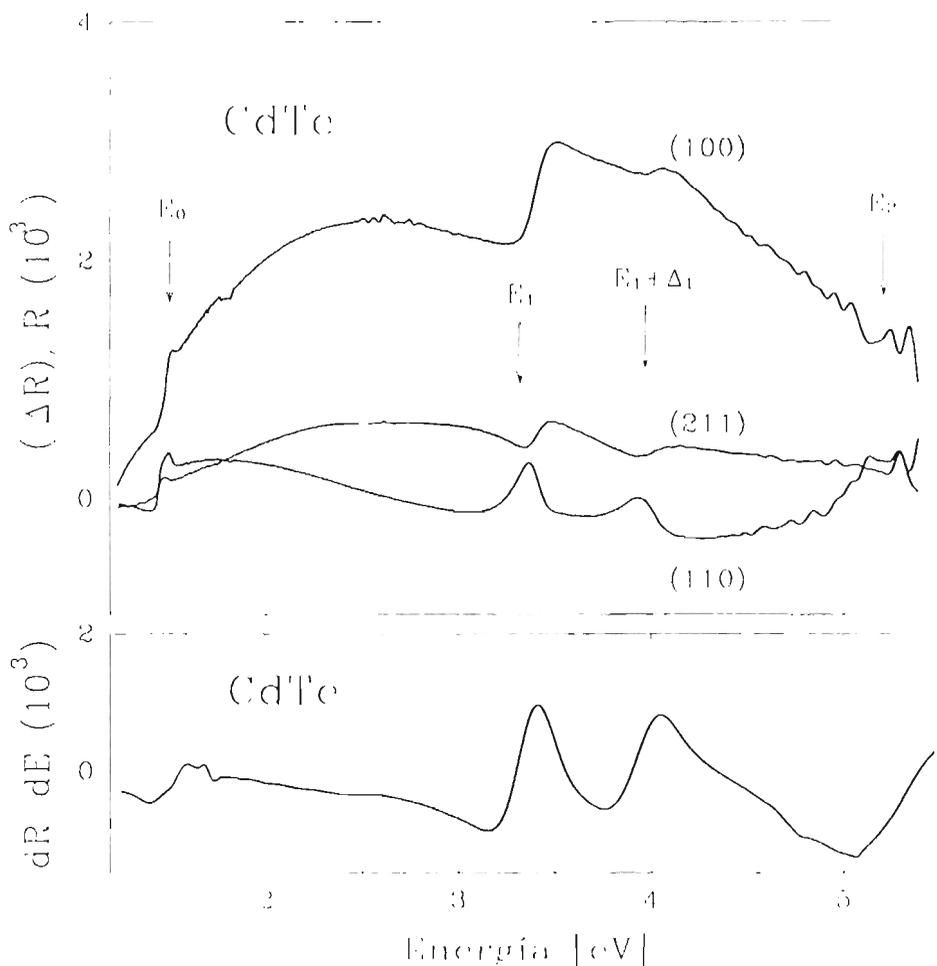


Figura 9. Comparación del espectro de reflectividad derivado respecto a la energía, con los espectros de anisotropías ópticas

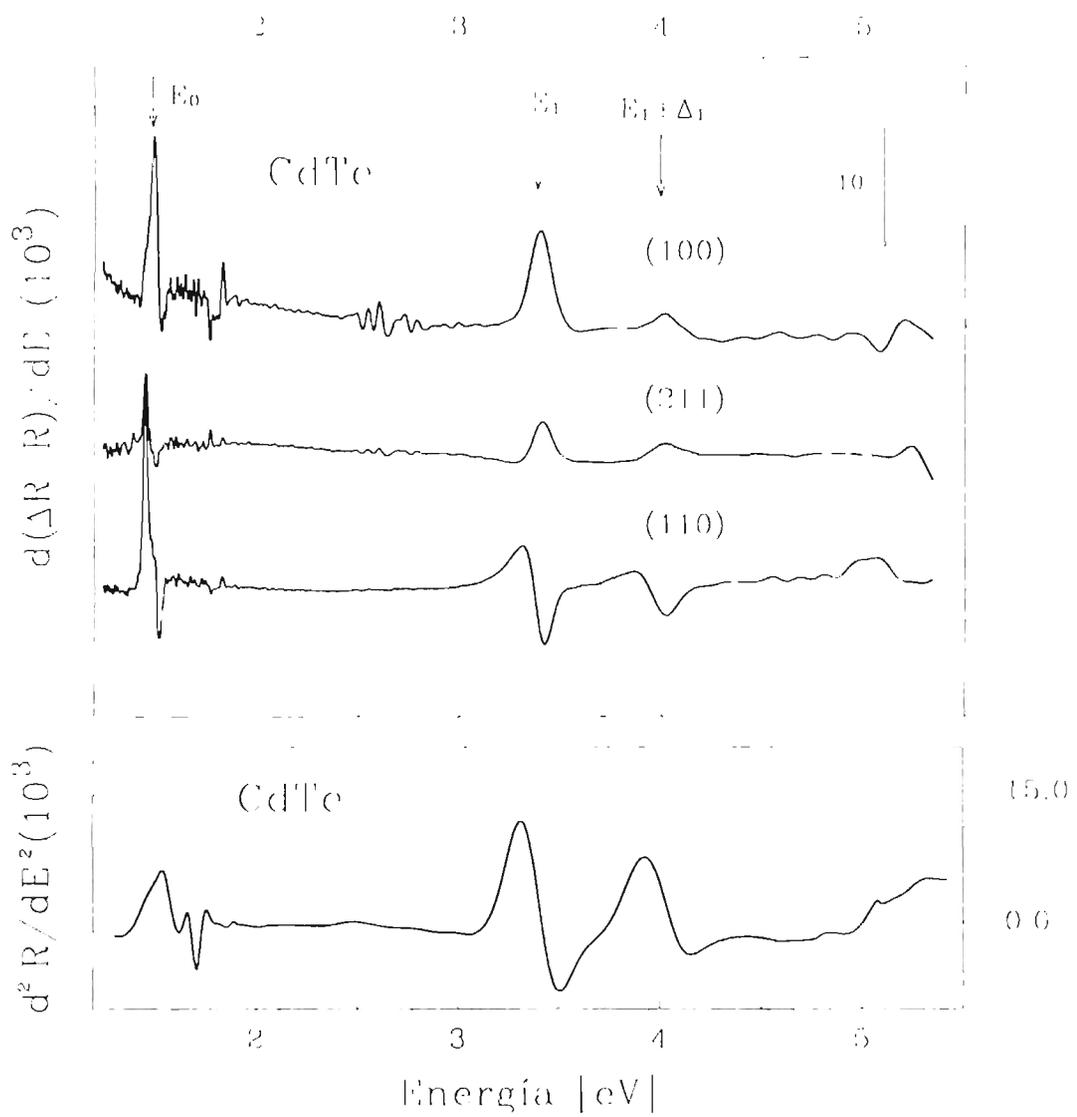


Figura 10. Comparación del espectro de reflectividad derivado dos veces respecto a la energía, con los espectros de anisotropías ópticas derivados respecto a la energía.

La componente de volumen de espectros de RD de la Figura 4 se explicara en los mismos términos a como se han explicado componentes similares observadas en cristales semiaislantes de GaAs dopados con átomos de Cr.<sup>15</sup> De acuerdo con la referencia 15, la componente de volumen del espectro de RD está asociada a las deformaciones producidas por una distribución desigual de dislocaciones  $\alpha$  y  $\beta$  de  $60^\circ$ .<sup>24</sup> Dichas deformaciones cambian la simetría del cristal cerca de la superficie de cúbica, a ortorrómbica, lo cual tiene los siguientes efectos: (1) en el punto  $\Gamma$  del diagrama de bandas, el cambio de simetría rompe la degeneración en las bandas de huecos pesados y ligeros según se muestra en la Figura 11 que es un diagrama esquemático de las bandas de valencia, (2) en el punto  $\Lambda$  se rompe la degeneración de las 8 transiciones equivalentes (una por cuadrante de la Zona de Brillouin ilustrada en la Figura 12) que componen las transiciones  $E_1$  y  $E_1 + \Lambda_1$  (ver la Figura 13, que muestra la primera zona de Brillouin con los 8 puntos equivalentes).

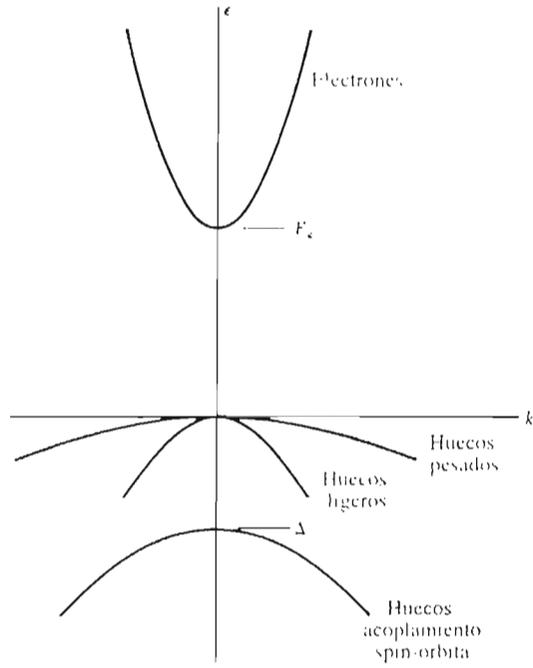


Figura 11 Vista simplificada de la estructura de bandas, alrededor de las transiciones  $\Gamma$ .

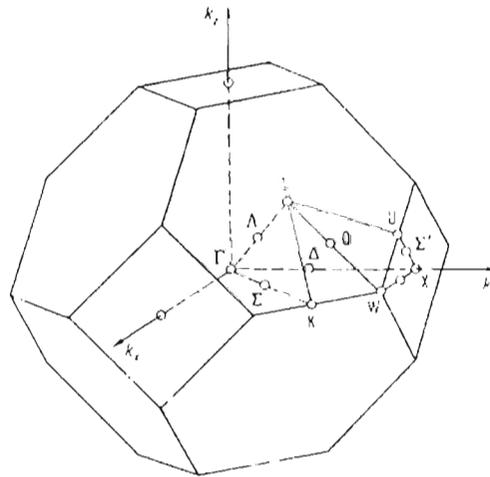


Figura 12 Primera zona de Brillouin para la estructura zincblenda

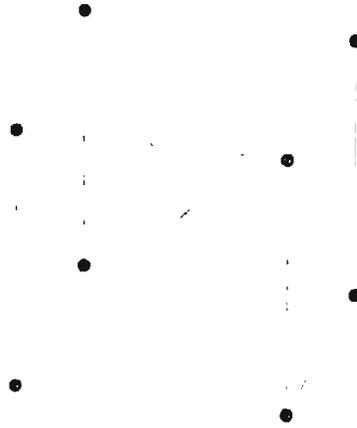


Figura 13. Se muestra los 8 puntos equivalentes A.

En el caso de la superficie (100), tanto en las transiciones  $\Gamma$  como en las A se obtiene una diferencia en la reflectividad para polarizaciones a lo largo de las dos direcciones  $[110]$  y  $[\bar{1}\bar{1}0]$  mutuamente ortogonales a lo largo de la superficie de la muestra, la cual está dada por<sup>15</sup>:

$$\frac{\Delta R}{R} = C l^2 p \Delta \sigma \operatorname{Re} \left[ (\alpha - j\beta) \left\{ \varepsilon(E_p - \Delta E) - \varepsilon(E_p + \Delta E) \right\} \right], \quad (4-1)$$

donde  $\varepsilon$  es la función dieléctrica compleja del CdTe,  $\alpha$  y  $\beta$  son los coeficientes de Scraphin,  $l$  es la longitud promedio de la dislocación,  $\Delta \sigma$  es la diferencia en la densidad superficial de dislocaciones  $\alpha$  y  $\beta$ ,  $p$  es el espesor de la capa superficial responsable de la señal de FRO,  $C=3$  y  $\Delta E = -\Delta E_v$  para transiciones en  $\Gamma$  y  $C=2$  y  $\Delta E = \Delta E_A$  para transiciones en A.  $\Delta E$  es el cambio en las bandas de valencia debido al campo de tensiones producido por las dislocaciones. Definimos los cambios en energía  $\Delta E_v$  para la banda de huecos ligeros y  $\Delta E_p$  para la banda de huecos pesados.

Si tenemos que  $\Delta E$  es mucho menor que la energía de ensanchamiento  $\Gamma_c$ , la ecuación 4-1 se convierte en:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{2Cl^2 p}{E^2} \Delta\sigma \operatorname{Re} \left[ (\alpha, -j\beta, ) \frac{\partial(E^2 \epsilon)}{\partial E} \right] \Delta E,$$

es decir, el espectro de anisotropía estaría asociado a una primera derivada del espectro de reflectividad de CdTe.

Se hace notar que, de acuerdo al modelo empleado para describir la componente de volumen del espectro de RD, la transición  $E_0 + \Delta_0$  no contribuye al mismo en virtud de que dicha banda no rompe su degeneración cuando se aplica un esfuerzo. En la Figura 4 se muestra experimentalmente, que la transición  $E_0 + \Delta_0$  (2.1 eV), efectivamente no contribuye al espectro de RD.

### ***B. Determinación de las energías de los puntos críticos.***

Con la finalidad de caracterizar la componente de volumen asociada al espectro de anisotropías ópticas, se determinaron primeramente, las energías de los puntos críticos del CdTe mediante ajustes a espectros de fotorreflectancia medidos con este propósito. Posteriormente los parámetros obtenidos del ajuste fueron utilizados como primer acercamiento al ajuste de los espectros de anisotropías derivados doblemente respecto a la energía.

Para la determinación de los puntos críticos basados en los espectros de fotorreflectancia, el modelo más utilizado es el parabólico simple (SCP), con el que se obtienen las expresiones de la función dieléctrica mostradas en el apéndice A.<sup>25</sup>

En la Tabla 1 se listan las energías de los puntos críticos determinados por diferentes técnicas, y las determinadas en nuestros resultados experimentales con los ajustes mostrados en la Figura 7 y la Figura 8.

ENERG	TÉCNICAS EXPERIMENTALES			
	ELECTRO	EIPSONOMETRIA <sup>26</sup>	ANISOTROPIAS	FOTORREFLECTANCIA
E <sub>0</sub>	1.49 <sup>26</sup>	1.5	1.45 1.517 <sup>‡‡</sup>	1.51
E <sub>1</sub>	3.28 <sup>27</sup>	3.33	3.4	3.4
E <sub>1+Δ<sub>1</sub></sub>	3.87 <sup>27</sup>	3.89	4.0	3.95

*Tabla 1. Comparación de los valores de los puntos críticos del CdTe, utilizando diferentes técnicas espectroscópicas.*

### **C. Determinación de las energías de desdoblamiento**

Al realizar el ajuste para el espectro de anisotropías, hemos observado que existe un desdoblamiento en E<sub>0</sub> (transiciones Γ), generándose dos valores de puntos críticos. Es bien conocido que este desdoblamiento puede ser originado aplicando tensión a la muestra como se realiza en mediciones de piezoreflectancia.<sup>28</sup> Como las mediciones de piezoreflectancia están asociadas a la primera derivada del espectro de reflectividad, y el espectro de

---

<sup>‡‡</sup> Para la superficie (110)

anisotropías también se le asocia una componente de primera derivada, según lo podemos observar de las comparaciones con los espectros de fotorreflectancia (Figura 7 y Figura 8), y de reflectividad absoluta (Figura 9 y Figura 10), se confirma que el espectro de anisotropías es originado en parte por dislocaciones que producen tensiones naturales similares a las inducidas en las mediciones de piezoreflectancia. J. Allègre y colaboradores [ref. 28], muestran la capacidad de la espectroscopía diferencial (piezoreflectancia y modulación en longitud de onda) para identificar transiciones de huecos pesados y huecos ligeros, originadas por potenciales de deformación en capas tensionadas de CdTe crecidas sobre substratos de GaAs. Debido a esto, consideran adecuadas estas técnicas para estudiar heteroestructuras basadas en CdTe. Esto a su vez, sugiere que la espectroscopía de reflectividad diferencial alrededor de  $E_0$  para la determinación de anisotropías ópticas, también puede ser utilizada como sonda óptica en el crecimiento de heteroestructuras, en las que se quiere determinar la deformación del cristal por falta de acoplamiento debido a las diferentes constantes de red.

La magnitud de la anisotropía varía considerablemente dependiendo del estado de la superficie. Esto se puede observar en los espectros de la Figura 6, en el cambio del espectro alrededor de  $E_0$ , tanto en magnitud como en forma. En la Figura 14 se muestra una ampliación y comparación. Los incisos a), b), c) y d) corresponden a la muestra sin pulir, al finalizar el pulido, un día después y un mes después, respectivamente. Se observa el efecto que tiene el tratamiento de la muestra y el tiempo sobre el espectro derivado doblemente respecto a la energía, que contiene la información del volumen, y que es explicado parcialmente por la existencia de dislocaciones. Una explicación cualitativa de la

variación en el espectro es que al pulir la muestra se están eliminando o compensando las dislocaciones, produciendo una disminución en la señal del espectro de anisotropías. La oxidación también puede estar ocultando el efecto de las tensiones debido a las dislocaciones, ya que se han observado capas de oxígeno y óxidos de telurio al someter muestras de CdTe a ataques químicos y tratamientos mecánico químicos.<sup>29</sup>

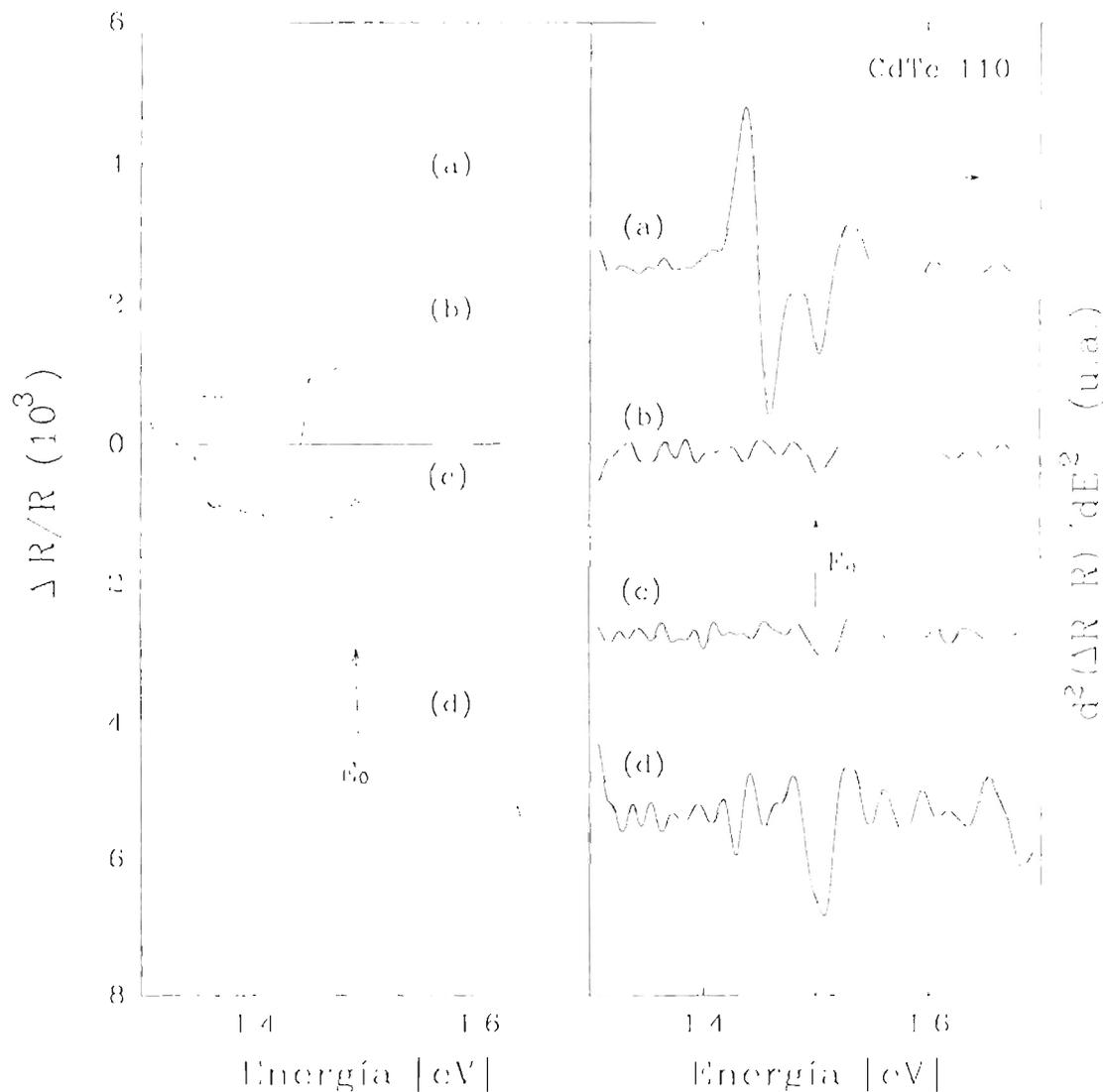


Figura 14. Amplificación del espectro de anisotropías ópticas en el intervalo fundamental para la superficie (110) medida, a) antes de pulir, b) al finalizar el pulido, c) un día después y d) un mes después, comparado con el espectro derivado doblemente respecto a la energía.

De acuerdo a la Figura 7, el desdoblamiento ocurre para las tres superficies que fueron medidas calculándose los siguientes valores de  $\Delta E = \Delta E_f + \Delta E_p$  para la separación de las transiciones: 42, 51 y 67 meV para las superficies (100), (211) y (110), respectivamente. La aparición del desdoblamiento y su magnitud es variable dependiendo de las condiciones de la superficie, por lo tanto es importante realizar un estudio genérico de dislocaciones para cualquier superficie como se hizo en particular para la superficie (100). También se hace notar que el valor de  $\Delta E$  es mayor para la banda de huecos pesados estimándose según la Tabla I de 60 meV y comparado con sólo 7 meV para la banda de huecos ligeros.

Para transiciones alrededor de  $E_0$ , el valor de  $\Delta E$  no es pequeño comparado con el parámetro de ensanchamiento por lo que dichos espectros tienen una componente directa del espectro de reflectividad.

#### ***D. Evolución del espectro de anisotropías ópticas***

En la Figura 6, podemos observar la evolución en el tiempo del espectro de anisotropías ópticas. En estos espectros ocurren modificaciones en ambas componentes llamadas (1) el trasfondo y (2) la componente de volumen. En la sección anterior ya tratamos el efecto producido en el desdoblamiento al pulir la muestra, que es un cambio en la componente de volumen.

Por otro lado, la componente predominante que muestra una variación, es la componente que le hemos llamado el trasfondo, originada en las primeras capas superficiales. Según la Figura 6, para energías entre 2 y 2.5 eV se tiene la máxima variación, por lo que sugiere que si queremos usar la técnica para estudio de procesos superficiales en

el CdTe a una sola longitud de onda, se use un valor dentro de este rango. Pudiéndose utilizar por ejemplo, para el monitoreo en el crecimiento de detectores infrarrojos producidos depositando epitaxialmente HgCdTe en sustratos de CdTe. En el caso crecimiento de heteroestructuras de GaAs/GaInP el valor utilizado en el monitoreo de procesos superficiales ha sido la de un láser de HeNe (1.95 eV).<sup>4</sup>

## CAPITULO V.

### CONCLUSIONES

Como resultado del trabajo llevado a cabo en esta tesis se señalan las siguientes conclusiones:

- 1) Se alineó el espectrómetro de reflectancia diferencial para realizar mediciones de anisotropías ópticas, en el rango de 1.24 eV a 5.39 eV, en dos partes: la primera para bajas energías (1.24-1.77 eV) utilizando una rejilla de difracción optimizada a 540 nm, y la segunda parte a altas energías (de 1.77 eV a 5.4 eV), utilizando una rejilla optimizada a 240 nm.
- 2) Se comparó el espectro de reflectividad diferencial derivado con respecto a la energía, con la primera derivada respecto a la energía del espectro de reflectividad absoluta, resultando una similitud muy estrecha alrededor de los puntos críticos, por lo que se comprueba que el espectro de anisotropías ópticas tiene una componente de primera derivada de la reflectividad.
- 3) Se determinaron los valores de los puntos críticos para el CdTe con fotorreflectancia y reflectancia diferencial, encontrándose un desdoblamiento en el intervalo fundamental debido a la pérdida de la degeneración de las bandas de huecos pesados y ligeros, producida por deformación en la estructura cristalina.

- 4) Los espectros de reflectancia diferencial obtenidos para CdTe contienen una componente de volumen similar a la obtenida para GaAs y GaSb<sup>30</sup>.
- 5) Es posible estudiar con la técnica de ERD, la dinámica de una superficie y la deformación producida por defectos. Para el CdTe se concluye que las mejores longitudes de onda para el monitoreo de procesos superficiales se encuentran en el intervalo de 2 a 2.5 eV, y para el estudio de defectos en un intervalo alrededor de  $E_g$ .

### **Perspectivas de trabajo futuro**

- 1) Estudio de dislocaciones en CdTe para diferentes superficies, en particular para las superficies medidas (211) y (110), en los que obtengan expresiones de  $\Delta R/R$  que expliquen los espectros obtenidos y cuantifiquen la energía de desdoblamiento.
- 2) Determinación de las direcciones en la superficie del cristal con ataque químico, para determinar el sentido de la anisotropía.
- 3) Determinación de la conductividad y el tipo de portador predominante mediante efecto Hall, que complemente la explicación del origen del espectro de anisotropías ópticas en el CdTe.
- 4) Dada la importancia de la técnica de ERD, es muy prometedora la construcción de un espectrómetro que se adapte a un sistema de crecimiento, y que se desarrolle con un sistema de adquisición de datos multicanal para mediciones a tiempo real, permitiendo el estudio de procesos superficiales y de defectos en el crecimiento del cristal.

- 5) Debido a la importancia de la dependencia en la temperatura del origen y formación de dislocaciones y por ende la fabricación de dispositivos optoelectrónicos, es útil realizar mediciones variando la temperatura.
- 6) Aunque las técnicas de espectroscopia óptica se han desarrollado principalmente motivadas por el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos de gran importancia tecnológica, sus aplicaciones pueden ser muy variadas. Resalta en importancia el control de procesos industriales ya que son técnicas de medición de las llamadas ideales, en las que casi no se perturba el sistema que se mide, por ser no invasiva y sin contacto.

## Apéndice A. Propiedades físicas y aplicaciones del CdTe.

El Telurio de Cadmio (CdTe), es un material semiconductor con estructura zincblenda, al igual que el Arsenuro de Galio, pero su peso atómico es mayor. A continuación se presentan en la Tabla A algunos parámetros físicos importantes.

CANTIDAD (300° K)	VALOR
Parámetro de red	6.481 Å
Puntos críticos $E_0$	1.51 eV
$E_1$	3.4 eV
$E_1 + \Delta_1$	3.95 eV
Coefficiente de expansión	$4.8 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
Movilidad	$\mu_{H,p} = 60 \text{ cm}^2 / \text{Vs}$
Índice de refracción	2.7
Constante dieléctrica $\epsilon(0)$	10.2

*Tabla A Algunas propiedades del material semiconductor CdTe*

Las aplicaciones del telurio de cadmio son importantes y muy variadas. Algunos ejemplos de sus aplicaciones son:<sup>31</sup>

Detectores de rayos x y rayos gamma.

Detectores infrarrojos. Compuesto ternario  $\text{Hg}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Te}$

Moduladores electroópticos

Por su baja absorción se utiliza en la fabricación de lentes, ventanas de Brewster, fibras ópticas..

En la Figura A se muestra el diagrama de bandas del CdTe en las que han sido marcadas las transiciones estudiadas en este trabajo y en el que no aparecen las variaciones producidas por las deformaciones del cristal.

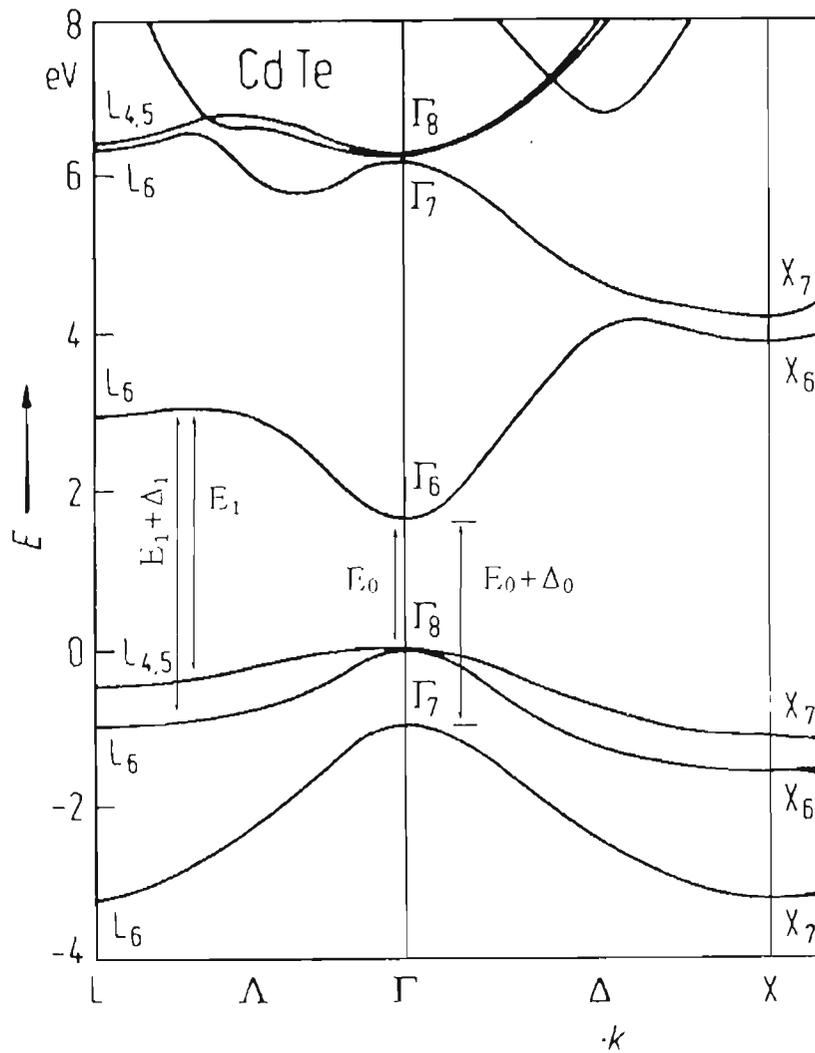
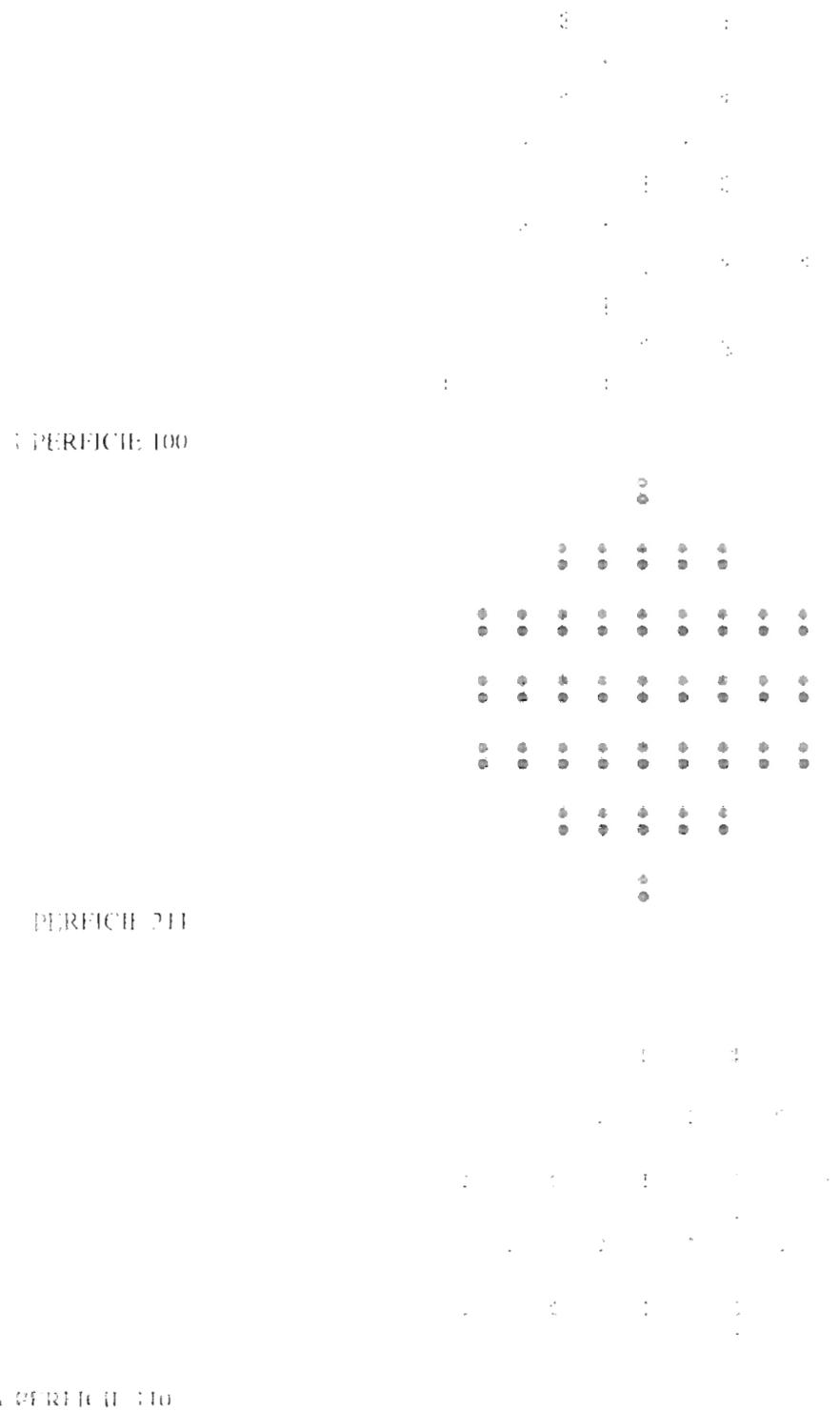


Figura A Diagrama de bandas para el CdTe donde se han señalado las transiciones de estudio.

## Apéndice B. Orientación de las superficies



*Figura B.1 Esquemas que definen la orientación en el cubo simple, con sus vistas respectivas en la estructura zincblenda, para los planos (100), (211) y (110).*

## Apéndice C. Espectros de modulación y la función dieléctrica

### 1. Relación entre la teoría y el experimento

El espectro de modulación nos proporciona una medición de  $\Delta R/R$  que debe ser relacionada a la cantidad fundamental que nos describe el comportamiento óptico de la muestra que es la función dieléctrica,  $\varepsilon = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ . Considerando la simetría cúbica del CdTe, esta función es un escalar. Para establecer la relación entre la teoría y el experimento expresaremos a  $\Delta R/R$  en términos del cambio inducido en la función dieléctrica,  $\Delta\varepsilon$ :

La conexión entre teoría y experimento se obtiene diferenciando la expresión para el coeficiente de reflexión de Fresnel:

$$R = \left| \frac{n - n_a}{n + n_a} \right|^2, \quad n^2 = \varepsilon \quad \text{y} \quad n_a^2 = \varepsilon_a,$$

donde  $n_a$  es el índice de reflexión real del ambiente. De donde se obtiene que,

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re} \left[ \frac{2n_a}{n(\varepsilon - \varepsilon_a)} \Delta\varepsilon \right],$$

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re}[(\alpha - i\beta)\Delta\varepsilon],$$

$$\frac{\Delta R}{R} = \alpha\Delta\varepsilon_1 + \beta\Delta\varepsilon_2$$

donde  $\alpha$  y  $\beta$  son los coeficientes de Seraphin y  $\Delta\varepsilon_1$  y  $\Delta\varepsilon_2$  son las diferencias en la función dieléctrica entre los dos ejes principales del cristal.

Los valores de los coeficientes de Seraphin los podemos obtener midiendo experimentalmente  $n$  (índice de refracción) y  $k$  (coeficiente de absorción) y utilizando las siguientes relaciones

$$\alpha = 2F_2 / F_1 \quad \beta = 2F_3 / F_1$$

donde  $F_1 = (F_2)^2 + (F_3)^2$

$$F_2 = n(n^2 - k^2 - 1) - 2nk^2$$

$$F_3 = k(n^2 - k^2 - 1) + 2kn^2$$

En la Figura 15 se muestran los valores de  $\alpha$  y  $\beta$  en función de la energía, los cuales fueron obtenidos de los valores de  $n$  y  $k$  medidos por elipsometría.

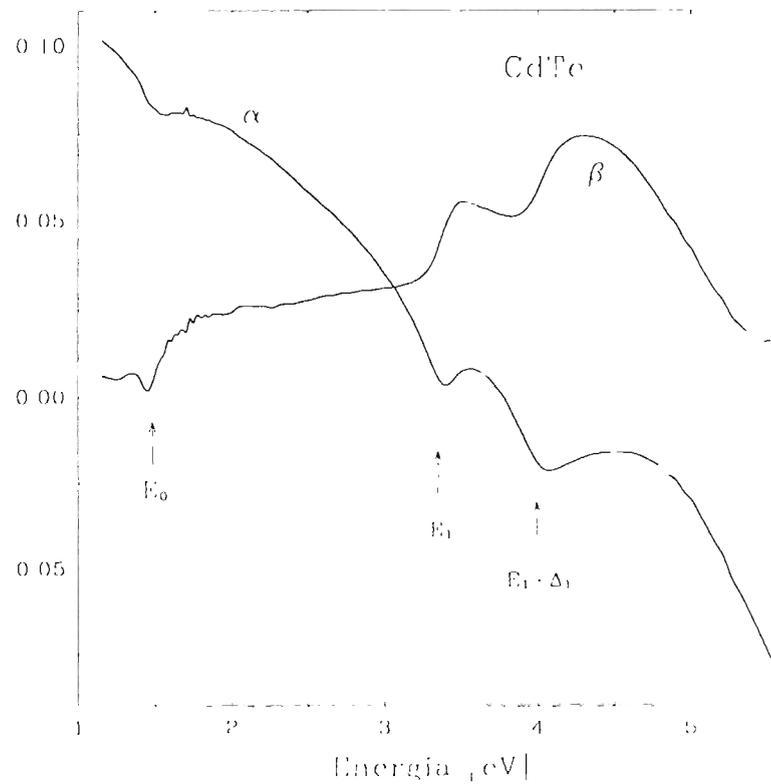


Figura 15. Valores para  $\alpha$  y  $\beta$  del CdTe determinados por elipsometría

## 2. Modelo parabólico simple

Debido al rango finito en energía del espectro de modulación, las transiciones que dan origen a la estructura están generalmente en la primera zona de Brillouin. Debido a esto, y con propósitos de analizar los resultados experimentales, es adecuado representar a  $E_{cv}(\mathbf{k})$  como una aproximación parabólica, la cual es reemplazada en la expresión general para la función dieléctrica, obteniéndose,<sup>25</sup>

$$\varepsilon(E, \Gamma) = \begin{cases} \frac{Q}{E^2} D_x K_y K_z i^{l+1} (E - E_g + i\Gamma)^{-l/2} & 1D \\ \frac{Q}{E^2} D_x D_y K_z i^{l+2} \ln(E_g - E + i\Gamma)^{-l/2} & 2D \\ \frac{2\pi Q}{E^2} D_x D_y D_z i^{l+1} (E - E_g + i\Gamma)^{-l/2} & 3D \end{cases}$$

donde  $Q = \frac{e^2 \hbar^2}{\pi m^2} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2$        $D = (2|\mu_{ii}| \hbar^2)^{1/2}$        $i = x, y, z$

$K_i$  son las longitudes de corte en la zona de Brillouin para puntos críticos de una y dos dimensiones, y  $l$  es el tipo de punto crítico siendo igual al número de masas negativas  $\mu_{ii}$ . Estas ecuaciones son utilizadas para calcular espectros diferenciados ya que no aparecen términos constantes. Un espectro modulado consiste de una superposición de espectros diferenciados calculados con estas ecuaciones.

## Apéndice D. Acoplamiento espín-orbita.

La transición  $E_1 + \Delta_1$  es debida a una banda que se origina por el acoplamiento espín-orbita que depende entre otros factores del peso atómico de los elementos que componen el cristal. Un electrón moviéndose a través de un campo eléctrico, como el producido por el potencial periódico  $U(r)$ , experimenta un potencial proporcional al producto escalar de su momento magnético con el producto vectorial de su velocidad y el campo eléctrico. A esta interacción se le llama acoplamiento espín-orbita.<sup>32</sup> Este acoplamiento origina que los niveles electrónicos que originalmente estarían degenerados, se separen.

Es conocido que el desdoblamiento de los niveles electrónicos en la superficies hexagonales de la primera zona en metales de estructura hep, es producido enteramente por el acoplamiento espín-orbita. El tamaño del desdoblamiento se incrementa con el número atómico, por lo que el desdoblamiento es mas apreciable en metales pesados. En el caso del GaAs el número atómico promedio (32) es pequeño comparado con el del CdTe (50), por lo que el desdoblamiento es mas notorio en CdTe y mas susceptible de ser estudiado para la determinación del tipo de impurificación. Como ejemplo de la importancia de este desdoblamiento debido al espín, se han realizado estudios en los que se ha explicado un cambio en la conductividad de tipo p a tipo n del semiconductor, en función de un cambio de fase de 180 grados en la oscilación entre  $E_1$  y  $E_1 + \Delta$  basado en un efecto electro-óptico que cambia la dirección del campo eléctrico superficial.<sup>13,23</sup>

## Referencias

---

- <sup>1</sup> D. E. Aspnes and A. A. Studna, L.T. Florez, and M.K. Kelly, J. Vac. Sci. Technol. B **6**, 1127 (1988).
- <sup>2</sup> J. Jönson, G. Paulsson, and L. Samuelson, J. Appl. Phys. **70**, 1737 (1991).
- <sup>3</sup> H. Tanaka, E. Colas, I. Kamiya, D. E. Aspnes, and R. Bhat, Appl. Phys. Lett. **59**, 3443, (1991).
- <sup>4</sup> O. Acher and B. Drevillon, Rev. Sci. Instrum. **63** 5332 (1992).
- <sup>5</sup> V.L. Berkovits, *et al.*, J. Appl. Phys. **70** 3707 (1991).
- <sup>6</sup> I. Kamiya, D. E. Aspnes, *et al.*, Phys. Rev. B, **46** 15894 (1992).
- <sup>7</sup> J. Rumberg, F. Reinhardt, W. Richter, J. Vac. Sci. Technol. B **13**(1), 88 (1995)
- <sup>8</sup> D. A. Woolf, *et al.*, Phys. Rev. B **51**, 4691 (1995).
- <sup>9</sup> D.E. Aspnes, and A. A. Studna, Phys. Rev. Lett. **54**, 1956 (1985).
- <sup>10</sup> R. del Sole, W.L. Mochan y R.G. Barrera, Phys. Rev. B **43**, 2136 (1991).
- <sup>11</sup> Y. C. Chang, S. F. Ren y D. E. Aspnes, J. Vac. Sci. Technol. **A 10**, 1856 (1992).
- <sup>12</sup> D. E. Aspnes y A.A. Studna, J. Vac. Sci. Technol. **A 5**, 546 (1987).
- <sup>13</sup> S.E. Acosta Ortiz y A. Lastras-Martinez, Phys. Rev.B, **40**,2, (1989).
- <sup>14</sup> S. E. Acosta Ortiz y A. Lastras Martinez, SPIE Symp. Proc. **1286**, 31 (1990).
- <sup>15</sup> L. F. Lastras Martinez y A. Lastras Martinez, Enviado a Phys. Rev. Lett.
- <sup>16</sup> L.F. Lastras, Tesis de maestría, Facultad de Ciencias UASLP, 1992.
- <sup>17</sup> B. Tuck, "The chemical polishing of semiconductors", Journal of materials science, **10**, p. 321-339, (1975).
- <sup>18</sup> R. Balderas, Tesis de maestría, Facultad de Ciencias UASLP, 1991.
- <sup>19</sup> O. G. Glembocki, "Modulation Spectroscopy", SPIE Proceedings, **1286**, 2 (1990).
- <sup>20</sup> Tesis de maestría, F. Sánchez Almazán, Facultad de Ciencias, UASLP, (1994).
- <sup>21</sup> D. E. Aspnes, Surf. Sci. **37**, 418 (1973).
- <sup>22</sup> S. Adachi, T. Kimura, N. Suzuki, J. Appl. Phys., **74**, 5, (1993).
- <sup>23</sup> S. E. Acosta, A. Lastras, Solid. State Commun. **64**, 809 (1987).

- 
- <sup>24</sup> E. A. Fitzgerald *et al*, J. Appl. Phys. **65**, 2220 (1989).
- <sup>25</sup> D.E. Aspnes, "Handbook on semiconductors" Vol. 2, edited by Balkanski North Holland Publishing, p. 125, (1980).
- <sup>26</sup> C. Vazquez, H. Navarro, H. Aceves, R. Vargas, C. Menezes, J. Appl. Phys. **58**, 2066 (1985).
- <sup>27</sup> V. Sovolev, O. Maksimova, S. Kroitoru, Phys. Status Solidi (b) **103**, 499 (1981).
- <sup>28</sup> J. Allègre, B. Gil, J. Calatayud y H. Mathieu, J. Crystal Growth, **101**, 603, (1990).
- <sup>29</sup> G. Brandt, H. Ennen, R. Moritz y W. Rothmund, J. Crystal Growth, **101**, 226, (1990).
- <sup>30</sup> F. de Anda y A. Lastras, en preparación.
- <sup>31</sup> K. Zanio, Semiconductor y Semimetals Vol.13, (Academic Press, 1978).
- <sup>32</sup> N. Ashcroft , D. Mermin. Solid state physics, (Holt-Saunders International editions, 1976), p. 169.

EX LIBRIS

UNIVERSIDAD

DE GUAYMAS

LIBRERÍA

UNIVERSITARIA

No. DE REG.