



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ
INSTITUTO DE FÍSICA
"Manuel Sandoval Vallarta"

ESTUDIO DE REFLECTANCIA DIFERENCIAL EN GaAs:Cr (011)

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA)

PRESENTA

Horacio Izaías Cantú Quirino

ASESOR

Dr. Alfonso Lastras Martínez

San Luis Potosí, S.L.P.

Agosto de 1997

A mis Padres

AGRADECIMIENTOS

Al Dr. Alfonso Lastras Martínez por su importante presencia y asesoría a lo largo de todo el desarrollo de este trabajo.

Al Dr. Luis Felipe Lastras Martínez por su tiempo y disposición en el trabajo tanto teórico como experimental.

A Ezequiel Ontiveros por su ayuda en el taller mecánico y en la fabricación de dispositivos.

A los Maestros en Ciencias Raúl Balderas y Jorge Huerta por sus sugerencias y valiosas discusiones.

A la Secretaría de Educación Pública y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo recibido durante la elaboración de esta tesis.

RESUMEN

En los últimos años la técnica de Reflectancia Diferencial (RD) ha demostrado ser una herramienta muy útil para la comprensión de los mecanismos de formación de anisotropías superficiales en semiconductores cúbicos. El objetivo de este trabajo fue la medición de espectros de RD para cristales de GaAs orientados en (100) y (011), en el rango de energías de 1.3 a 1.55 eV. En trabajos anteriores se constató experimentalmente que los espectros para GaAs (100) tienen una componente asociada a la primera derivada de la reflectividad con respecto a la energía. En este trabajo se demuestra que para GaAs (011) el espectro de RD está asociado a la segunda derivada de R. Ambas formas espectrales están determinadas por la distribución de dislocaciones en el cristal. La diferencia entre los espectros experimentales de RD para las caras (100) y (011) tiene una explicación geométrica que reside en la manera como la luz ve las diferentes dislocaciones al incidir normalmente sobre estas dos superficies.

INDICE

	Pag.
1. INTRODUCCION	2
2. TECNICAS EXPERIMENTALES	4
2.1 Reflectancia Diferencial	4
2.2 Reflectancia	9
2.3 Fotorreflectancia	9
3. RESULTADOS EXPERIMENTALES	12
3.1 Fotorreflectancia	12
3.2 Reflectancia Diferencial	14
4. DISCUSION DE RESULTADOS EXPERIMENTALES	18
4.1 Las dislocaciones de 60° y su tensor de deformación promedio	18
4.2 Forma de línea del espectro de RD	23
4.2.1 Superficie (100)	24
4.2.1 Superficie (011)	26
5. CONCLUSIONES	30
APENDICE A	32
REFERENCIAS	35

CAPITULO 1

INTRODUCCION

La Reflectancia Diferencial (RD) es una técnica experimental de caracterización de semiconductores cúbicos empleando luz polarizada. La RD consiste en la medición de la diferencia en la reflectividad para luz polarizada a lo largo de dos direcciones mutuamente ortogonales. Dichas direcciones deben coincidir con los ejes de simetría del cristal. La diferencia entre la reflectancia de cada polarización es medida, almacenada y procesada para luego obtener información acerca de la superficie del material estudiado. Para la RD en el bulto o interior del cristal, dada la isotropía del mismo, es de esperarse que la diferencial sea cero. El rompimiento de la simetría, observable sólo cerca de la superficie del cristal, trae consigo una señal monitoreable en el espectro de RD.

La técnica de RD tiene una gran importancia científica y tecnológica. Durante los últimos años se ha reportado en los reactores de crecimiento de cristales semiconductores el empleo de la técnica para supervisar el proceso de formación de estructuras periódicas. En varios materiales semiconductores.

incluyendo GaAs y Si, han sido llevados a cabo estudios que intentan asociar una variable física a la espectroscopía RD. Todos estos trabajos no han aclarado de forma concluyente el origen de las mediciones. Las componentes que se detectan en la técnica han llegado a relacionarse con fenómenos tan diversos como dispersión¹, adsorción de moléculas², efectos de campo local³, reconstrucción superficial⁴ y efectos electro-ópticos⁵.

Dentro de este trabajo se reportan espectros de RD en el rango de 1.3 a 1.55 eV para cristales de GaAs con orientaciones (100) y (011). Anteriormente se ha demostrado que los espectros tienen una componente anisotrópica producida por la presencia de dislocaciones de 60°. El modelo desarrollado entonces para la dirección (100) es entendido en función de una distribución espacial de dislocaciones las cuales, observadas desde otra dirección, explicarán el caso (011). La forma de línea en la nueva orientación presenta un origen geométrico distinto y, por tanto, una relación matemática propia.

El orden que se guarda en el presente trabajo es el siguiente: El capítulo 1 es una introducción al tema, el número 2 un breve repaso de la técnica RD utilizada para realizar las mediciones. Dentro del capítulo 3 se presentan los resultados experimentales en forma comparada para las direcciones (100) y (011). El origen físico de los espectros de anisotropías basado en la distribución anisotrópica de las dislocaciones es discutido en el capítulo 4 donde, en forma cualitativa, se concluye una forma de línea para los espectros de RD tanto en (100) como en (011). Tales resultados se comparan con la teoría publicada e inédita de trabajos recientes. Las conclusiones están contenidas en el capítulo 5.

CAPITULO 2

TECNICAS EXPERIMENTALES

2.1 Reflectancia Diferencial

La técnica de RD consiste en la medición de la diferencia en reflectividad para dos polarizaciones de la luz mutuamente perpendiculares incidiendo sobre una misma superficie. Para lograr medir estas cantidades es necesario ser capaz de modular la polarización de la luz monocromática proveniente de alguna fuente. Después se requiere capturar la señal mediante una computadora gracias a un dispositivo sensible a la fase. Es entonces que los datos se pueden desplegar en forma de un espectro en energía.

El espectrómetro de reflectancia diferencial con el cual se realizaron las mediciones de RD se muestra esquemáticamente en la Fig. 2.1. Como fuente de luz se utilizó una lámpara de tungsteno de 150 W, la cual es útil en el rango de energías de 1.3 a 1.55 eV. La luz de la fuente es enfocada en la rendija de entrada de un monocromador (Kratos, modelo GM252), equipado con una rejilla de difracción optimizada a 1000 nm (590 líneas/mm). La luz que sale del

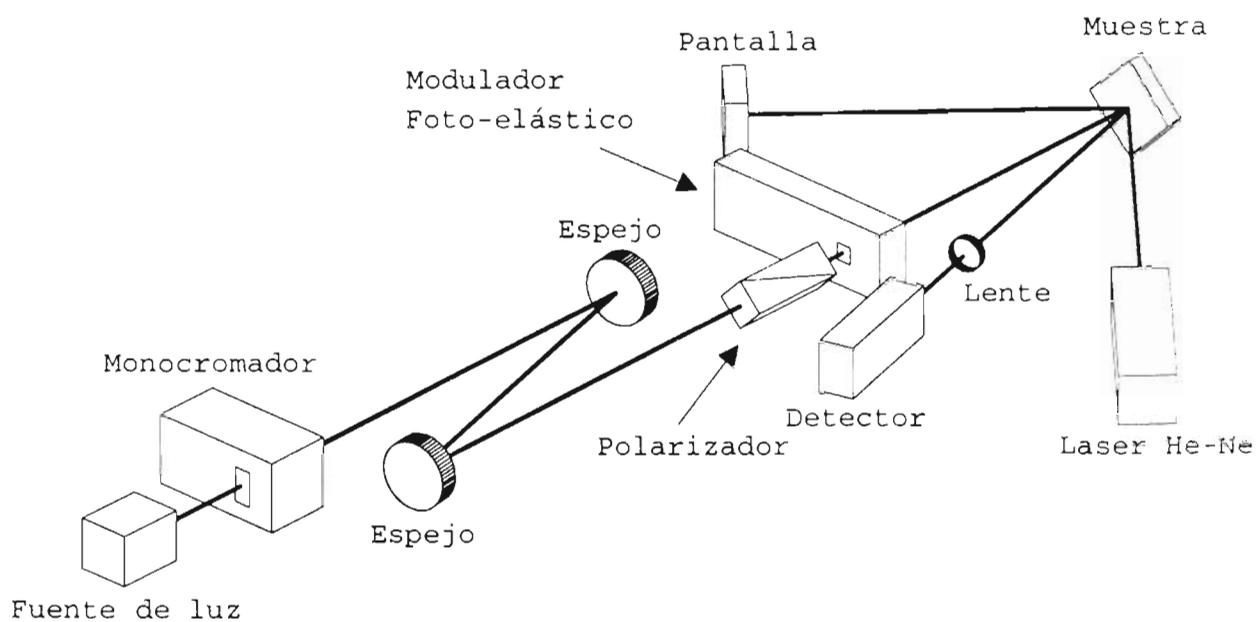


Fig 2.1. Diagrama de bloques de un espectrómetro de RD basado en un modulador fotoelástico. Con este arreglo experimental es posible medir además de espectros de RD, espectros de fotorreflectancia.

monocromador se hace incidir a un ángulo de 3 grados sobre la muestra por medio de dos espejos de 50 cm de distancia focal, habiéndola pasado previamente a través de un polarizador tipo Rochon y de un modulador fotoelástico (Hinds Instruments, modelo PEM-90) de tal manera que el estado de polarización de la luz incidente sobre la muestra oscila entre dos estados de polarización mutuamente perpendiculares. Para obtener un máximo de señal de RD los ejes de simetría del cristal se hacen coincidir con los estados extremos de polarización. La luz reflejada por la muestra se colecta en un fotodetector de silicio (United Detector Technology, modelo UV005) acoplado a un amplificador operacional TL071, cuya señal eléctrica de salida se alimenta a un amplificador sensible a la fase (Stanford Research, modelo SR530) entonado al doble de frecuencia de operación del modulador fotoelástico (100 KHz) para su análisis. Además se tiene un láser He-Ne de 4 mW (Uniphase, modelo 1507-0) el cual es utilizado, tanto para realizar el proceso de alineación que requiere la técnica de RD, como para medir espectros de fotorreflectancia (ver la sección 2.3). El espectrómetro se encuentra automatizado por medio de una computadora personal (PC-486) vía la interfase IEEE-488.

El corazón del modulador fotoelástico es un elemento de silicio fundido acoplado mecánicamente a un transductor con el cual se le envían pulsos eléctricos a una frecuencia de 50 KHz. Estos pulsos producen un efecto mecánico unidireccional en el elemento, modificando el índice de refracción en la dirección del esfuerzo haciéndolo birrefringente. En la Fig. 2.2 se ilustra el modulador fotoelástico y la dirección del esfuerzo aplicado de tal manera que anteponiendo al modulador un polarizador, se retrasa la fase por $\pm\pi$ de la componente de polarización paralela al esfuerzo con respecto a la perpendicular, con lo que la polarización de la luz que emerge del modulador oscila entre dos estados de polarización ortogonales entre sí.

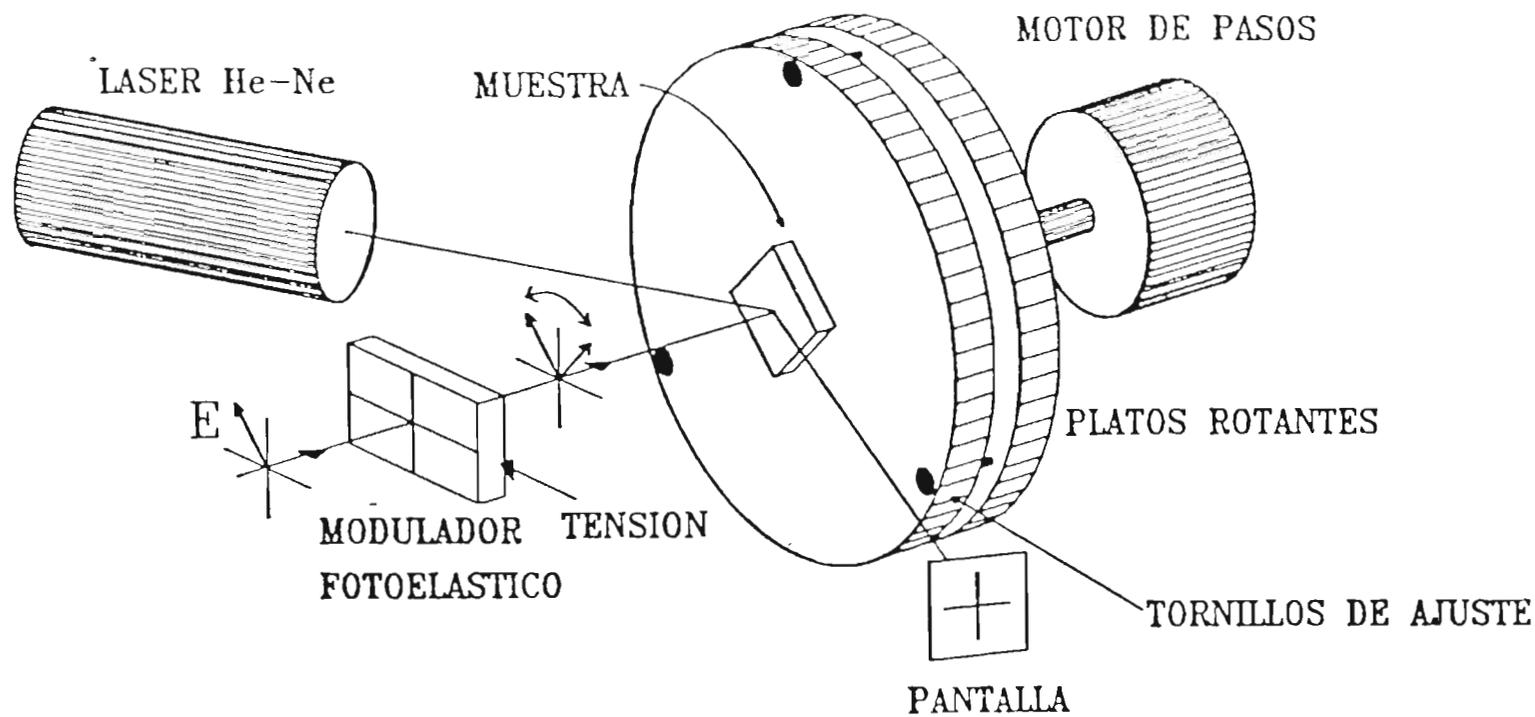


Fig. 2-2. Diagrama esquemático del montaje de la muestra en el espectrómetro de RD. Mediante los tornillos se alinea la superficie de la muestra perpendicular al eje de rotación del montaje. Esta alineación es esencial para medir espectros de RD a diferentes orientaciones de la muestra con el objeto de eliminar señales parásitas.

Durante la medición del espectro de RD la muestra permanece fija a un montaje rotante cuya posición angular es controlada por la computadora a través de un motor de pasos. Este montaje consiste en dos platos de aluminio de 4 pulgadas de diámetro unidos por medio de tres tornillos y un resorte, lo que permite alinear la superficie de la muestra perpendicular al eje de rotación del sistema, como se muestra en la Fig. 2.2. Esta alineación es esencial para medir RD a diferentes orientaciones del ángulo de simetría de la muestra sin que el haz de luz que incide sobre el detector se mueva. La alineación se realiza reflejando un láser de He-Ne en la superficie de interés.

Al medir un espectro de RD es común que se presente también una señal parásita no asociada a las anisotropías intrínsecas de la muestra bajo estudio. Esta señal se puede atribuir a la incidencia no normal de la luz sobre alguna de las superficies en el sistema o a la inhomogeneidad de la mancha luminosa. Las señales de RD reportadas en esta tesis son del orden de 10^{-4} y las señales parásitas pueden ser del mismo orden o aún mayores.

Para eliminar estas señales parásitas se restan dos espectros de RD obtenidos para dos orientaciones angulares de la muestra separadas por 90 grados. El análisis óptico del espectrómetro⁶ nos lleva a la conclusión de que la señal eléctrica a la salida del amplificador sensible a la fase está dado por

$$\frac{\Delta S}{S} = \frac{\Delta R}{R} \text{sen}(2\Phi) + S_p, \quad (2.1)$$

en donde S_p es la señal parásita independiente de Φ (el ángulo entre un eje perpendicular a la horizontal y el eje cristalino de la muestra).

De acuerdo con el procedimiento para eliminar señales parásitas⁶, se miden dos espectros a $\Phi = \pi/4$ y $\Phi = -\pi/4$ y se toma la diferencia, lo que da de acuerdo a la Ec. 2.1

$$\left(\frac{\Delta S}{S}\right)_{\pi/4} - \left(\frac{\Delta S}{S}\right)_{-\pi/4} = 2 \frac{\Delta R}{R}, \quad (2.2)$$

la cual es una señal libre de señales parásitas.

2.2 Reflectancia

Las mediciones de reflectancia se hicieron con un espectrofotómetro CARY 5E el cual es un instrumento automatizado capaz de realizar estudios en reflectividades absolutas. En la Fig. 2.3 se muestra un esquema de dicho instrumento, destacando la cámara en donde se coloca la muestra. El procedimiento de uso del sistema incluye a primera instancia el trazo de una línea de base para que el programa en PC sea capaz de calcular errores y realizar ajustes. El espejo central de la cámara se cambia de posición como se indica en la figura citada. Una vez terminado este primer paso, se coloca el espejo en su lugar original y se procede a la corrida de los espectros. Mediante software los parámetros de medición se introducen al equipo. Como se puede ver en la Fig. 2.3, la luz incide sobre la muestra en dos ocasiones, por ello es necesario que la muestra sea suficientemente grande para abarcar el área de reflexión. En caso contrario, se procede a colocar un espejo en uno de los puntos de incidencia y se colecta así la información. La señal obtenida (de muestra y espejo) es dividida entonces entre el resultado de reflectividad absoluta para el espejo utilizado.

2.3 Fotorreflectancia

La técnica de fotorreflectancia consiste en lograr un campo eléctrico modulado (generalmente mediante láser) sobre la superficie de un material a estudiar. Al mismo tiempo, y en la misma área donde se crea el campo, luz monocromática es reflejada a un fotodetector (alternativamente de silicio), el cual convierte en señal eléctrica la reflexión. Esta medición, junto con la frecuencia de modulación de la

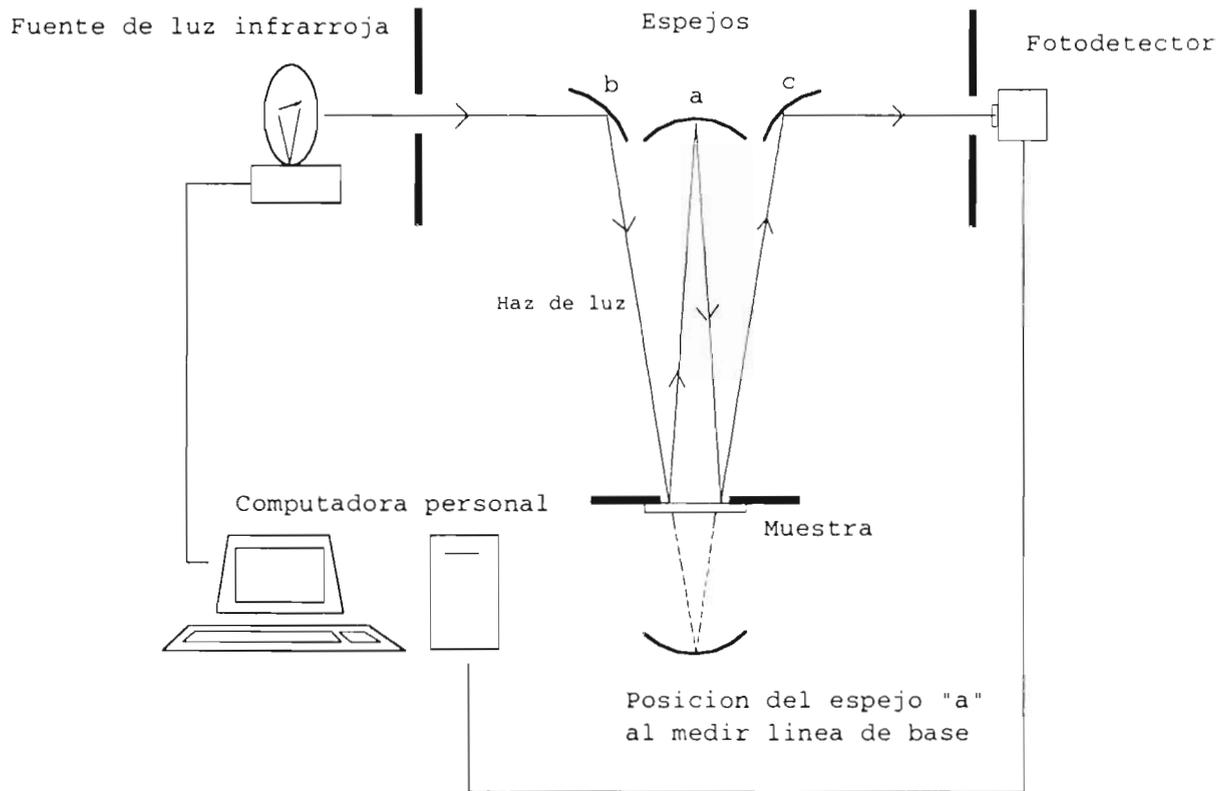


Fig. 2.3. Diagrama del espectrofotómetro CARY 5E donde se ilustra la cámara donde se posiciona la muestra y el cambio de posición del espejo "a" al medir la línea de base.

luz, se alimenta a un dispositivo sensible a la fase. Este equipo elimina el ruido e introduce a una computadora las cantidades numéricas de fotorreflectancia con las cuales es posible graficar un espectro que caracteriza al material estudiado.

Las mediciones de fotorreflectancia se llevaron a cabo por medio del mismo arreglo experimental empleado en las mediciones de RD usando el láser de He-Ne de alineación para variar el campo eléctrico de la muestra bajo estudio. Por medio de un recortador de haces (chopper), la radiación láser se modula a una frecuencia de 100-300 Hz. La señal de referencia para operar el amplificador lock-in la proporciona el recortador de haces. Montando la muestra en el mismo arreglo de la Fig. 2.2, deshabilitando el equipo PEM y el prisma Rochon, se pueden trazar espectros de fotorreflectancia usando el mismo programa que para RD.

El equipo utilizado fue un rayo láser He-Ne de 4 mW (Uniphase modelo 1507-0), un chopper (Bentham 218), un fotodetector (United Detector Technology, modelo UV005), un lock-in (Stanford Research, modelo SR530) y una PC-486.

CAPITULO 3

RESULTADOS EXPERIMENTALES

3.1 Fotorreflectancia

En la Fig. 3.1 se muestran los espectros de fotorreflectancia para dos cristales de GaAs con orientaciones (100) y (011). Los dos espectros resultan muy similares. Como es bien conocido, la fotorreflectancia es debida a la modulación del campo eléctrico superficial por la radiación láser incidente sobre la superficie del semiconductor. La forma de línea del espectro de fotorreflectancia puede escribirse como la suma de un término lineal y un término cuadrático en el campo eléctrico⁷. El término lineal, sin embargo, es usualmente de segundo orden comparado con el término cuadrático, de tal manera que el espectro de fotorreflectancia está determinado en gran medida por este último. En el límite de campo bajo, la forma de línea del espectro de fotorreflectancia es proporcional a la tercera derivada de R con respecto a la energía, resultado que es independiente de la orientación cristalina de la superficie del semiconductor. Es entonces predecible la similitud de los espectros de la Fig. 3.1.

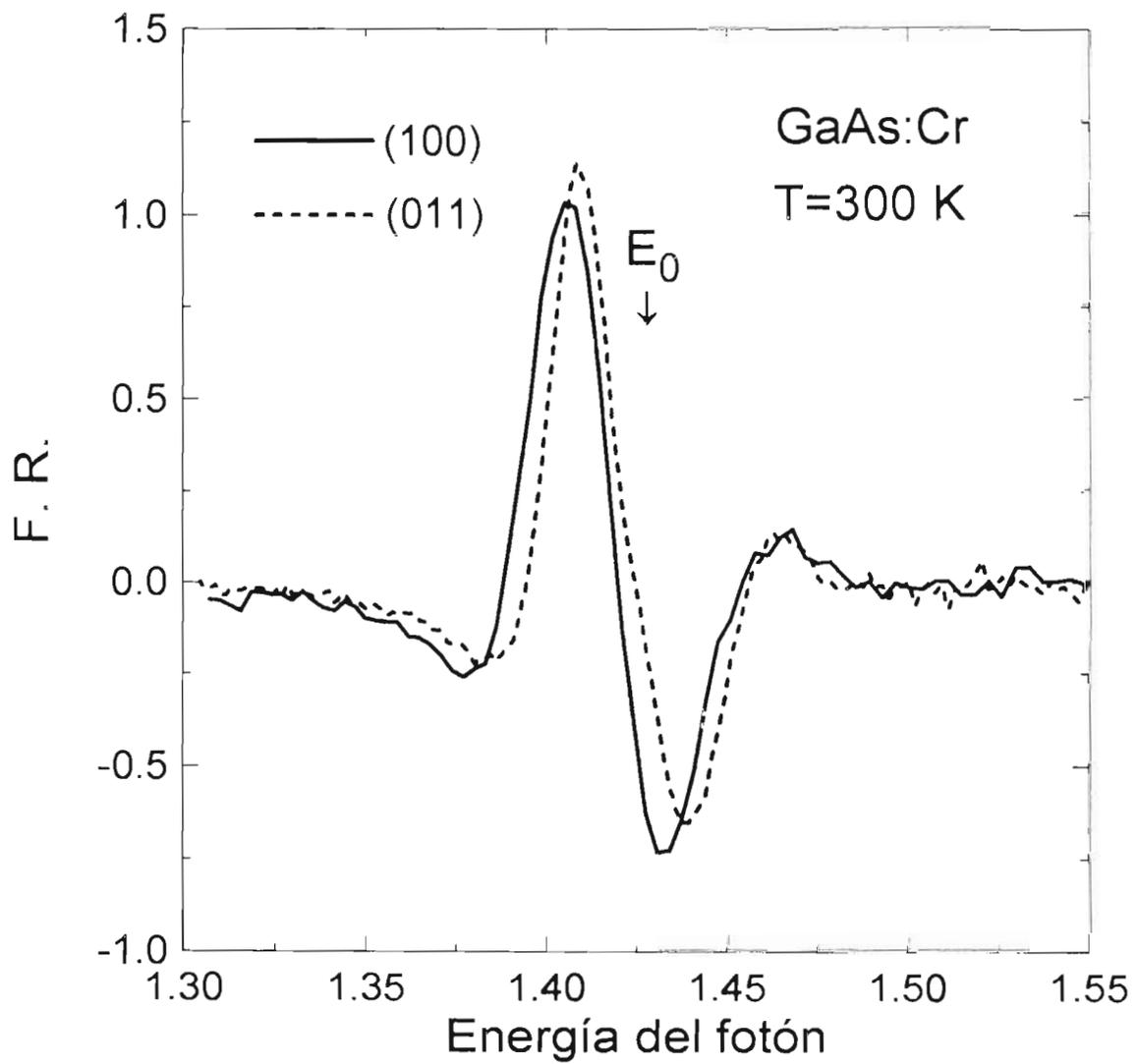


Fig. 3.1. Espectros de fotorreflectancia para (100) y (011) alrededor de la transición E_0 .

3.2 Reflectancia Diferencial

En la Fig. 3.2 es posible ver los espectros experimentales de RD de las dos muestras de GaAs (100) y (011) del inciso anterior, para energías alrededor de la brecha fundamental E_0 . Podemos ver de la Fig. 3.2 que, en contraste con los espectros de fotorreflectancia de la Fig. 3.1, los espectros de RD presentan diferencias notables entre sí. En efecto, mientras que el espectro de RD correspondiente a la cara (100) es proporcional a la primera derivada de R con respecto a la energía, tal como fue demostrado anteriormente⁸, el espectro de RD para la cara (011) resulta proporcional a la segunda derivada de R con respecto a la energía. Este hecho notable, que se discutirá a continuación, constituye el resultado central de esta tesis.

En la Fig. 3.3(a) la línea de puntos corresponde al espectro de RD para el cristal (100), mientras que la línea continua es la primera derivada con respecto a la energía (obtenida numéricamente) del espectro de reflectancia de un cristal de GaAs:Cr (100). Como puede verse, hay una gran coincidencia entre ambas curvas, en acuerdo con resultados anteriores⁸. De manera similar, los puntos en la Fig. 3.3(b) corresponden al espectro de RD del cristal (011) mientras que la línea continua nos muestra la segunda derivada del espectro de reflectividad R, esto último para la misma muestra GaAs:Cr (100) de la Fig. 3.3(b). La coincidencia entre ambos espectros es notable, permitiéndonos concluir que la forma de línea de espectro de RD de GaAs alrededor de la brecha fundamental es fuertemente dependiente de la orientación cristalina, en contraste con la fotorreflectancia cuya forma de línea es relativamente insensible a dicha orientación.

Conclusiones publicadas en trabajos anteriores⁸ nos permiten establecer *a priori* que las dislocaciones de 60° originan deformaciones que modifican anisotrópicamente las propiedades ópticas en la superficie de un cristal de GaAs.

De acuerdo a la teoría desarrollada en la referencia 8 las dislocaciones determinan, para GaAs (100), un espectro de RD cuya forma de línea es proporcional a la primera derivada de R, lo que no corresponde a lo observado para GaAs (011). Este resultado obliga al desarrollo de un nuevo modelo que satisfaga las nuevas condiciones para la luz incidente en la nueva cara. Sólo la consideración de la teoría anterior en una nueva perspectiva podría aclarar la nueva forma de línea. Esto se considerará en el siguiente capítulo.

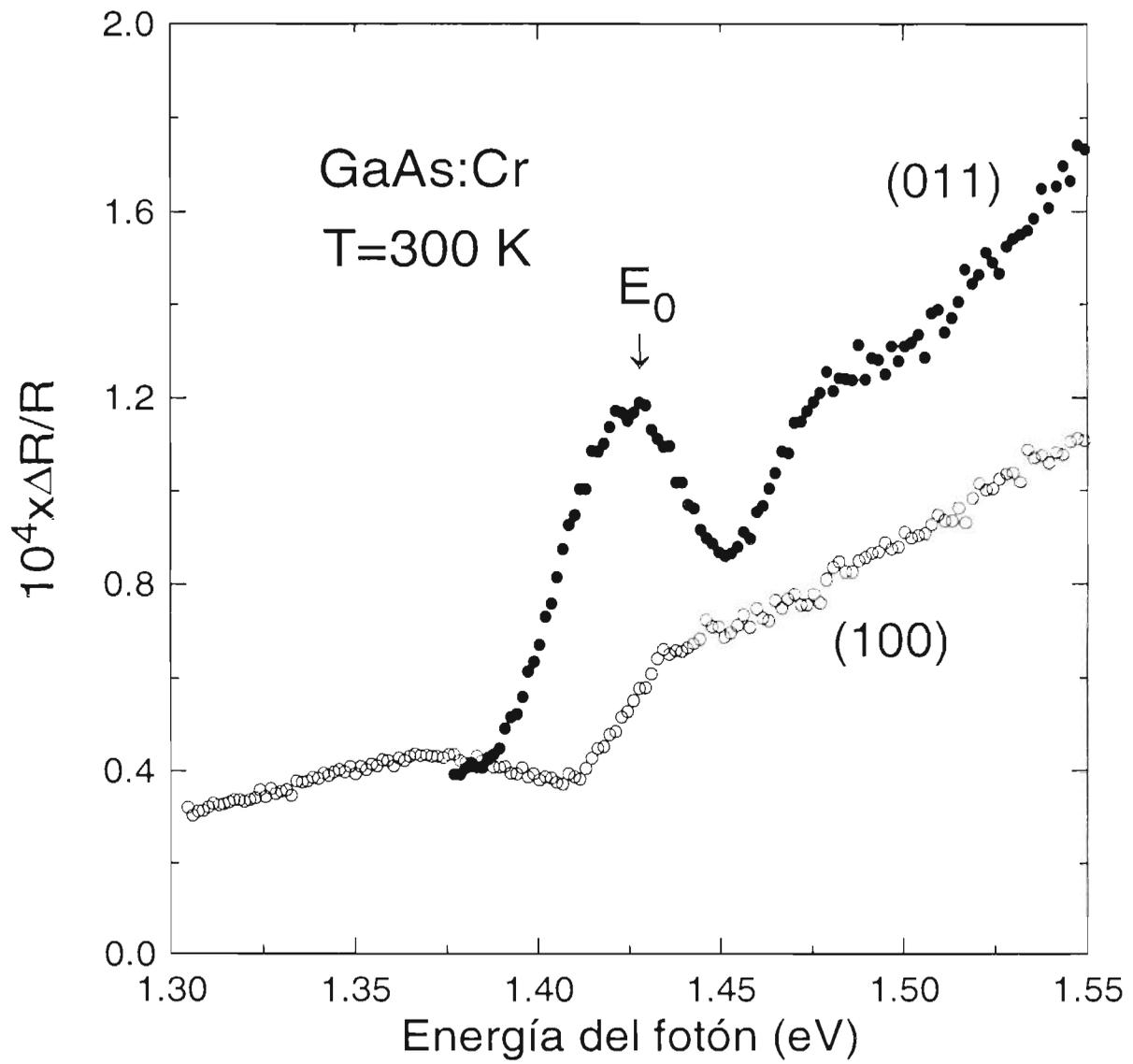


Fig. 3.2. Espectros de Reflectancia Diferencial para (100) y (011) en el punto crítico E_0 .

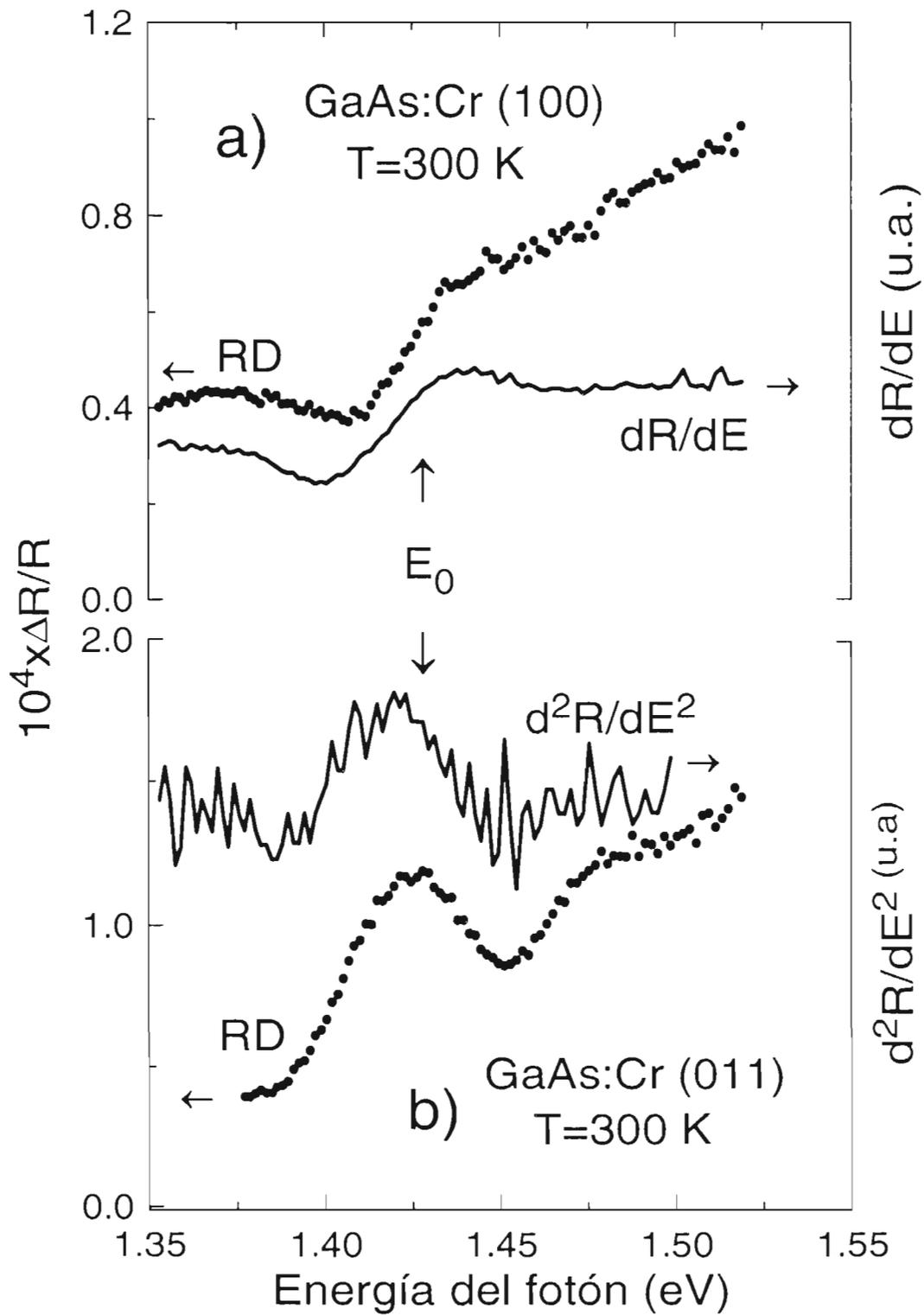


Fig. 3.3. Análisis de los datos para: (a) RD y primera derivada de la reflectividad en (100); (b) RD y segunda derivada de la reflectividad en (011).

CAPITULO 4

DISCUSION DE RESULTADOS EXPERIMENTALES

4.1. Las dislocaciones de 60° y su tensor de deformación promedio

Para poder explicar la naturaleza de segunda derivada del espectro de RD en la superficie (011) empezaremos por el análisis de las dislocaciones de 60° y sus tensores de deformación. Consideraremos primeramente el caso, previamente estudiado⁸, de incidencia normal sobre la superficie (100).

Empleando la notación introducida anteriormente⁸, el vector de Burgers para las 16 dislocaciones paralelas a la superficie (100), que son las únicas que dan una anisotropía en esta superficie, puede escribirse como

$$b^{(ijkmn)} = b_e^{(ijk)} + b_s^{(mn)} = -\frac{a}{4}[ijk] + \frac{a}{4}[0mn], \quad (4.1)$$

donde a es la constante de red del cristal, $i = \pm 2$ y j, k, m y n toman valores ± 1 , con la condición adicional $|\mathbf{l} \cdot \mathbf{b}| = lb \cos(\pi/3)$. En la Tabla I se listan los valores que pueden tomar los índices $ijkmn$ y su clasificación.

Los tensores de deformación promedio (en un plano paralelo a la superficie) para la componente de esquina⁸ de las dislocaciones definidas por los vectores de Burgers de la Ec. 4.1 están dados por⁸

$$\langle e_{(e)}^{(ijk)} \rangle = \langle e_{22} \rangle \begin{pmatrix} -k \frac{c_{12}}{c_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & j \delta_{jk} & 0 \\ 0 & 0 & j(\delta_{jk} - 1) \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

donde c_{11} y c_{12} son las constantes de compliancia del semiconductor y $\langle e_{22} \rangle$ es la tensión promedio en el plano paralelo a la superficie del cristal.

En la Fig. 4.1(a) se muestra el campo elástico de deformación asociado a las dislocaciones paralelas a la superficie (100). Las líneas alrededor de cada dislocación representan el campo de deformación. Las áreas claras y sombreadas corresponden a regiones de compresión y de tensión, respectivamente.

De las 16 posibles dislocaciones que generan una anisotropía en la superficie (100), sólo 8 lo hacen en (011). Esto es debido a que sólo ocho dislocaciones son paralelas a esta última superficie. En la Tabla II se listan los índices correspondientes a cada una de estas 8 dislocaciones.

El tensor de deformación promedio (en un plano paralelo a la superficie (011)) para la componente de esquina de las dislocaciones definidas por la Tabla II está dado por⁹

$$\langle e^{(ijk)} \rangle = \langle e_{(e)}^{(ijk)} \rangle = \frac{i \langle e_{22} \rangle}{2} \delta_{jk} \begin{pmatrix} -\frac{c_{11} + c_{12} + 2c_{44}}{2c_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

donde c_{ab} son las constantes de compliancia del cristal.

En la Fig. 4.1(b) se muestran los respectivos campos de deformación de las dislocaciones paralelas a la superficie (011).

La geometría de ambas orientaciones estudiadas aparece en la Fig. 4.2.

Tabla I. Clasificación de las dislocaciones de 60° paralelas a la superficie (100).

Tipo de disloc.	\mathbf{b}_e			\mathbf{b}_t	
	j	k	i	m	n
α^+	1	1	2 -2	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1
α^-	1	-1	2 -2	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1
β^+	-1	1	2 -2	± 1 ∓ 1	± 1 ∓ 1
β^-	-1	-1	2 -2	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1

Tabla II. Dislocaciones de 60° paralelas a la superficie (011).

Tipo de disloc.	\mathbf{b}_e			\mathbf{b}_t		Tensión superficial
	j	k	i	m	n	
α^+	1	1	2 -2	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	Tensil Compresiva
β^-	-1	-1	2 -2	± 1 ∓ 1	∓ 1 ± 1	Compresiva Tensil

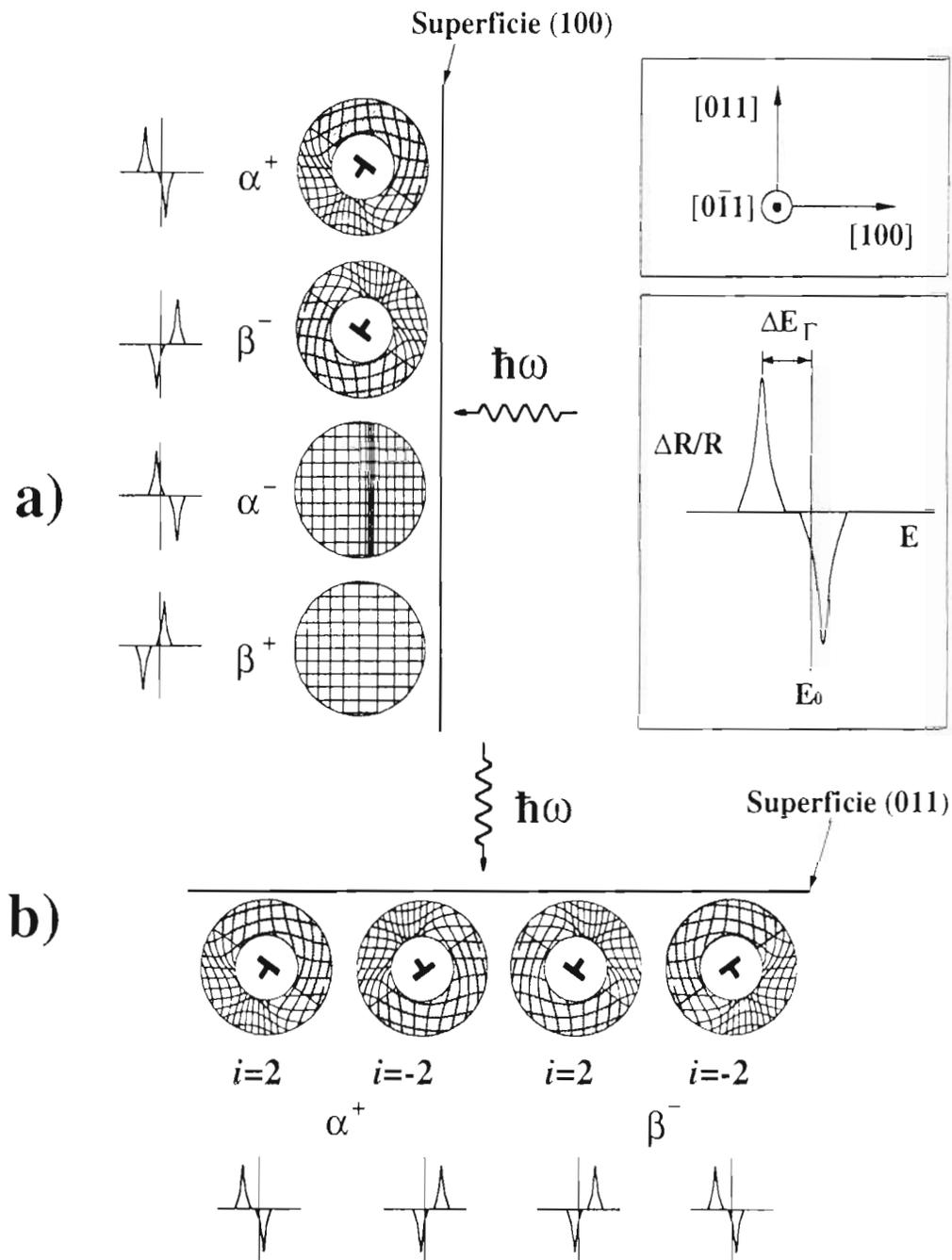


Fig. 4.1. Campo de deformación obtenido a partir de los tensores (4.2) y (4.3) para dislocaciones α^+ , α^- , β^- y β^+ . Se muestran las superficies (100) en (a) y (011) en (b). Las líneas en el interior de los círculos representan el resultado de la deformación elástica producida por una dislocación de 60° sobre una red cúbica.

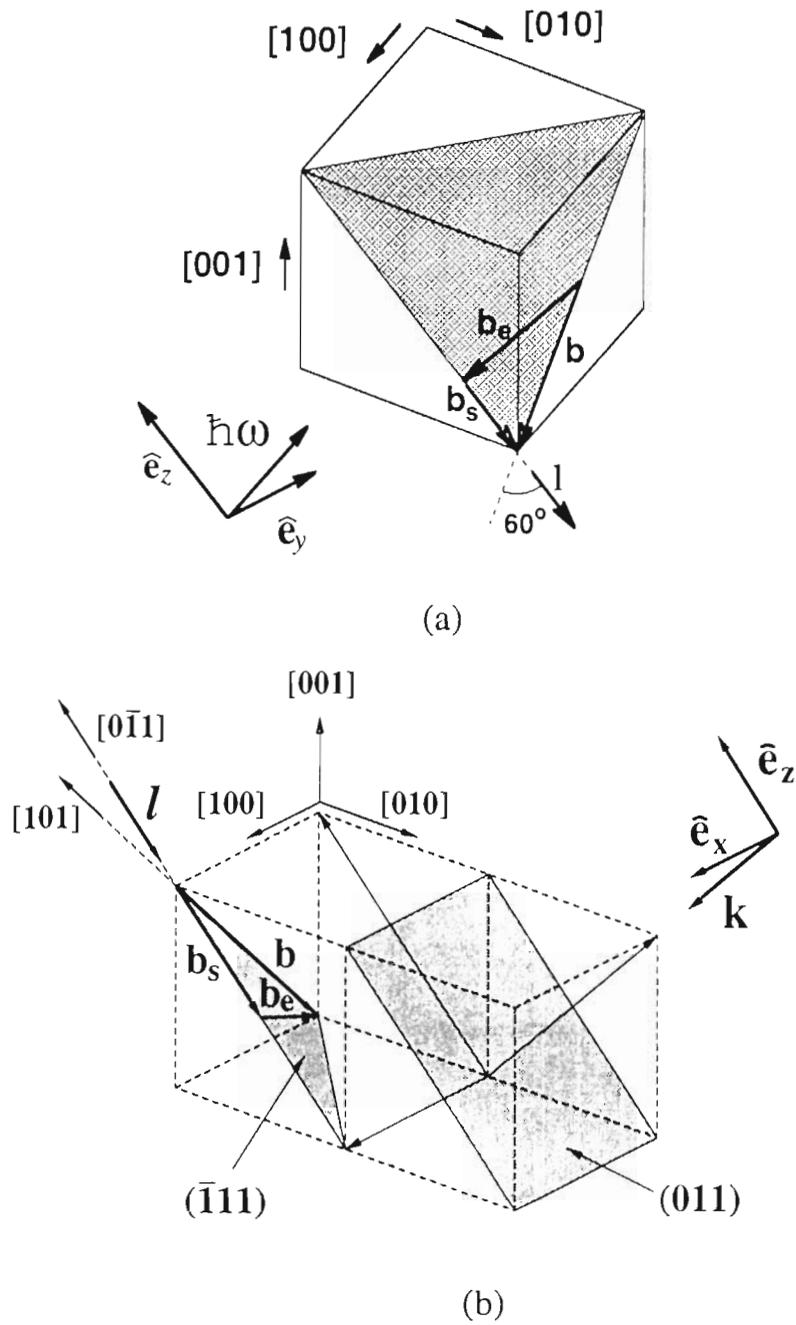


Fig. 4.2. (a) Dislocación tipo α^+ con borde a lo largo de $[01\bar{1}]$ y componentes de esquina y tornillo a lo largo de $[21\bar{1}]$ y $[01\bar{1}]$, respectivamente. (b) Una estructura similar pero con incidencia de luz sobre el plano (011) .

4.2 Forma de línea del espectro de RD

Dentro de esta discusión explicaremos primero en forma analítica cómo el campo de deformación de las dislocaciones descrito por los tensores (4.2) y (4.3), provoca que el espectro de RD medido en cada superficie tenga una forma de línea particular. En base a los distintos tipos de dislocaciones α^+ , α^- , β^- y β^+ se analizarán sus contribuciones correspondientes al espectro. Para proceder de la mejor manera es preciso hacer algunos comentarios acerca de la forma de línea del espectro de RD.

Primeramente, la función dieléctrica del semiconductor se escribirá como

$$\varepsilon(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0) = \frac{A}{E^2} MJ(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0) \quad (4.4)$$

donde M y $J(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0)$ son, respectivamente, el elemento de matriz y la densidad de estados conjunta para las transiciones interbanda y A es una constante independiente de la energía⁷.

Asumiendo para las dislocaciones un área de influencia igual a $2l^2$, donde l es la longitud de la dislocación, podemos escribir la forma de línea de los espectros de RD como⁷

$$\frac{\Delta R}{R} = 4l^3 \frac{A}{E^2} \sum_{ijkmr} \rho^{(ijkm)} \operatorname{Re} \left[(\alpha_s - i\beta_s) \Delta M^{(jkr)} J(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0 + \Delta \mathbf{E}^{(ikr)}) \right] \quad (4.5)$$

en donde α_s y β_s son los coeficientes de Seraphin, i es la unidad imaginaria y ρ es la densidad de dislocaciones definida por los índices $ijkm$. La cantidad $\Delta \mathbf{E}^{(ikr)}$ incluye una componente de corrimiento en energía debida a la deformación hidrostática y otra componente de partición (*splitting*) de niveles energéticos por efecto de la pérdida de simetría cúbica del cristal. $\Delta M^{(jkr)}$ es la diferencia en los cuadrados de los elementos de la matriz para la transición interbanda del cristal

perturbado entre las dos polarizaciones de la luz incidente. El cálculo de las cantidades $\Delta E^{(kr)}$ y $\Delta M^{(jkr)}$ en cada superficie de interés nos permitirá encontrar la forma de línea de RD que necesitamos.

4.2.1 Superficie (100)

Primeramente $\Delta M^{(jkr)}$ para (100) está dada en función de los índices jkr por⁸

$$\Delta M^{(jkr)} = M^{(jkr)}(\hat{e}_z) - M^{(jkr)}(\hat{e}_y) = r \frac{3}{4} M(2\delta_{jk} - 1), \quad (4.6)$$

donde M es el cuadrado del elemento de matriz para la transición E_0 en el cristal no perturbado. Otro importante resultado es el cambio en la energía ΔE para (100), el cual puede escribirse como⁸

$$\Delta E^{(kr)} = k\Delta E^{(h)} + rk\Delta E^{(s)}, \quad (4.7)$$

donde

$$\Delta E^{(h)} = \frac{1}{2} \left[b^2 \left(1 + 2 \frac{c_{12}}{c_{11}} \right)^2 + d^2 \right]^{\frac{1}{2}} \langle e_{22} \rangle,$$

y

$$\Delta E^{(s)} = a \left(1 - \frac{c_{12}}{c_{11}} \right) \langle e_{22} \rangle.$$

$\Delta E^{(h)}$ es el cambio de energía debido a la componente hidrostática del tensor de deformación (4.2), $\Delta E^{(s)}$ es la energía de rompimiento de la banda de valencia (ver Fig. 4.3), a , b y d son los potenciales de deformación para las deformaciones hidrostáticas, tetragonales y ortorrómbicas respectivamente.

Con estos resultados es posible llevar a cabo la sumatoria de la Ec. 4.5. Evaluando sobre los índices m , r , e i se obtiene la expresión

$$\begin{aligned} \frac{\Delta R}{R} = 12 M l^3 \frac{A}{E^2} \sum_{jk} \rho^{(2jk1)} \text{Re}\{(\alpha - i\beta) \left[(2\delta_{jk} - 1) J(E, E_0 + k\Delta E^{(h)} + k\Delta E^{(s)}) \right. \\ \left. - (2\delta_{jk} - 1) J(E, E_0 + k\Delta E^{(h)} - k\Delta E^{(s)}) \right]\}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

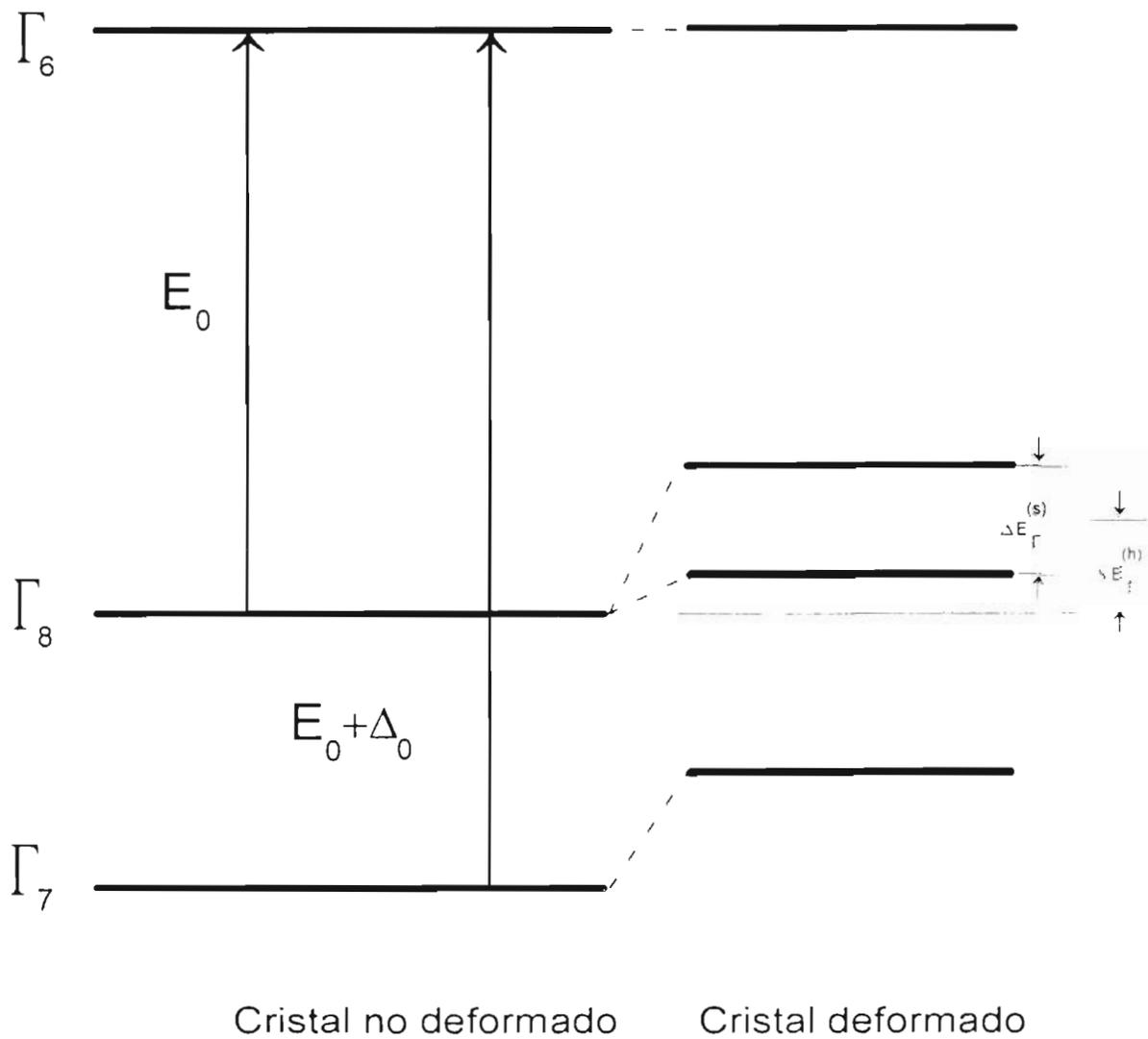


Fig. 4.3. Diagrama esquemático de la estructura de bandas de un cristal de zincblenda en el punto de simetría Γ . Los estados Γ_8 , cuatro veces degenerados, además de presentar movimientos energéticos en sus estados, rompen su degeneración bajo la influencia de la deformación.

donde se ha supuesto que la densidad de dislocaciones es independiente del índice i y m .

Evaluando los últimos índices de la sumatoria y considerando la notación

$$\Delta\rho = \rho^\alpha - \rho^\beta$$

y las densidades ρ^α y ρ^β como

$$\rho^\alpha = 8\rho^{(2111)},$$

$$\rho^\beta = 8\rho^{(2-111)},$$

podemos escribir en forma aproximada $\Delta R/R$ suponiendo que la energía $\Delta E^{(s)}$ es pequeña comparada con el ancho intrínseco del espectro de reflectancia,

$$\frac{\Delta R}{R} = -\frac{3Ml^3\Delta\rho A}{E^2} \operatorname{Re} \left\{ (\alpha - i\beta) \left[\frac{\partial J(E, E_0 + \Delta E^{(h)})}{\partial E} + \frac{\partial J(E, E_0 - \Delta E^{(h)})}{\partial E} \right] \right\} \Delta E^{(s)}. \quad (4.9)$$

Finalmente, empleando la Ec. 4.4 en la Ec. 4.9 y asumiendo que la energía es mucho menor que el ancho intrínseco del espectro de reflectancia se obtiene la expresión de primera derivada

$$\frac{\Delta R}{R} = -\frac{6l^3\Delta\rho}{E^2} \operatorname{Re} \left\{ \left[(\alpha - i\beta) \frac{\partial (E^2 \varepsilon(E, E_0))}{\partial E} \right] \right\} \Delta E^{(s)}. \quad (4.10)$$

Como se puede notar, es necesario un desbalance entre los dos tipos de densidades existentes α y β . La igualdad de estas cantidades originaría una señal de RD nula.

4.2.2 Superficie (011)

Procediendo de la misma forma que en el inciso anterior, haremos uso de las expresiones de $\Delta E^{(ikr)}$ y $\Delta M^{(jkr)}$. Trabajos inéditos⁹ demuestran que la segunda

cantidad es sólo dependiente del índice r ,

$$\Delta M^{(r)} = r \frac{3}{4} M. \quad (4.11)$$

Para el cambio de energía ΔE , a diferencia del caso anterior, se hará patente la dependencia en i , k y r .

$$\Delta E^{(ikr)} = \frac{ik}{2} \Delta E^{(h)} + r \frac{ik}{2} \Delta E^{(s)}. \quad (4.12)$$

En este caso,

$$\Delta E^{(h)} = a \left(1 - \left[\frac{c_{11} + c_{12} + 2c_{44}}{2c_{12}} \right] \right) \langle e_{22} \rangle,$$

y

$$\Delta E^{(s)} = \left[b^2 \left[\frac{1}{2} + \left(\frac{c_{11} + c_{12} + 2c_{44}}{2c_{12}} \right) \right]^2 + \frac{d^2}{4} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

Donde las constantes se refieren a los mismos valores del modelo (100).

Notando que en este caso sólo es necesario realizar en la Ec. 4.5 la suma sobre uno de los índices k o j , puesto que uno determina al otro, es posible eliminar alguno sin que afecte ello el resultado. Sumando entonces para la Ec. 4.5 en los subíndices m , i y r podemos obtener la expresión

$$\begin{aligned} \frac{\Delta R}{R} = 6l^3 \frac{A}{E^2} M \sum_k \rho^{(2k1)} \operatorname{Re} \{ & (\alpha - i\beta) [J(E, E_0 + k\Delta E^{(h)} + k\Delta E^{(s)}) \\ & + J(E, E_0 - k\Delta E^{(h)} - k\Delta E^{(s)}) \\ & - J(E, E_0 + k\Delta E^{(h)} - k\Delta E^{(s)}) \\ & - J(E, E_0 - k\Delta E^{(h)} + k\Delta E^{(s)})] \}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Aquí se ha considerado que la densidad de dislocaciones es independiente de los índices m e i .

Por último, sumando sobre el índice k en la Ec. 4.13 y definiendo las

densidades de dislocaciones α y β como

$$\rho^\alpha = 8\rho^{(211)},$$

y

$$\rho^\beta = 8\rho^{(2-11)},$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\Delta R}{R} &= \frac{3Al^3M}{2E^2} (\rho^\alpha + \rho^\beta) \operatorname{Re} \left\{ (\alpha - i\beta) \left[\frac{\partial J(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0 - \Delta \mathbf{E}^{(h)})}{\partial \mathbf{E}} - \frac{\partial J(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0 + \Delta \mathbf{E}^{(h)})}{\partial \mathbf{E}} \right] \right\} \Delta \mathbf{E}^{(s)} \\ &= -\frac{3Al^3M}{2E^2} (\rho^\alpha + \rho^\beta) \operatorname{Re} \left\{ (\alpha - i\beta) \left[\frac{\partial^2 J(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0)}{\partial E^2} \right] \right\} \Delta \mathbf{E}^{(h)} \Delta \mathbf{E}^{(s)}. \end{aligned}$$

Finalmente, empleando la Ec. 4.4 se llega a

$$\frac{\Delta R}{R} = -\frac{3l^3}{2E^2} (\rho^\alpha + \rho^\beta) \operatorname{Re} \left\{ (\alpha - i\beta) \left[\frac{\partial^2 (E^2 \varepsilon(\mathbf{E}, \mathbf{E}_0))}{\partial E^2} \right] \right\} \Delta \mathbf{E}^{(h)} \Delta \mathbf{E}^{(s)}, \quad (4.14)$$

la expresión de segunda derivada.

Los resultados analíticos anteriores pueden entenderse intuitivamente por medio de la Fig. 4.1. En ella se muestra esquemáticamente como ve la luz incidente los esfuerzos introducidos por las dislocaciones para las dos superficies (100) y (011) consideradas. Anteriormente se mencionó que, para la superficie (100) las cuatro clases de dislocaciones α^+ , α^- , β^+ y β^- contribuyen al espectro de RD. En la Fig. 4.1(a) se muestran estas dislocaciones con sus respectivos campos de compresión y de tensión. Además aparece un diagrama que muestra en forma esquemática la contribución de cada una de ellas al espectro de RD. Los picos mostrados en dichos diagramas corresponden a la participación de cada uno de los dos niveles en los que se rompen los estados degenerados del cristal no perturbado. Dichos picos son positivos o negativos de acuerdo con las reglas de selección de la Ec. 4.6. Igualmente, dependiendo de si la dislocación produce una región de compresión o de tensión cerca de la superficie, su corrimiento

hidrostático será positivo o negativo. El espectro de RD se obtiene sumando las contribuciones de las cuatro dislocaciones. Este tiene claramente una naturaleza de primera derivada.

Por otro lado, en la Fig. 4.1(b) se muestran los cuatro tipos de dislocaciones que contribuyen a la anisotropía para la superficie (011). Estudiando los diagramas de reflectividad correspondientes el espectro de RD y comparando con los respectivos a (100) se llega claramente a una naturaleza de segunda derivada.

Reconsiderando los resultados de las Fig. 3.1 a Fig. 3.3, podemos decir que están de acuerdo con las predicciones del modelo expuesto. Marcadamente y alrededor de la transición E_0 los datos de RD para (100) y (011) se ajustan a las formas comunes de la primera y segunda derivada de la reflectividad.

CAPITULO 5

CONCLUSIONES

Mediante el uso de un espectrómetro de Reflectancia Diferencial (RD) se realizaron mediciones en el rango de energía entre 1.3 y 1.55 eV para dos cristales de GaAs con orientaciones (100) y (011). Tales espectros pudieron ser derivados numéricamente para contrastar su comportamiento con un modelo matemático.

Siguiendo el mismo método que estableció una forma de línea de primera derivada para (100), se llega al resultado de segunda derivada para (011). Estas soluciones implican la consideración de una deformación producida por una distribución anisotrópica de dislocaciones de 60° cerca de la superficie del cristal.

Inicialmente se compararon los espectros de fotorreflectancia y RD. Las estructuras del primer caso resultaron idénticas para los dos planos. A diferencia de éstas, las características de la RD para cada orientación fueron distintas, demostrando así un origen particular en cada caso.

Fue medida la reflectancia de ambas muestras. A partir de los datos

obtenidos se derivó numéricamente y se comparó con las señales de los anteriores experimentos.

Los espectros de RD obtenidos a lo largo de la transición E_0 (1.42 eV) para GaAs:Cr (100) y (011) resultaron estar acorde con la primera y segunda derivada de la reflectividad. Dicha concordancia se restringe a los alrededores del punto crítico donde la componente estudiada resulta ser dominante.

APENDICE A

La estructura cristalina de Zincblenda es cúbica centrada en la cara. El acomodo atómico para GaAs se muestra en la Fig. A.1. En trabajos recientes los mecanismos que dan origen a las anisotropías en los cristales de GaAs han sido atribuidos a la formación de dislocaciones en la superficie. Las anisotropías para (011) resultan ser del mismo orden de magnitud que las de (100). Mediciones de RD se han realizado en este trabajo sobre los planos mostrados en la Fig A.2.

Las propiedades ópticas en un cristal cúbico o zincblenda son isotrópicas en el bulto. El rompimiento de la simetría en las capas exteriores puede atribuirse a defectos lineales que son consecuencia de la introducción de un semiplano extra en el cristal.

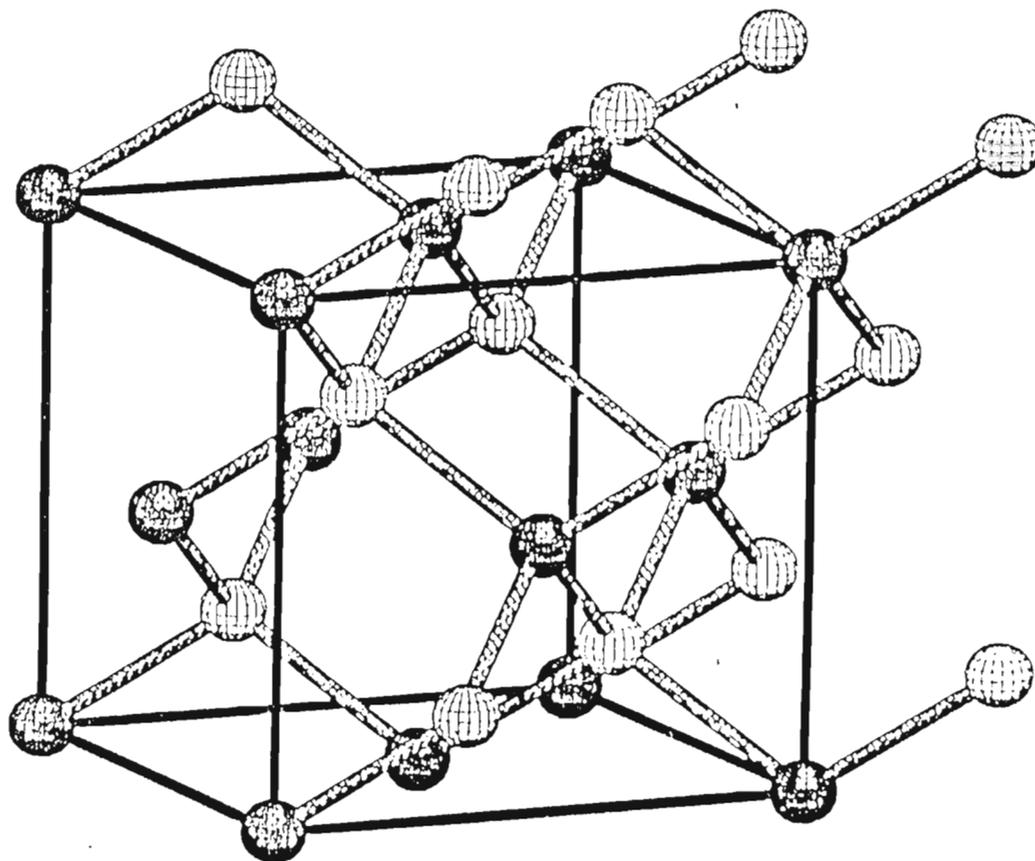
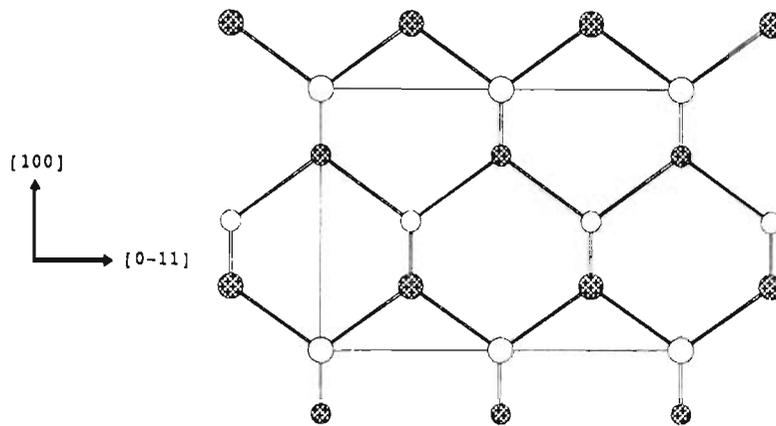
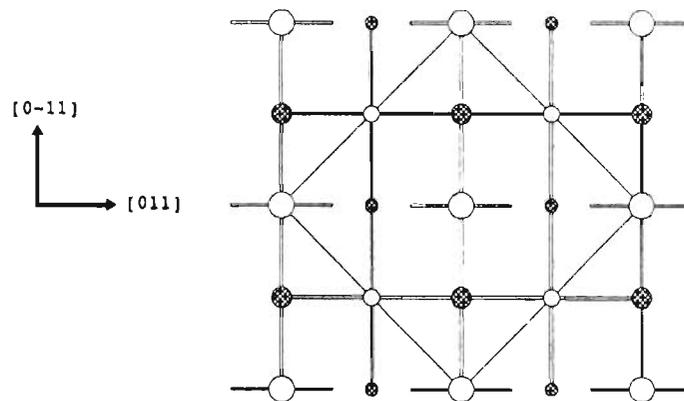


Fig. A.1. Estructura de un cristal de Zincblenda. Los círculos negros representan un tipo de átomo (por ejemplo Arsénico) y los blancos otro tipo (por ejemplo Galio).



a) Cara [011]



b) Cara [100]

Fig A.2. Estructura de Zincblenda vista desde: a) la superficie (011) la cual se forma de planos sucesivos de los dos tipos de átomos (círculos blancos y negros) y b) la superficie (100) la cual se forma de planos sucesivos de un sólo tipo de átomos (círculo blanco o negro). Los círculos más grandes (pequeños) representan los planos más externos (internos).

REFERENCIAS

- ¹D. E. Aspnes and A. A. Studna, J. Vac. Sci. Technol. **A 5**, 546 (1987).
- ²D. E. Aspnes, J. Vac. Sci. Technol. **B 3** 1498 (1985).
- ³W. L. Mochán and R. G. Barrera, Phys. Rev. Lett. **55**, 1192 (1985).
- ⁴Y. C. Chang, S. F. Ren and D. E. Aspnes, J. Vac. Sci. Technol. **A 10**, 1856 (1992).
- ⁵S. E. Acosta-Ortíz and A. Lastras-Martínez, Phys. Rev. B **40**, 1426 (1989).
- ⁶L. F. Lastras-Martínez, A. Lastras-Martínez and R. E. Balderas-Navarro, Rev. Sci. Instrum. **64**, 2147 (1993).
- ⁷D. E. Aspnes, in Handbook on Semiconductors, edited by M. Balkanski (North Holland, Amsterdam, 1980) Vol. 2, p. 125.
- ⁸L. F. Lastras-Martínez and A. Lastras-Martínez, Phys. Rev. B **54**, 10 726 (1996).
- ⁹L. F. Lastras-Martínez, unpublished.

EXPLORIS

SISTEMA DE
BIBLIOTECAS
U.A.S.L.P.

No. DE REG.