

No. Reg. \_\_\_\_\_  
Procedencia \_\_\_\_\_  
Proveedor \_\_\_\_\_  
Factura No. \_\_\_\_\_  
Precio \_\_\_\_\_  
Fondo \_\_\_\_\_  
Catalogador \_\_\_\_\_  
Fecha \_\_\_\_\_



Universidad Autónoma de San Luis Potosí

---



Facultad de Ciencias

Componentes de Bulto y Superficie de  
Espectros de Reflectancia Diferencial  
alrededor de  $E_1$ :  
"Análisis en el Espacio Recíproco"

TESIS

Para obtener el grado de  
Maestro en Ciencias Aplicadas

P R E S E N T A :

Rafael Herrera Jasso

ASESOR:

Dr. Luis Felipe Lastras Martínez

Diciembre de 2009

San Luis Potosí, S.L.P.



Universidad Autónoma de San Luis Potosí

---



Facultad de Ciencias

Componentes de Bulto y Superficie de  
Espectros de Reflectancia Diferencial  
alrededor de  $E_1$ :  
"Análisis en el Espacio Recíproco"

---

I.F. Rafael Herrera Jasso

Sinodales:

---

Dr. Luis Felipe Lastras Martínez (Asesor)

---

Dr. Raúl Balderas Navarro

---

Dr. Alfonso Lastras Martínez

---

Dr. Gustavo Ramírez Flores

## Agradecimientos

Agradezco a mis padres, hermanos, y a toda mi familia por su fe y esperanza depositada en mi, gracias por todo, agradezco a todos mis compañeros y amigos que tengo en general sin mencionar nombres por si llego a olvidar a alguno por su apoyo, ayuda y amistad. Le doy las gracias a mi asesor por su ayuda, apoyo, disposición, confianza, cordialidad y en general por todo. Agradezco a todos los sinodales por su solidaridad, disposición, y asistencia. Doy gracias a la institución y a todo el personal del IICO, agradezco a CONACYT y a la UASLP por el apoyo brindado durante toda la Maestría. Y por todo lo que se me allá olvidado por mencionar gracias.

# Contenido

Resumen .....	1
Capítulo I	
Introducción .....	2
Capítulo II	
Teoría .....	5
2.1 Consecuencias de la deformación en los espectros de la Reflectancia Diferencial .....	6
2.2 Forma de línea de Reflectancia Diferencial .....	10
2.3 Contribucion excitonica y de un electrón alrededor de la transición $E_1$ .....	15
2.3.1 Análisis en el Espacio Directo .....	16
2.3.2 Análisis en el Espacio Inverso .....	17
Capítulo III	
Detalles experimentales	
3.1 Descripción del espectrómetro para la medición de Espectros de Reflectancia Diferencial .....	21
3.2 Prensa para la aplicación de la tensión uniaxial externa ..	25
3.3 Pulido mecánico de muestras .....	28

## Capitulo IV

Resultados y Discusión .....	29
4.1 Reflectancia Diferencial en GaP (001)	
4.1.1 GaP con esfuerzo uniaxial .....	30
4.1.2 GaP (001) con diferentes concentraciones de portadores .....	34
4.1.3 GaP (001) con daño superficial .....	38
4.2 Reflectancia Diferencial en Si (110) y Si (001)	
4.2.1 Si (110) .....	43
4.2.2 Si (001) .....	46

## Capitulo V

Conclusiones .....	51
Bibliografía .....	52

# Resumen

En el presente trabajo de tesis, se presentan mediciones de Reflectancia Diferencial (RD) alrededor del punto crítico  $E_1$  para los semiconductores GaP y Si. El análisis de los espectros se realizó tanto en el espacio real como en el espacio inverso de Fourier. Estos dos materiales se eligieron debido a que la separación de su interacción spin-orbita  $\Delta_1$  es pequeña ( $\Delta_1 < 100$  meV) y por tanto a temperatura ambiente no es posible resolver las transiciones  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ , entonces pueden ser tratadas como una sola transición. El hecho de tener solo una transición en el rango espectral medido simplifica el análisis en el espacio inverso. En el caso de GaP (001) se midieron y analizaron las componentes del espectro de RD bajo una tensión a lo largo de la dirección [110] tanto de bulto como de superficie. En el caso de Si (110) se demuestra sin ninguna duda que el espectro es proporcional a la función dieléctrica  $\epsilon$ . Para el caso de Si (001) bajo una tensión aplicada a lo largo de [110] se observó como las transiciones en el rango espectral medido se separan, observándose dos transiciones. En este último caso se ajustaron con un modelo físico, los espectros de RD en el espacio real, obteniéndose excelentes resultados.

# CAPITULO I

## Introducción

La Espectroscopia de Reflectancia Diferencial (RDS ó simplemente RD)[1] ha tenido un fuerte desarrollo en los últimos veinte años. La RD, aplicada a semiconductores de simetría cubica, es sensible al rompimiento de su simetría. Este rompimiento puede producirse aplicando externamente una tensión uniaxial o por el rompimiento de la simetría debida a la presencia de la superficie. El desarrollo de modelos teóricos y cálculos numéricos para el entendimiento de las formas de línea de la RD han incrementado la potencialidad de la técnica. Se han identificado componentes de origen electro-óptico[2], piezo-óptico[3], de rugosidad[4], inducidas por reconstrucciones superficiales[5], entre otras. Adicionalmente la RD ha sido extendida a niveles microscópicos, permitiendo la elaboración de mapas de la superficie del cristal bajo estudio[6].

A pesar de lo anterior, existen componentes de la RD cuyo origen físico no ha sido establecido. En particular, es aun controversial en algunos casos, el valor del espesor  $l$  de la región por debajo de la superficie en donde se produce el rompimiento de simetría y por tanto la señal de RD. Si definimos como  $d$  la penetración de la luz, entonces podemos establecer dos condiciones limites para la señal

de RD: *i*) limite de bulto ( $l \gg d$ ) y *ii*) limite de superficie ( $l \ll d$ ).

Al interpretar y elaborar un modelo para la forma de línea de la RD es de fundamental importancia establecer si el espectro de RD está en alguno de los límites o en una condición intermedia. La señal compleja de RD está dada por[7]

$$\frac{\Delta r}{\tilde{r}} = \frac{e^{i\beta}}{\sqrt{\varepsilon(\varepsilon-1)}} \Delta\varepsilon \quad (1)$$

en donde  $\varepsilon$  es la función dieléctrica y  $\Delta\varepsilon$  es la anisotropía en la función dieléctrica. La fase  $\beta$  de la señal de RD nos indica entre otras cosas, si la señal es de superficie o bulto o en una condición intermedia. La fase es de fundamental importancia en la interpretación de los espectros de RD ya que mezcla la parte real e imaginaria de la señal modificando la forma de línea. En el límite de bulto  $\beta = 0$  y en el de superficie  $\beta = \pi/2$  [8, 9]. Valores de  $\beta$  entre estos dos límites son interpretados como una condición intermedia.

El objetivo principal de este trabajo de tesis es el estudio de espectros de RD en diferentes condiciones para la determinación e interpretación correcta de la fase. Los semiconductores estudiados en esta tesis son GaP y Si. Se reportan espectros de RD alrededor

de las transiciones ópticas  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ . Estos materiales tienen la característica de que su desdoblamiento spin orbita es pequeño. En el caso de GaP se reportan espectros de RD para la cara (001) de muestras tipo n con dopajes de  $n = 1-2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , y  $n = 1-2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , tanto sin tensión externa aplicada como con tensión externa. De igual forma para generar tensiones en el límite de superficie, se generaron defectos lineales por medio de un pulido mecánico. En el caso de Si se reportan espectros de RD en la cara (110) y (001). Este ultimo bajo tensión de bulto.

El presente trabajo de tesis está organizado como sigue. En el capítulo II se discute la forma de línea de los espectros de RD inducida por deformación y se revisa la teoría del espacio directo y reciproco. En el capítulo III se discute el arreglo experimental y las muestras utilizadas en los experimentos. En el capítulo IV se discute e interpretan los resultados experimentales. Finalmente se dan las conclusiones en el capítulo V.

# CAPITULO II

## 2 Teoría

Si a un cristal cubico se le aplica un esfuerzo uniaxial a lo largo de alguna dirección cristalográfica ( $[110]$  ó  $[\bar{1}\bar{1}0]$ ) este producirá como resultado una deformación que modificara la simetría del cristal de cubica ( $T_d$ ) a ortorrómbica ( $C_{2v}$ ), transformando al cristal haciéndolo ópticamente anisotropico. Es posible confirmar ese cambio producido por una fuerza externa en forma experimental haciéndole incidir un haz de luz polarizado a la muestra a estresar para posteriormente detectarla y analizar la luz que refleja esta. El espectro para la RD es sensible al cambio del estado de polarización de la luz reflejada. Este cambio en el estado de polarización es debido a que el material se esforzó provocando una deformación lo cual modifica tanto la simetría del cristal como el volumen de la muestra provocando un cambio en el índice de refracción del material, ocasionando que el camino óptico que toman los dos estados de polarización mutuamente perpendiculares entre sí, sean diferentes por lo tanto hace que su diferencia (para RD) sea diferente de cero dando consigo una señal de anisotropía.

## 2.1 Consecuencias de la deformación en los espectros de la Reflectancia Diferencial

Consideremos ahora una superficie (001) de un semiconductor zincblenda con una perturbación externa originado por dos mecanismos actuando simultáneamente: uno debido a un campo eléctrico a lo largo de [001] y un esfuerzo uniaxial aplicado a lo largo de [110]. Dando como resultado una pérdida en su simetría. Bajo estas condiciones las únicas componentes del tensor de deformación diferentes de cero son [10]

$$\begin{aligned}e_{xx} = e_{yy} &= \frac{S_{11} + S_{12}}{2} X, \\e_{zz} &= S_{12} X, \\e_{xy} = e_{yx} &= d_{14} F + \frac{S_{44}}{4}\end{aligned}\tag{2.1}$$

Donde  $d_{14}$  es el modulo piezo eléctrico  $S_{11}$ ,  $S_{12}$  y  $S_{44}$  son las constantes de complianza elástica,  $F$  y  $X$  son las magnitudes del campo eléctrico superficial y del esfuerzo aplicado, respectivamente. Para un semiconductor tipo n se toma como convención  $F > 0$  y  $X < 0$  cuando el entorno aplica un trabajo negativo al sistema o sea una compresión. El efecto del tensor de perturbación en los niveles electrónicos está descrito por el Hamiltoniano de Pikus-Bir[11].

Tomando como perturbación total la suma de los hamiltonianos de la interacción spin orbita y de Pikus-Bir tenemos que para el tensor de la Ec. (2.1) la perturbación está dada por:

$$H = H'_\epsilon + H_{so}$$

$$H = -a^{(i)} (S_{11} + 2S_{12})X$$

$$\begin{aligned} & -3b^{(i)} \left[ (L_x^2 - \frac{1}{3}L^2) \frac{S_{11} + S_{12}}{2} + (L_y^2 - \frac{1}{3}L^2) \frac{S_{11} + S_{12}}{2} + (L_z^2 - \frac{1}{3}L^2) S_{12} \right] X \\ & - \frac{6}{\sqrt{3}} d^{(i)} \left( \frac{S_{34}}{4} X + d_{14} F \right) (L_x L_y + L_y L_x) + \frac{\Delta_1}{2} L \cdot S \end{aligned} \quad (2.2)$$

Donde  $a^{(i)}$ ,  $b^{(i)}$  y  $d^{(i)}$  son los potenciales de deformación hidrostático, tetragonal y ortorrómbico para la  $i$ -ésima banda,  $L_x$ ,  $L_y$  y  $L_z$  son las componentes del momento angular.  $L$  y  $S$  se refieren al momento angular y al momento spinorial respectivamente,  $\Delta_1$  es la magnitud de la interacción spin orbita. El tensor de deformación lleva a un cambio tensorial en la función dieléctrica compleja ( $\Delta\epsilon = i\Delta\epsilon$ ) del semiconductor. En nuestro caso nos interesan tales cambios para luz de incidencia normal sobre la superficie (001) con polarización a lo largo de  $[1\bar{1}0]$  ó  $[110]$  para energías alrededor de  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$  y con  $\Delta_1 < 100$  meV. Es notable que las direcciones  $[110]$  y  $[1\bar{1}0]$  correspondan a las de un máximo cambio para  $\Delta\epsilon$  [12].

Las transiciones  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$  son conocidas originariamente de puntos de simetría  $\Lambda$  en la zona de Brillouin [13]. En el cristal zincblenda sin perturbar hay 8 puntos  $\Lambda$  equivalentes. No es difícil de ver esas consideraciones geométricas en presencia de una tensión definida en la Ec. (2.1) esos 8 puntos no son más equivalentes pero se separan a partir de dos grupos de 4 puntos equivalentes [12], un primer grupo denotado como  $[111]$ , contiene puntos a lo largo de  $[111]$ ,  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[11\bar{1}]$  y  $[\bar{1}\bar{1}1]$ , y un segundo grupo denotado como  $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ , contiene puntos a lo largo de  $[\bar{1}\bar{1}1]$ ,  $[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $[1\bar{1}1]$  y  $[\bar{1}1\bar{1}]$ .

En la figura 2.1 se muestra el diagrama de los niveles de energía para puntos de simetría  $\Lambda$  cuando el material se encuentra en dos estados: sin perturbar ( $X=0$  y  $F=0$ ) y con perturbación externa: efecto del campo eléctrico superficial ( $F \neq 0$ ) a lo largo de  $[001]$  y al aplicar el esfuerzo externo ( $X \neq 0$ ) en la dirección  $[110]$ , mostrando que los niveles de energía se modifican con la deformación que en nuestro caso implicarían cambios en la posición energética de  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ , rompiendo la degeneración existente tanto para la banda de conducción como para la banda de valencia.

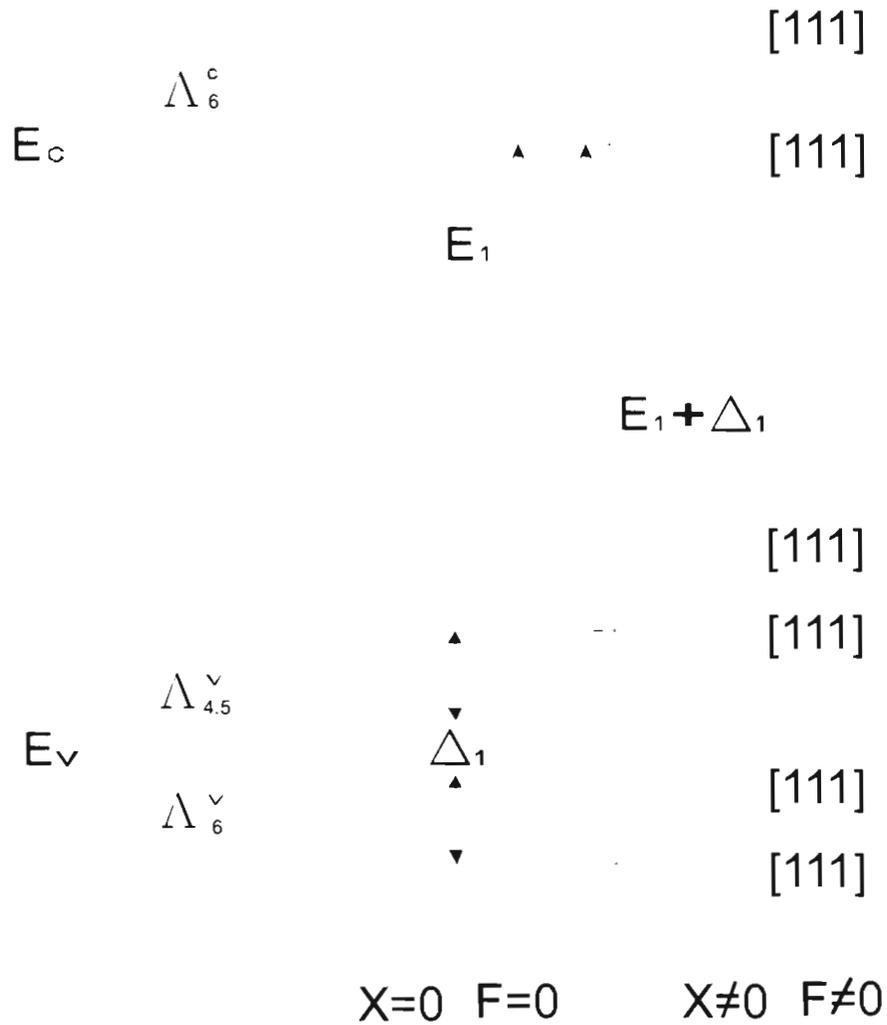


Figura 2.1: Niveles de energía para los puntos  $\Lambda$  sometidos a un esfuerzo uniaxial  $X$  en la dirección  $[110]$  y un campo eléctrico  $F$  a lo largo de  $[001]$ .

## 2.2 Forma de línea de Reflectancia Diferencial

El Hamiltoniano (2.2) representa el rompimiento y el corrimiento en energía de puntos críticos de simetría  $\Lambda$  y  $\Gamma$  [3,10,11,]. Este hecho induce una anisotropía sobre la función dieléctrica. De modo que se relaciona la anisotropía en el espectro de reflectividad con una anisotropía sobre la función dieléctrica a través de la relación [7].

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re} [(\alpha - i\beta) \Delta\varepsilon] \quad (2.3)$$

Donde  $\alpha$  y  $\beta$  son los coeficientes de Seraphin. Para RD  $\Delta\varepsilon$  está definida como la anisotropía de la función dieléctrica para la luz polarizada a lo largo de  $[110]$  y para la luz polarizada a la largo de  $[1\bar{1}0]$ . La forma de línea de los espectros de RD por efecto de una tensión uniaxial externa o de un campo eléctrico superficial se obtiene como el desarrollado en [3,10,11]. Despreciando la deformación inducida por el campo eléctrico es decir sustituyendo  $F=0$  en el tensor (2.1). Por lo tanto asumiendo que la anisotropía en

la función dieléctrica para los dos estados de polarización mutuamente perpendiculares de dirección  $[110]$  y  $[\bar{1}\bar{1}0]$  con  $\mathbf{X} \neq 0$  y  $\mathbf{F} = 0$ , puede escribirse como [3.10.11]:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon^{[1-10]} - \varepsilon^{[110]} = \frac{1}{E^2} \frac{\partial E^2 \varepsilon(E, E_1 + \Delta E_{so} + \Delta E_h)}{\partial E} \Delta E_s' + \left( \frac{4r(\gamma')}{\Delta_1} \right) \varepsilon(E, E_1 + \Delta E_{so} + \Delta E_h) \quad (2.4)$$

Donde  $\Delta E_s' = \frac{1}{4} \left[ \frac{1}{(\sqrt{3})} D_1^5 S_{44} \right] X$ ; se refiere al rompimiento de energía inducido por  $X$ ,  $\Delta E_{so} = (1-r) \frac{\Delta_1}{2}$ , es el desdoblamiento spin orbita, con  $r = \pm 1$  se refiere las transiciones  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ ,  $\Delta E_h = \frac{D_1^1}{\sqrt{3}} (S_{11} + 2S_{12})$  es el corrimiento hidrostático inducido por  $X$ , y  $\gamma' = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{\sqrt{6}} D_3^5 S_{44} \right] X$ . Además  $D_1^1$  y  $D_1^5$  son los potenciales de deformación hidrostático y ortorrómbico para las transiciones de simetría  $\Lambda$  respectivamente,  $D_3^5$  es el potencial de deformación ortorrómbico para la banda de valencia.

Además el cambio en la función dieléctrica para los dos estados de polarización mutuamente perpendiculares de dirección  $[110]$  y  $[\bar{1}\bar{1}0]$  con  $\mathbf{X} = 0$  y  $\mathbf{F} \neq 0$ , puede escribirse como:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon^{[1-10]} - \varepsilon^{[110]} = \frac{1}{2E^2} \frac{\partial E^2 \varepsilon(E, E_1 + \Delta E_{so} + \Delta E_h)}{\partial E} \Delta E_s'' + \left( \frac{4r(\gamma'')}{\Delta_1} \right) \varepsilon(E, E_1 + \Delta E_{so} + \Delta E_h) \quad (2.5)$$

Con  $\Delta E_s'' = \frac{D_1^5}{\sqrt{3}} d_{14} F$  que se refiere al rompimiento de energía inducido por  $F$ ;  $\gamma'' = \frac{1}{\sqrt{6}} D_3^5 d_{14} F$ .

Cabe mencionar que en  $X \neq 0$  incluye una deformación de corte y una de tipo hidrostática (cambio en el volumen del cristal), en cambio para  $F \neq 0$  solo está presente una deformación de corte. De este modo se podría calcular una forma de línea teórica para los espectros de RD medidos experimentalmente, ajustando una forma de línea de tipo Lorenziana para la función dieléctrica en el espacio directo<sup>1</sup> para GaP (001) bajo presencia de un esfuerzo aplicado, con diferentes concentraciones de portadores, con daño superficial y para Si (110) y Si (001) bajo esfuerzo compresivo.

Ahora para calcular el  $\Delta\varepsilon$  experimental de Silicio (110) se emplea un formalismo semejante obtenido diferenciando la expresión de Fresnel para la reflectancia, el cual es para dos medios (aire - sustrato), sistema con luz a incidencia normal sobre la superficie esto es:

$$\tilde{r} = \frac{n_a - n}{n_a + n} \quad (2.6)$$

Siendo  $n^2 = \varepsilon$  y  $n_a^2 = \varepsilon_a$  donde  $n_a$  y  $n$  es el índice de refracción del ambiente (aire) y del sustrato. De modo que:

$$\tilde{r} = \frac{1 - n}{1 + n} \quad (2.7)$$

---

<sup>1</sup>Ver Capitulo 2.3.1 pag. 11

Entonces:  $\Delta \tilde{r} = \frac{\partial \tilde{r}}{\partial n} \Delta n$  (2.8)

Siendo:  $\frac{\partial \tilde{r}}{\partial n} = - \left[ \frac{1-n}{(1+n)^2} + \frac{1}{1+n} \right]$

Por lo que:  $\frac{\Delta \tilde{r}}{\tilde{r}} = \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{r}}{\partial n} \Delta n$  (2.9)

Como  $\varepsilon = n^2$ , la diferencial es  $\Delta \varepsilon = 2n \Delta n \therefore \Delta n = \frac{\Delta \varepsilon}{2n}$ , la Ec. (2.9) se puede escribir como:

$$\frac{\Delta \tilde{r}}{\tilde{r}} = \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{r}}{\partial n} \frac{\Delta \varepsilon}{2n} = \left( \frac{1}{2n} \frac{1}{\tilde{r}} \frac{\partial \tilde{r}}{\partial n} \right) \Delta \varepsilon \quad (2.10)$$

La reflectancia diferencial se puede expresar en términos del coeficiente de reflexión complejo del medio bajo consideración.

Usando  $\tilde{r} = r e^{i\theta}$ ; que es la forma compleja del coeficiente de reflexión para incidencia normal. Tomando esto en cuenta la Ec. (2.10) también se puede expresar como:

$$\frac{\Delta \tilde{r}}{\tilde{r}} = \frac{e^{i\theta}}{r e^{i\theta}} \Delta r + i \frac{r e^{i\theta}}{r e^{i\theta}} \Delta \theta$$

Simplificando:  $\frac{\Delta \tilde{r}}{\tilde{r}} = \frac{\Delta r}{r} + i \Delta \theta$  (2.11)

Considerando la reflectividad  $R = |\tilde{r}|^2$ , se tiene

$$\frac{\Delta R}{R} = 2Re \left[ \frac{\Delta \tilde{r}}{\tilde{r}} \right] \quad (2.12)$$

Por lo tanto despejando  $\Delta \varepsilon$  de la Ec. (2.9), el cambio en la función dieléctrica esta dado por:

$$\Delta \varepsilon = 2n\tilde{r} \frac{\Delta \tilde{r}}{r} \frac{1}{\frac{\partial \tilde{r}}{\partial n}} \quad (2.13)$$

Empleando la Ec. (2.13) es posible calcular el cambio en la función dieléctrica generada en la cara (110) del Silicio.

## 2.3 Contribución excitónica y de un electrón alrededor de la transición $E_1$

Como se ha estado viendo es de mucha importancia el análisis en la función dieléctrica para los materiales a estudiar ya sea tanto en la forma de línea experimental como la calculada teóricamente. Ya que  $\varepsilon$  se caracteriza por tener fenomenológicamente la forma de línea de tipo Lorentziana y por tanto el espectro que contiene a las transiciones ópticas de RD para un material anisotrópico también. Por lo tanto se ajusta una función que tenga la misma forma  $\varepsilon$  para calcular de forma teórica el espectro de RD experimental. Adicionalmente la determinación del carácter de las transiciones, el cual está correlacionado (transición excitónica) o anticorrelacionado (transición electrónica), es necesario para el análisis de la función dieléctrica. En el análisis del espacio directo (o real) la forma de línea analítica de la función dieléctrica para un solo punto crítico parabólico tiene la siguiente forma genérica [14, 16-18]

$$\varepsilon = C e^{i\beta} (E - E_g + i\Gamma)^{-\mu} \quad (2.14)$$

donde  $C$  representa la amplitud,  $\beta$  es el factor de fase,  $E_g$  es la energía de umbral,  $\Gamma$  es un parámetro de ensanchamiento, y  $\mu$  es el orden de la singularidad. Para transiciones de un electrón,  $\mu$

toma el valor de  $1/2$  para una dimensión (1D), cero (logarítmica) para dos dimensiones (2D) y  $-1/2$  para puntos críticos en tres dimensiones (3D). Para transiciones excitónicas  $\mu$  toma el valor de 1.

### 2.3.1 Análisis en el Espacio Directo.

Para la transición  $E_1$  consideraremos este punto crítico para cada uno de los dos caracteres: electrónico o excitónico. Para nuestro trabajo nos basamos únicamente en la forma de línea excitónica dada por:

$$\varepsilon = C e^{i\beta} (E - E_g + i\Gamma)^{-1} \quad (2.15)$$

Con un ángulo  $\beta$  de fase cercano a cero. El ángulo de fase  $\beta$  es usualmente interpretado como un parámetro de acoplamiento entre la excitación excitónica con un traslapamiento continuo de transiciones interbanda [15]. Por otra parte la forma de línea para transiciones de tipo electrónica (2D) está dado por:

$$\varepsilon = C e^{i\beta} \ln(E - E_g + i\Gamma) \quad (2.16)$$

El ángulo de fase  $\beta$  en la Ec. (2.16) también describe la transformación de la forma de línea para puros puntos críticos 2D debidos a efectos excitónicos [15]. La transformación excitónica incrementa el valor de  $\beta$  [15, 16, 19, 20]. Nótese que la forma de línea de tipo 2D dada por la Ec. (2.16) puede ser obtenido integrando la Ec. (2.15) con respecto a la energía.

### 2.3.2 Análisis en el Espacio Inverso

Como se ha estado viendo el valor de  $\beta$  en la forma de línea analítica de la función dieléctrica es muy ambiguo, por lo que genera mucha incertidumbre ya que es el parámetro de acoplamiento que le da forma al ajuste de la función dieléctrica por lo que el encontrar un mecanismo por el cual permita expresar la dependencia de  $\beta$  es indispensable para tener una certeza sobre su valor y sobre todo su significado físico. Por lo que se propone expandir una función que en este caso estaría representada como la forma de línea tanto del espectro experimental como el obtenido teóricamente para calcular los coeficientes de Fourier por medio de su transformada inversa y realizar el análisis en el espacio inverso (o recíproco).

Por lo que si consideramos que un espectro óptico que consta de

N puntos de  $f_1, f_2, \dots, f_M$  igualmente espaciados desde la energía de  $E_i$  a  $E_f$ , y con una periodicidad tal que  $f_J = f_{J+M}$ . Para simplificar, se toma M como un número par. Entonces, la  $F_J$ 's puede ser representada por series de Fourier [21, 22, 31-33] como:

$$f(\theta) = A_0 + \text{Re}\left(\sum_{m=1}^{M/2} C_m e^{-i\xi_m} e^{in\theta}\right) \quad (2.17)$$

donde  $\theta$  y  $E$  están relacionadas por:

$$\theta = \frac{E-E_i}{\Delta E} \quad (2.18)$$

y el factor  $\Delta E$  esta dado por:

$$\Delta E = \frac{(E_M - E_i)M}{(M-1)2\pi} \quad (2.19)$$

donde M,  $E_i$  y  $E_M$  son el número de puntos espectrales, la energía más alta y más baja del espectro. El valor de  $\Delta E$  es determinado para cada semiconductor desde el rango de energía del espectro medido. El espectro experimental está compuesto por puntos M medidos desde la energía  $E_i$  a la energía  $E_M$ .

Asumiendo que la forma de línea de la estructura óptica en  $\epsilon$  debido a la transición asociada a un punto crítico en energía  $\Delta E$  es descrito en el espacio real por una Lorenziana (Ec. (2.14)) [31].

Para la forma de línea (Ec. (2.14)) y sus  $\kappa$ -ésimas derivadas los coeficientes de Fourier están dados por [31]

$$C_n = \frac{C_{n^{\mu+\kappa-1}} e^{-n\delta}}{E_s^{\mu-\kappa} \Gamma(\mu)} \quad (2.20)$$

$$\xi_n = \frac{-(\mu-\kappa)\pi}{2} - \beta + n\theta_g \quad (2.21)$$

donde  $\delta = \Gamma/\Delta E$ ,  $\theta_g = (E_g - E_i)/\Delta E$  y  $\Gamma(\mu)$  es la función gamma.

En el formalismo del espacio recíproco la información sobre el carácter y el ruido blanco de los espectros es separado en los coeficientes altos y bajos de Fourier respectivamente. Para la forma de línea Lorentziana de la Ec. (2.14), la amplitud  $C_n$  y la fase  $\xi_n$  de los coeficientes de Fourier de las Ec (2.20) y (2.21) se pueden representar como [21-23]

$$\ln C_n = \ln \frac{C}{\Delta E^{\mu+\kappa} \Gamma(\mu)} - \frac{n\Gamma}{\Delta E} + (\mu + \kappa - 1) \ln n, \quad (2.22)$$

$$\xi_n = -(\mu - \kappa) \frac{\pi}{2} - \beta + n(E_g - E_i)/\Delta E, \quad (2.23)$$

donde  $n$  es el índice de los coeficientes de Fourier, el factor  $\mu$  es el orden de la singularidad,  $\kappa$  es el orden de la diferenciación,  $\Gamma(\mu)$

es la función gamma. Donde la amplitud de los coeficientes en la Ec. (2.22) no depende de la fase  $\beta$  de la transición el cual aparece solo en la Ec. (2.23). Para transiciones excitónicas tenemos  $\mu = 1$  y la Ec. (2.22) se puede escribir como:

$$\ln C_n = \ln \frac{C}{\Delta E^{1+\kappa}\Gamma(1)} - \frac{n\Gamma}{\Delta E} + \kappa \ln n. \quad (2.24)$$

La ecuación (2.24) da una dependencia lineal sobre  $n$  para el espectro no diferenciado ( $\kappa=0$ ) entonces  $\Gamma$  es proporcional a la pendiente de una línea recta. Para una transición 2D tenemos  $\mu = 0$  y la Ec. (2.22) puede ser escrita como:

$$\ln C_n = \ln \frac{C}{\Delta E^\kappa \Gamma(0)} - \frac{n\Gamma}{\Delta E} + (\kappa - 1) \ln n, \quad (2.25)$$

La ecuación (2.25) da una dependencia lineal sobre  $n$  para la primera derivada con respecto a la energía del espectro ( $\kappa = 1$ ) y  $\Gamma$  es proporcional a la pendiente de una línea. Los componentes logarítmicos en las Ec. (2.24) y (2.25) se hacen más importantes cuando el espectro es diferenciado varias veces. Las ecuaciones (2.22) y (2.23) se obtuvieron para solo un punto crítico. Los coeficientes de Fourier para la superposición de dos puntos críticos inducen oscilaciones en las Ec. (2.22) y (2.23) [22]. Los coeficientes calculados  $\ln C_n$  obtenidos de la ecuación (2.24) son comparados con los coeficientes de Fourier calculados de los datos experimentales.

# CAPITULO III

## Detalles experimentales

Los experimentos realizados en este presente trabajo fueron llevados a cabo en los laboratorios de Espectroscopias Ópticas y de Microscopia De Fuerza Atómica (MFA) del Instituto de Investigación en Comunicación Óptica (IICO) de la UASLP. Se realizaron experimentos de RD, tanto en muestras dopadas, como bajo una tensión uniaxial aplicada, como en muestras pulidas mecánicamente. A continuación se describe el equipo que se empleó en el presente trabajo.

### 3.1 Descripción del espectrómetro para la medición de Espectros de Reflectancia Diferencial [24]

El espectrómetro (Fig. 3.1) consta principalmente de una fuente de luz (lámpara de Xenón de 75 watts), luz que es direccionada por dos espejos, el primero sobre el que incide es plano y seguido de

un segundo que es cóncavo y dirigido hacia un polarizador (prisma Rochón) y posteriormente a un modulador fotoelástico (PEM-90 de 42 Khz. HINDS INSTRUMENTS. INC.) de silicio elemento acoplado mecánicamente a un transductor con el cual se le envían pulsos eléctricos a una frecuencia de 42 Khz. Estos pulsos eléctricos producen una deformación elástica unidireccional en el elemento, modificando el índice de refracción en la dirección del esfuerzo aplicado haciéndolo birrefringente, lo cual provoca un retraso de  $\pm\pi$  en la fase, de modo que la luz que emerge de este elemento oscila entre dos estados de polarización mutuamente perpendiculares, luego incide y se refleja en las muestras semiconductoras a estudiar con superficie especular.

Por lo cual la luz que refleja es mandada a un analizador, después nuevamente se direcciona por otros dos espejos (nuevamente el primero plano y el segundo cóncavo) hacia el monocromador (Spectra Pro 2500i, ACTION RESEARCH CORPORATION) donde añadido a este, está un fototubo que convierte la señal de luz a una señal eléctrica, señal que es detectada por un multímetro (KEITHLEY; 199 SYSTEM DMM/SCANNER) y dividida para que dos amplificadores sensibles a la fase la detecten y la amplifiquen. En el primero (Lock-in Amplifier, modelo 5210, EGEG; PRINCENTON APPLIED RESEARCH) está entonado a la frecuencia fundamental del modulador fotoelástico, que determina la parte

imaginaria de RD. Para detectar la parte real se emplea un segundo amplificador sensible a la fase (Lock-in Amplifier, SR530, Stanford Research System) analizando el segundo armónico del PEM, que sería el doble de la frecuencia fundamental con la que trabaja este PEM. El espectrómetro está controlado por una computadora (hp compaq d530 CMT) a través de una interface (GPIB-OSB-HS). Además agregando otros aditamentos, como un láser y un recortador de frecuencia óptica, nos permitiría medir no solo la técnica de RD, sino que también otra técnica como la Fotorreflectancia [12].

Por otra parte se repitió el experimento con un segundo espectrómetro [25] en el laboratorio de espectroscopia II con el fin de familiarizarse con las técnicas de Reflectancia Modulada (RM) [25], además de contrastar para hallar similitudes entre los espectros medidos de equipos diferentes. Debido a que los espectrómetros son diferentes, esa diferencia nos permite medir en el primer espectrómetro tanto la parte real del espectro como la parte imaginaria del mismo la señal de RD de la muestra, debido en gran medida al arreglo óptico que se emplea en este, como por ejemplo el acomodo y orden de los aparatos ópticos, el uso de un segundo polarizador y haciendo el análisis matemático total del sistema [24, 26]. A diferencia del segundo espectrómetro que al cual solo es posible medir la parte real del espectro, por lo descrito en la referencia [25].

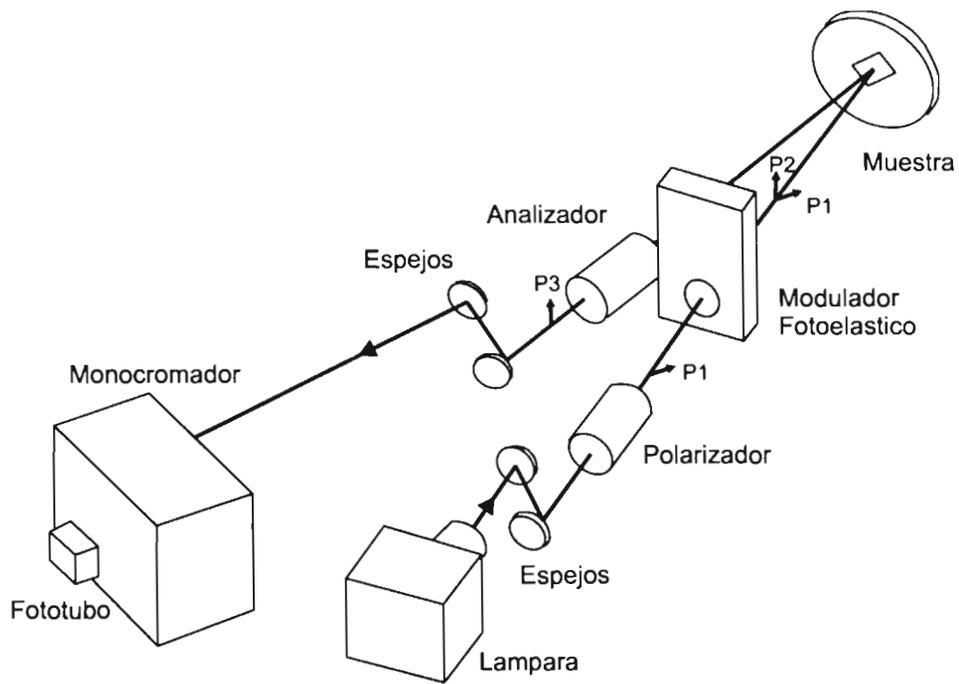


Figura 3.1: Espectrómetro empleado para las mediciones de RM.

### 3.2 Prensa para la aplicación de la tensión uniaxial externa

En la figura 3.2 se muestra a la prensa mecánica empleada cuyo diseño y fabricación se realizó en este instituto (IICO) para la aplicación de esfuerzos uniaxiales a muestras provenientes de obleas semiconductoras para su consecuente caracterización. Todas las muestras empleadas a las cuales se les aplicó un esfuerzo uniaxial están orientadas en la dirección [001]. Esta prensa consta principalmente de un tornillo de 40 hilos por pulgada, el cual trae adherido en la cabeza de este una calcomanía que le da función como transportador para así poder delimitar cuantos hilos por vuelta avanza el tornillo que va comprimiendo a un resorte que recorre una cierta distancia (si es menor a 1 mm se usa el transportador) determinada por un trozo de cinta graduada (usada para determinar la longitud que recorre el resorte) colocada a un costado del resorte, el cual (resorte) es contenido por dos placas metálicas de las cuales una es firme y la otra deslizante de tal manera que al irse comprimiendo va deslizándose una de las placas, la cual (placa) trae consigo una de las dos mordazas de aluminio (la otra mordaza colocada en una base junto a la placa fija) empleadas para transmitir la compresión al cristal, además de sujetar y mantenerla firme. Una vez aplicado el esfuerzo gracias a este dispositivo mecánico es importante saber

cuánto estrés recibe la muestra bajo estudio ya que ese valor sería de gran ayuda para comprender en buena medida la evolución de los espectros de RD para las muestras a medir como resultado de un esfuerzo externo. Para esto es necesario conocer la fuerza ejercida sobre el cristal y el área transversal. Para conocer la fuerza aplicada es necesario saber la constante de fuerza del resorte ( $k = 1.2 \times 10^8 \text{ dyn/cm}$ ) y la distancia que recorre el resorte al ser comprimido. El área transversal de la muestra que es la región en contacto con la mordaza de aluminio. El esfuerzo se calcula dividiendo la fuerza entre el área trasversal de la oblea. Las muestras fueron cortadas de obleas comerciales de aproximadamente  $3 \times 5 \text{ mm}$ . Con un espesor en promedio de  $300 \mu\text{m}$  para el GaP y  $250 \mu\text{m}$  para Si. Se manejaron diferentes niveles de concentración de dopaje de tipo n =  $2 \times 10^{16}$  y n =  $2 \times 10^{18}$  para GaP.

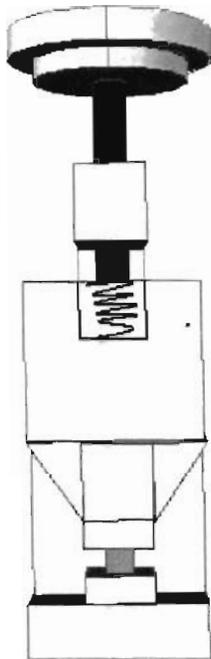


Figura 3.2: Prensa mecánica empleada para la aplicación de esfuerzos uniaxiales externos.

### 3.3 Pulido mecánico de muestras

El pulido mecánico se realizó con pasta METADI de diamante de  $1 \mu m$ . La pasta de diamante se esparció sobre tela de grado óptico y se mezcló con solvente METADI FLUID para conservar la consistencia pastosa y dejarla manejable y poder manipularla. Una vez realizada esta mezcla, se froto la superficie del cristal ejerciendo una ligera presión con unas pinzas enrolladas con la tela. Se utilizaron muestras orientadas en la cara (001) y el movimiento durante el pulido se realizó a lo largo de las direcciones  $[110]$  o  $[1\bar{1}0]$ . Este procedimiento genera defectos lineales orientados a lo largo de la dirección de pulido, los cuales inducen un campo de deformación. [27, 28] Con el objeto de caracterizar la superficie del cristal se realizaron mediciones de microscopia de tunelamiento como lo es la Microscopia de Fuerza Atómica (AFM).

# CAPITULO IV

## Resultados y Discusión

En este capítulo se muestran espectros de RD medidos para GaP (001), bajo diferentes condiciones de estrés tanto de volumen (esfuerzo uniaxial) como superficial (daño en la superficie). En el rango energético de 2.7 a 4.3 eV que comprenden las transiciones  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$  de dicho material.

También se midió Si (110) sin estresar ni perturbar al material y Si (001) pero solo bajo esfuerzo uniaxial, que a su vez se midieron para un rango energético que comprenden también a las transiciones  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$  de 3 a 4 eV.

En esta sección se muestran la comparación de los espectros experimentales contra los obtenidos desarrollados por un modelo de la forma de línea, así como su respectivo análisis en el espacio recíproco, descrito en el capítulo de la Teoría.

Asimismo en algunas figuras se observa que el modelo no sigue con precisión a los espectros experimentales para energías fuera de los puntos resonantes ( $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ ) por lo que nuestro modelo solo es local, por lo tanto estimamos que esta disconformidad esta vinculado con las contribuciones de otros puntos críticos presentes en el espectro de RD.

## 4.1 Reflectancia Diferencial en GaP (001)

### 4.1.1 GaP con esfuerzo uniaxial

En la figura 4.1 se muestran los espectros de RD para GaP (001) con una concentración de portadores  $n = 1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , mostrándose tanto la parte real como la imaginaria del espectro de RD medido con el equipo descrito en el capítulo III, sometidos (a) bajo esfuerzo uniaxial de magnitud  $X = -2.812 \times 10^8 \text{ dyn/cm}^2$ , (b) sin esfuerzo aplicado y (c) muestra el espectro obtenido al restarle la componente intrínseca (b) al espectro (a), con el objeto de aislar la componente electro óptica del espectro de RD. Nótese el cambio en la amplitud del espectro como resultado del esfuerzo aplicado, siendo más evidente el cambio de amplitud en la parte imaginaria, que en este caso es más sensible a este tipo de fuerza externa que implica cambios de bulto en el material que la parte real. La línea solida es el ajuste que se realizó con la deconvolución para las contribuciones a los puntos críticos  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$  por medio del ajuste de formas de línea Lorentzianas<sup>2</sup> a la parte real e imaginaria de la función dieléctrica medida experimentalmente [23].

En este ajuste se emplearon los siguientes parámetros:

---

<sup>2</sup>Estas formas de línea Lorentzianas pueden ser de dos tipos: 1.- Forma de línea excitónica Ec. (2.15). y 2.- Forma de línea para transición 2D Ec. (2.16).

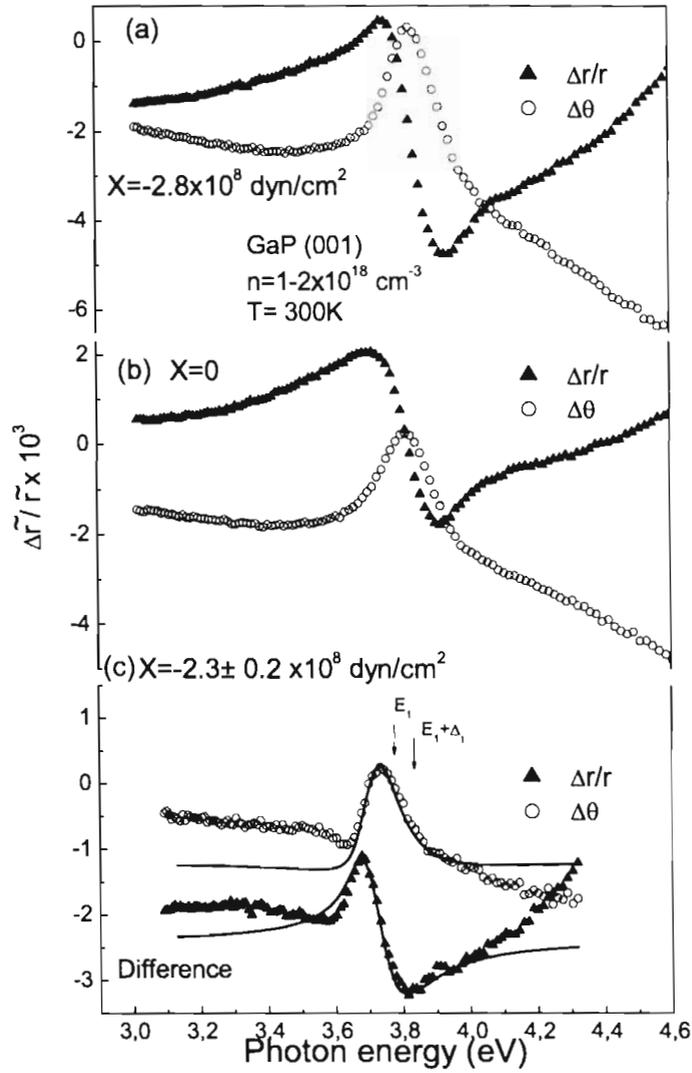


Figura 4.1: Espectros de RDS de GaP (001) a temperatura ambiente sometido a un esfuerzo uniaxial con magnitudes, (a)  $X = 0$ , (b)  $X = -2.812 \times 10^8 \text{ dyn/cm}^2$ , (c) obtenidos al restar el espectro tensado del espectro sin tensión. La línea continua corresponde al obtenido ajustando la Ec. (2.15).

$S_{11} = 0.972 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$ ,  $S_{12} = 0.298 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$  y  $S_{44} = 1.419 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{dyn}$ , para las constantes de complianza elásticas [29]. Para los potenciales de deformación se usaron  $D_1^1 = -15 \text{ eV}$ ,  $D_5^1 = 6.5 \text{ eV}$  y  $D_3^5 = -6.5 \text{ eV}$  [30]. La magnitud del esfuerzo aplicado también fue considerada como parámetro de ajuste obteniendo el valor  $X = -2.5 \times 10^9 \text{ dyn/cm}^2$  en buena concordancia con nuestro valor experimental.

Por otra parte la certeza de saber si la elección para la forma de línea Lorenziana<sup>3</sup> que se empleo en el ajuste para el contraste con la forma de línea experimental es la correcta y del valor de  $\beta$  en la Ec. (2.15), de tener un significado físico real, es emplear un mecanismo por el cual permita liberarse de la dependencia de  $\beta$ , con lo cual se propuso hacer un análisis en el espacio recíproco. En la figura 4.2 la grafica  $\ln C_n$  vs.  $n$  (índice del coeficiente de Fourier), muestra el contraste entre las formas de líneas experimentales tanto de la parte real como de la imaginaria con el de su respectivo ajuste pero ahora llevándolo todo al espacio recíproco. Donde es apreciable un buen acuerdo y una buena coincidencia entre las formas de línea, eso quiere decir que el empalme o el hecho de que converjan las líneas para un cierto rango de  $n$ , enfatiza la naturaleza excitónica de la transición. Por lo tanto este buen acople entre la forma

<sup>3</sup> De tipo excitónica Ec. (2.15) ya que para GaP a  $T = 300^\circ \text{ K}$  es dominante el carácter excitónico.

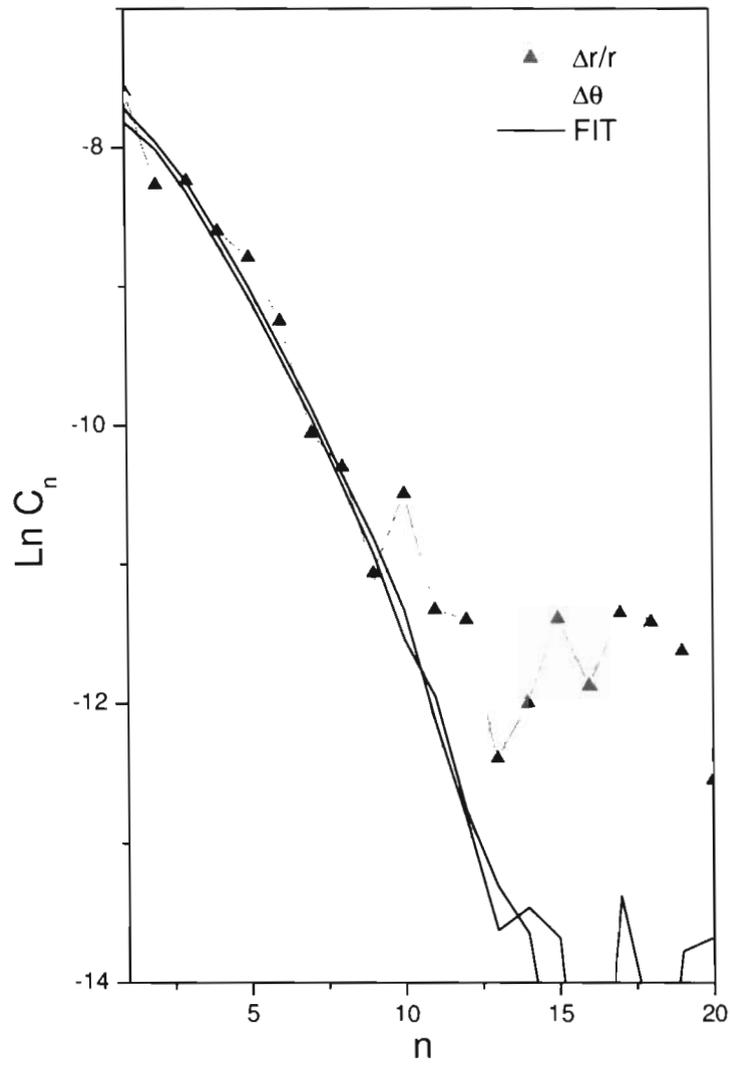


Figura 4.2: Coeficientes de Fourier calculados de la función dielectrica de GaP medido a temperatura ambiente. La linea solida es el ajuste, los triangulo y circulos corresponden a la parte real e imaginaria medidos experimentalmente. Con  $\Gamma = 125 \pm 0.005$

de línea del experimento y la del ajuste en el espacio recíproco da la seguridad de que el ajuste empleado para modelar el espectro experimental es el adecuado, además el valor de  $\beta = 0$  empleado comprueba que el efecto es de bulto.

#### 4.1.2 GaP (001) con diferentes concentraciones de portadores

En la figura 4.3 se muestran los espectros de RD para GaP (001) en el rango de 3 a 4.25 eV con dos diferentes concentraciones de portadores, (a) con  $n = 1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , (b) con  $n = 1.2 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  y (c) con el objetivo de aislar la componente electro óptica del espectro de RD se tomó la diferencia entre (a) y (b) contrastadas con su correspondiente ajuste.

Para calcular la forma de línea de RD se emplearon los mismos valores constantes para la complianza elástica y para los potenciales de deformación,  $\Delta_1 = 0.08 \text{ eV}$  para la energía de rompimiento spin órbita y  $d_{14} = 2.3 \times 10^{-10} \text{ cm/V}$  para el módulo piezoeléctrico [30]. Además se estimó un valor de campo eléctrico superficial de  $-3.2 \times 10^5 \text{ V/cm}$ . Nótese que existe un buen acuerdo entre los espectros de RD y nuestro ajuste. Además de un aumento en la amplitud al rededor de  $E_1$  con el aumento en el nivel de dopaje. De modo que estos resultados reflejan lo flexible que es la RD dentro de las

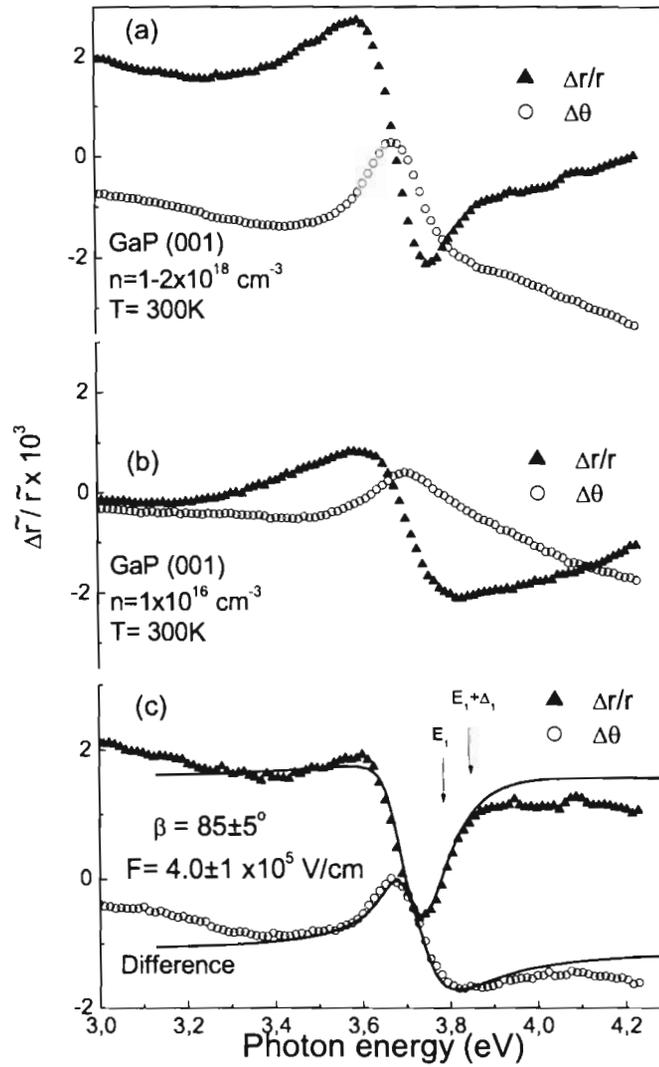


Figura 4.3: Espectro de Reflectancia Diferencial de GaP (001) a temperatura ambiente con concentraciones de (a)  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , (b)  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  y (c) diferencia entre (a) y (b), la linea solida representa el ajuste.

técnicas de RM. Ya que no sólo nos permite estudiar y determinar las propiedades electro ópticas sino que además nos permite medir las anisotropías que tienen su origen en la deformación superficial del cristal inducida por el campo eléctrico a través de un efecto piezo eléctrico [10]. De igual manera aplicando la misma analogía que para la muestra tensionada aunado a que en el caso del espacio directo, el espectro en 4.3 (c), es dependiente de  $\beta$ ,<sup>4</sup> la incertidumbre que provoca el valor de  $\beta$  nos lleva a pensar en otro análisis pero ahora en el espacio inverso, ya que este no depende de  $\beta$  con lo que nos da la certeza de saber si el valor de  $\beta$  tiene sentido físico; entonces eligiendo la forma de línea para materiales tipo excitónicos y con su posterior estudio en el espacio recíproco en la figura 4.4 se observa que las formas de línea experimentales no coinciden con las de sus respectivos ajustes, tienen caminos separados a diferencia de las de GaP con tensión. Además el hecho de que no concuerden desfavorece su naturaleza excitónica, lo que sugiere que la forma de línea del ajuste empleado en el espectro de la figura 4.3 (c) no es el adecuado aun y cuando la forma de línea se ajusta muy bien y que la fase  $\beta = 85 \pm 5^\circ$  utilizada en la Ec. (2.15) para el ajuste no tienen sustento ni justificación física o sea es un dato ficticio.

Con esto en mente se puede tener la certeza en que en algún mo-

---

<sup>4</sup>Ver Capítulo 2.3.1

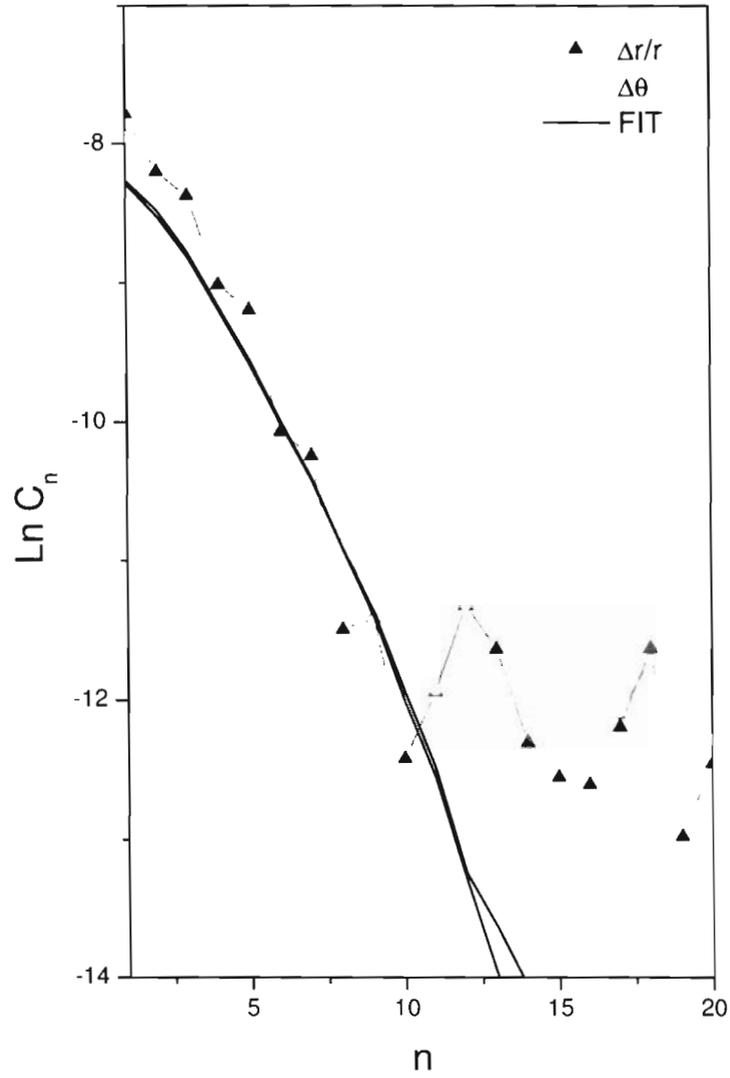


Figura 4.4: Coeficientes de Fourier calculados de la función dieléctrica de GaP medodo a  $T = 300$  K. La línea solida es el ajuste, los triangulo y circulos corresponden a la parte real e imaginaria medidos experimentalmente.

mento la condición excitónica característica del material se pierde, probablemente debido a la presencia del campo eléctrico, mecanismo por el cual hace que el exciton se rompa, haciendo ahora que en el material domine el carácter de tipo electrónico.

#### 4.1.3 GaP (001) con daño superficial

Otra manera de agregarle anisotropías a la señal de RD proveniente de la muestra es dañándola superficialmente. En este caso se limó ligeramente la superficie de la muestra empleando una pasta de Diamante de tamaño por grano de  $1 \mu m$ , empleada para hacer rugosa la superficie. Posteriormente se caracterizó la superficie de la muestra por medio de la microscopía de tunelamiento (MFA) con el fin de medir la profundidad de la rugosidad.

En la figura 4.5 se muestra una imagen obtenida del equipo (MFA) en donde se puede ver una serie de franjas y claramente un par de ellas en la región de la muestra más afectada, además se aprecia la profundidad del daño que fue de  $17.077 \text{ nm}$ , ocasionado como resultado de tallar la superficie de la muestra. En la figura 4.6 se observa a la misma muestra rotada  $45^\circ$  con respecto a la figura anterior, en la cual se le midió la rugosidad promedio que fue de  $0.593 \text{ nm}$ , en un área superficial de  $212.57 \mu m^2$ . En la figura 4.7 se muestran los espectros de RD para GaP (001), con una con-

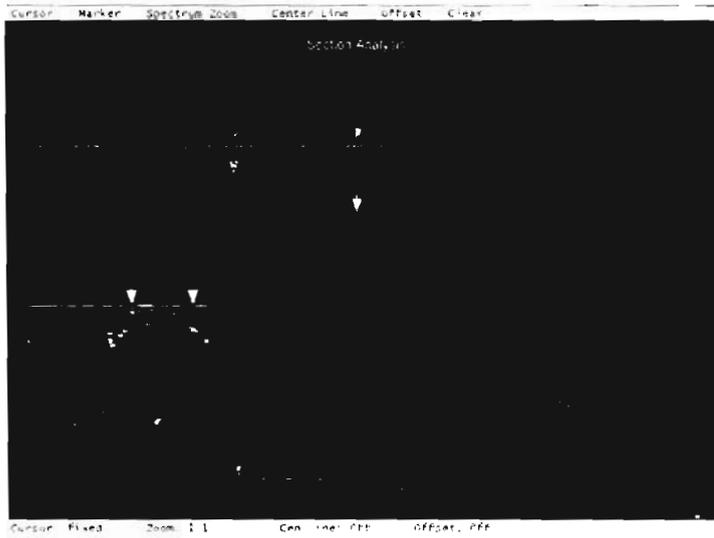


Figura 4.5: Imagen obtenida del equipo (MFA) para GaP (001) tallado superficialmente.

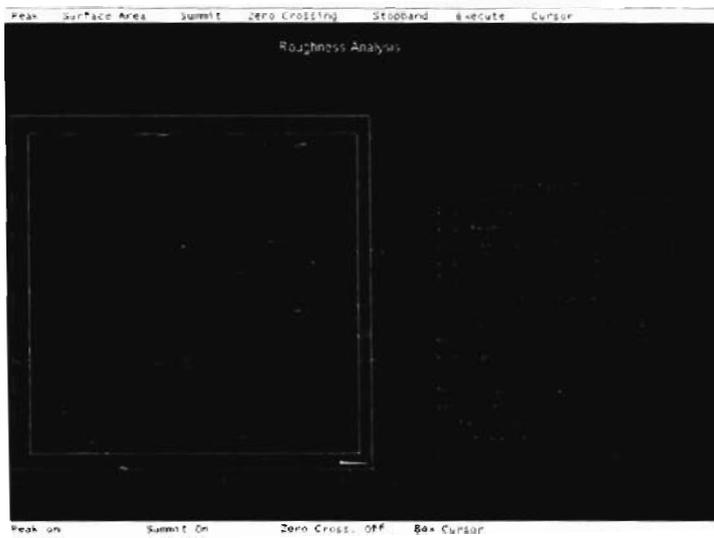


Figura 4.6: Imagen obtenida del equipo (MFA) tomada a  $45^\circ$  para GaP (001) tallado superficialmente.

centración de dopaje de  $n = 1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ , medido a temperatura ambiente (300 K), (a) con daño aplicado en la superficie, (b) sin daño superficial y (c) con la diferencia entre ambas contrastadas con las del ajuste. Para calcular la forma de línea de RD se emplearon los mismos valores constantes para la complianza elástica y para los potenciales de deformación, con  $\Delta_1 = 0.08 \text{ eV}$  y  $X = -1.7 \times 10^8 \text{ dyn/cm}^2$ . Nótese que existe un buen acuerdo entre los espectros de RD y nuestro ajuste especialmente para el punto crítico de interés  $E_1$ , además de un cambio suave pero pronunciado después de habersele infligido un daño en la superficie, tanto para la parte real como en la imaginaria.

En la figura 4.8 se muestra el grafico de  $\ln C_n$  vs.  $n$ , donde nuevamente aplicando el mismo criterio que en los casos anteriores, empleando la misma forma de línea para materiales con transición excitónica, resulta que podemos modelar muy bien nuestra forma de línea teórica ya que su respectivo análisis en el espacio recíproco muestra que las líneas poseen pendientes muy semejantes, lo cual sugiere que sigue manteniendo su carácter excitónico a pesar de haber perturbado al material, dañándolo superficialmente a diferencia del material con campo eléctrico, por lo que da certeza de que la forma de línea teórica es la indicada, por lo tanto la fase  $\beta = 45 \pm 5^\circ$  empleada en la Ec. (2.15) para el ajuste es un valor justificable, considerando el hecho de que la profundidad del daño

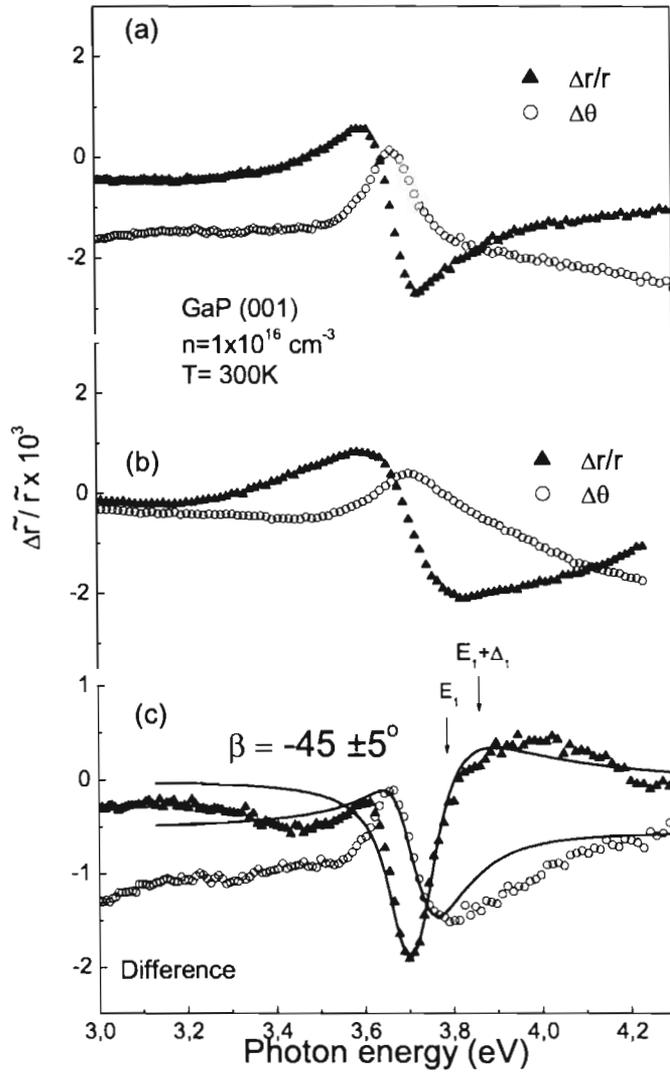


Figura 4.7: Espectro de RD para GaP (001) a temperatura ambiente, (a) tallada, (b) sin tallar y (c) diferencia entre tallada y sin tallar, la línea sólida representa el ajuste.

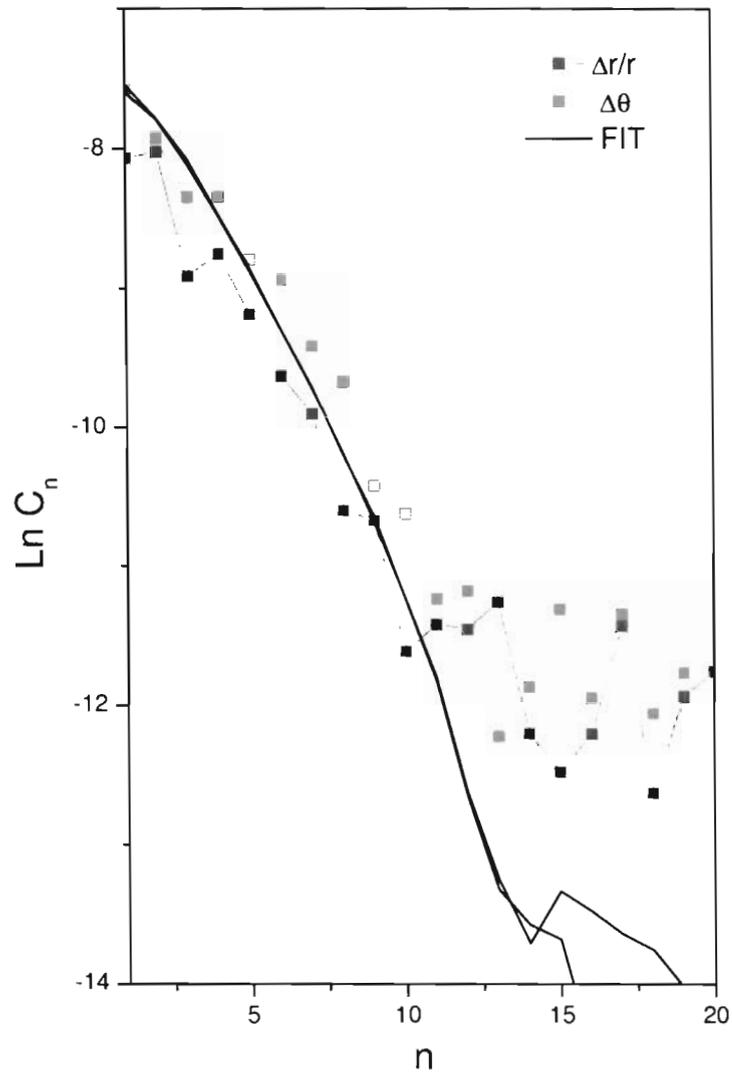


Figura 4.8: Coeficientes de Fourier obtenidos apartir de la funcien dieléctrica del material, medido a  $T = 300$  K. La linea solida es el mejor ajuste que se obtuvo.

es menor que la profundidad de la luz. Lo que sugiere que el efecto causado se encuentra entre el límite de bulto y la superficie.

## 4.2 Reflectancia Diferencial en Si (110) y Si (001)

### 4.2.1 Silicio (110)

En la figura 4.9 se muestra los espectros de medición (parte real e imaginaria) para Silicio (110), (a) espectro de RD (parte real e imaginaria) sin dopaje y sin perturbar al material, medido a temperatura ambiente, (b) espectro obtenido a partir de la medición de RD para calcular la anisotropía en la función dieléctrica para la cara de Silicio (110), (c) espectro de medición experimental de la función dieléctrica para ambas partes: real e imaginaria [23]. En la figura 4.10 se presenta la dependencia de  $\ln C_n$  sobre  $n$  en el espacio de Fourier para la parte real e imaginaria de la función dieléctrica. El carácter excitónico del Si es evidente en donde se obtiene una dependencia lineal de  $\ln C_n$  sobre  $n$ . La línea punteada representa el mejor ajuste usando la forma de línea de tipo excitónica Ec. (2.15). El comportamiento lineal indica que a temperatura ambiente, en la transición  $E_1$  es dominante el com-

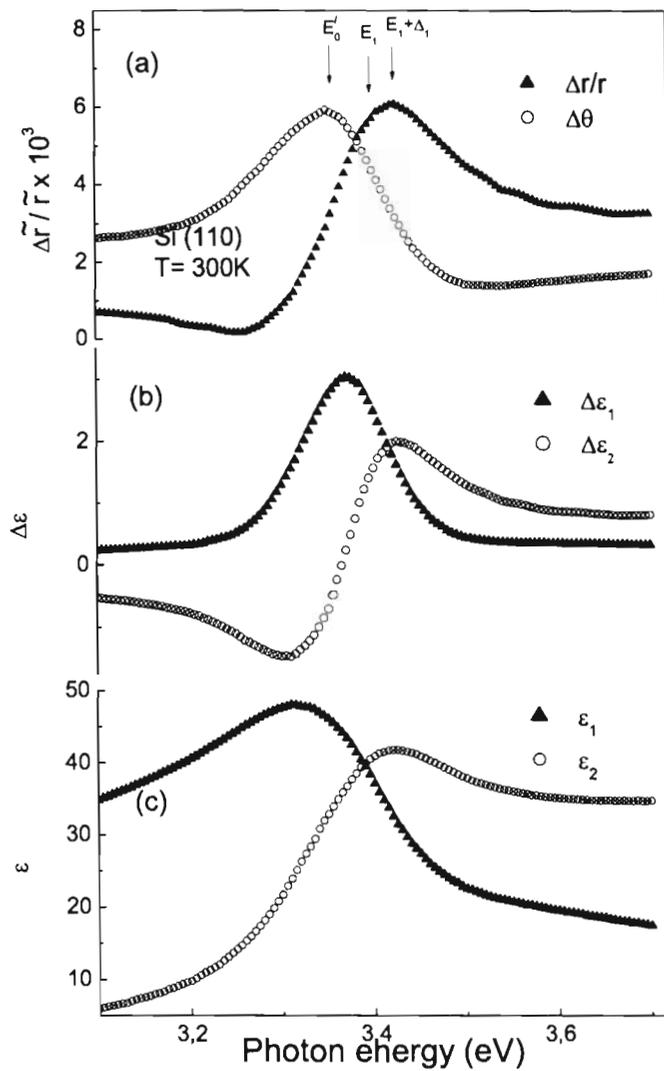


Figura 4.9: (a) Espectro de RD para Silicio (110) a  $T = 300$  K, (b) espectro sacado apartir de la medición de RD para la obtención de  $\Delta\epsilon$  y (c) espectro de la función dieléctrica.

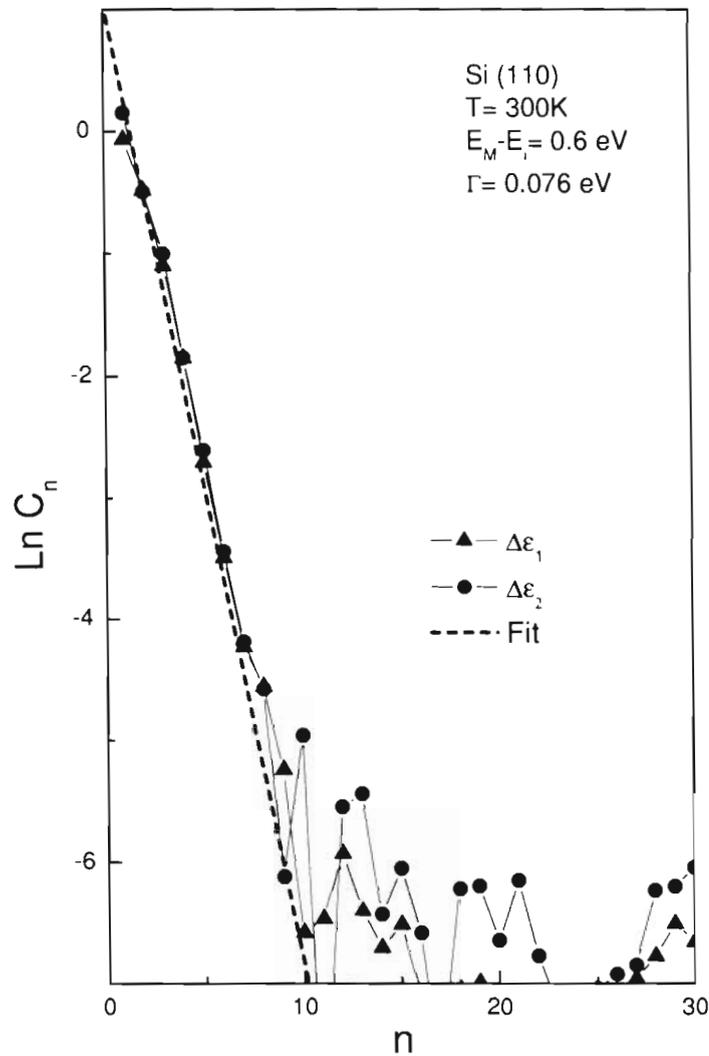


Figura 4.10: Coeficientes de Fourier obtenidos apartir de la función dieléctrica del material, medido a  $T = 300 \text{ K}$ . La línea solida es el ajuste obtenido apartir de la ecuación (2.20),  $\Gamma = 0.076 \text{ eV}$  y  $\kappa = 0$ .

portamiento excitónico. En la figura 4.11 se muestra el contraste de la forma de línea obtenida experimentalmente tanto para la parte real (triángulos) como imaginaria (círculos) con la forma de línea teórica (línea continua), que de igual forma se realizó por medio del ajuste de formas de línea Lorentzianas a la parte real e imaginaria de la función dieléctrica medida experimentalmente [23], tomando un valor de fase  $\beta = -30^\circ$  empleada en la Ec. (2.15) para el ajuste. Nótese el buen acuerdo que persiste entre la forma de línea experimental y nuestro ajuste al rededor del punto crítico  $E_1$ , con lo que se puede deducir que  $\Delta\varepsilon \propto \varepsilon$ .

#### 4.2.2 Silicio (001)

En la figura 4.12 tenemos al espectro de RD del Silicio (001) con dos diferentes magnitudes de esfuerzo uniaxial primero con  $X = 1.5 \times 10^9 \text{ dyn/cm}^2$  y luego con  $X = 0$ , ambas mediciones hechas a temperatura ambiente, para un rango espectral de 2.74 a 4.5 eV. Nótese el cambio drástico en el espectro de RD cuando se pasa de un estado  $X = 0$  en donde prácticamente no hay señal de anisotropía ha uno con  $X \neq 0$  como resultado de una fuerza externa actuando en un Área =  $0.01 \text{ cm}^2$  sobre el material, debido a eso fue posible resolver las transiciones de puntos críticos como  $E'_0$ ,  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ , por lo que al realizar el ajuste al espectro experimental se tomó como

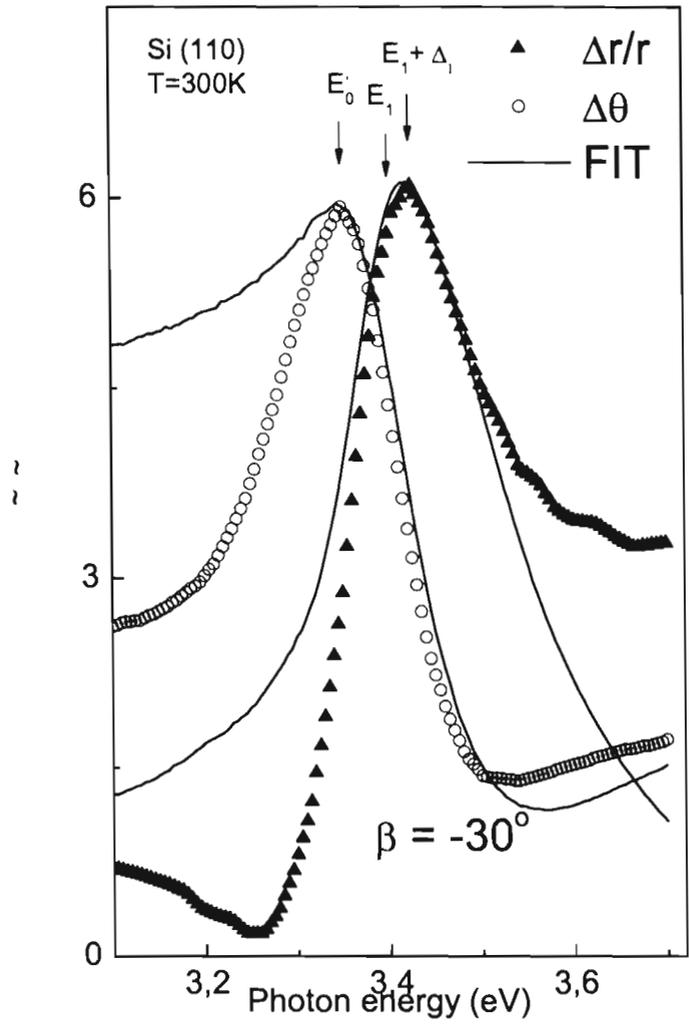


Figura 4.11: Espectro de RD para Silicio (110) a  $T = 300$  K, parte real e imaginaria en contraste con la forma de línea teórica.

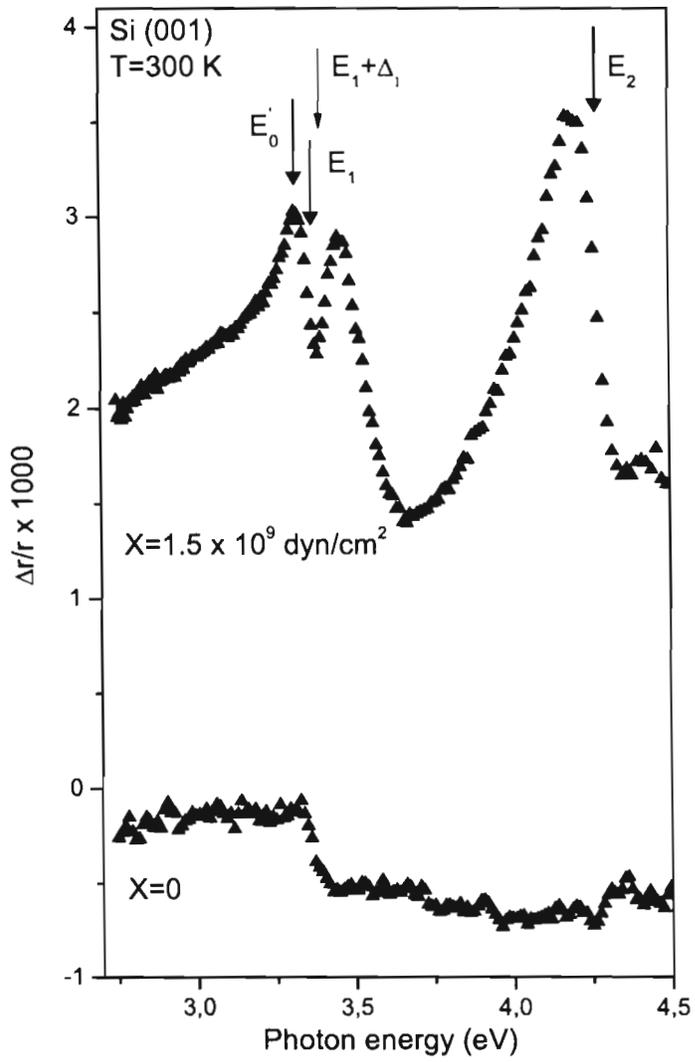


Figura 4.12: Espectro de RD para Si (001), medido a  $T = 300 \text{ K}$ , con  $X = 1.5 \times 10^9 \text{ dyn/cm}^2$  y  $X = 0$ .

base esos puntos críticos o sea se empleo una Lorenziana centrada para cada punto crítico. Cabe mencionar que el punto  $E_0'$  esta doblemente degenerado en energía ya que están presentes puntos críticos como  $E_0' + \Delta_0'$  y  $E_0' + \Delta_0' + \Delta_0$ . En la figura 4.13 tenemos el espectro de RD surgido de la diferencia de los espectros de la figura 4.12 y en contraste con la forma de línea teórica. En este ajuste se emplearon los siguientes parametros:  $S_{11} = 0.766 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{ dyn}$ ,  $S_{12} = 0.213 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{ dyn}$  y  $S_{44} = 1.255 \times 10^{-12} \text{ cm}^2/\text{ dyn}$ , para las constantes de complianza elásticas [29]. Para los potenciales de deformación se usaron  $D_1^1 = -9.720 \text{ eV}$ ,  $D_5^1 = -5.04 \text{ eV}$  y  $D_3^5 = 7.83 \text{ eV}$  [30],  $\Delta_1 = 0.045 \text{ eV}$  para la energia de rompimiento spin órbita. La magnitud del esfuerzo aplicado también fue considerada como parametro de ajuste obteniendo el valor  $X = 0.7 \times 10^9 \text{ dyn/cm}^2$  en buena concordancia con nuestro valor experimental. Nótese la buena afinidad entre las forma de líneas teorica y experimental al rededor de los puntos criticos  $E_0'$ ,  $E_1$  y  $E_1 + \Delta_1$ .

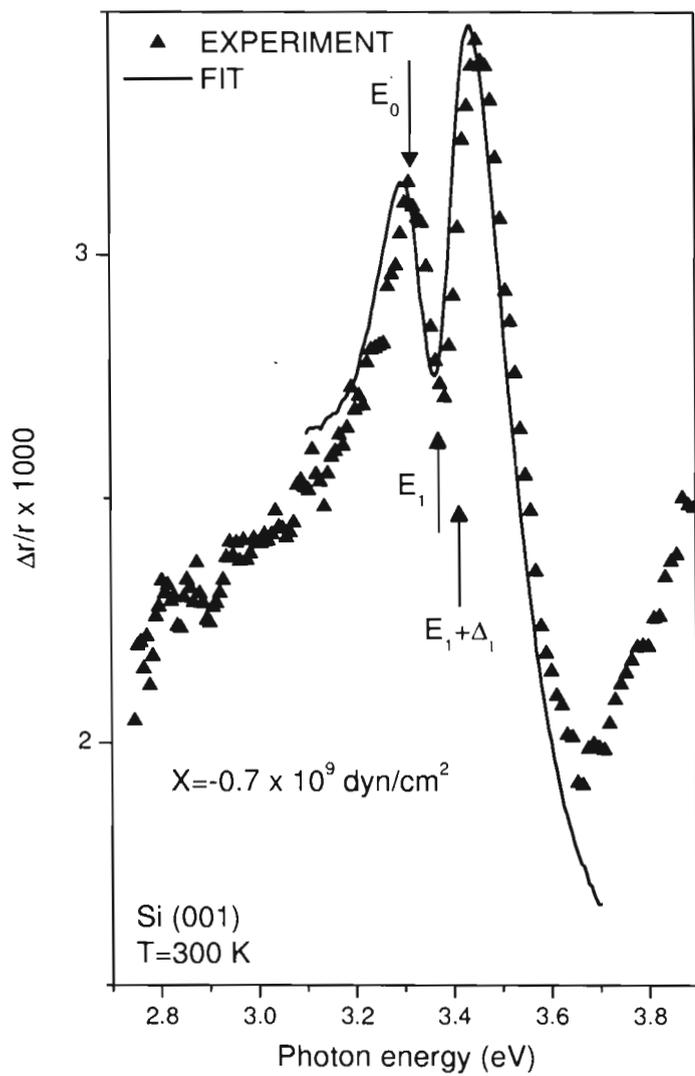


Figura 4.13: Espectro de RD para Si (001), medido a  $T = 300 \text{ K}$ , con un buen acuerdo de  $X = 1.5 \times 10^9 \text{ dyn/cm}^2$  para el valor experimental y con  $X = 0.7 \times 10^9 \text{ dyn/cm}^2$  para el calculado a partir del ajuste.

# CAPITULO V

## Conclusiones:

\*Se midieron espectros de RD para Si y GaP en diferentes condiciones experimentales.

\*En el caso de GaP se demostró utilizando el formalismo en el espacio recíproco en qué casos la anisotropía proviene del bulto o de la superficie.

\*En el caso de la anisotropía producida por el campo eléctrico se demostró que la forma de línea utilizada no es la correcta, mas trabajo debe ser realizado para el entendimiento de los espectros.

\*Se demostró en el caso de Si (110) que la forma de línea dominante es proporcional a  $\varepsilon$ .

\*Para los espectros de Si (001), utilizando el espacio real se pudo aislar tanto la componente  $E_0'$  y la  $E_1$ .

\*Lo anterior nos demuestra la gran sensibilidad de las técnicas de RM en procesos tanto superficiales como de bulto así mismo se demuestra el gran potencial que el análisis en el espacio inverso tiene en espectros de RD.

\* Creemos que el trabajo realizado en este trabajo de tesis será de gran utilidad en el desarrollo de las técnicas de RM como sondas ópticas de caracterización.

## Bibliografía:

- [1] D. E. Aspnes and A. A. Studna, Phys. Rev. Lett. 54, 1956 (1985).
- [2] A. Lastras-Martínez, R.E. Balderas-Navarro, L.F. Lastras-Martínez, Thin Solid Films 373 207 (2000).
- [3] L. F. Lastras-Martínez, R. E. Balderas-Navarro, M. Chavira-Rodríguez, J. M. Flores-Camacho and A. Lastras-Martínez, phys. stat. sol. (b) 240, 500 (2003).
- [4] D. E. Aspnes, Phys. Rev. B 41, 10334 (1990).
- [5] L. F. Lastras-Martínez, J. M. Flores-Camacho, R. E. Balderas-Navarro, M. Chavira-Rodríguez, and A. Lastras-Martínez, Phys. Rev. B 75, 235315 (2007).
- [6] L.F. Lastras-Martínez, R. Castro-García, R.E. Balderas-Navarro and A. Lastras-Martínez, Proc. of SPIE Vol. 6422, 64221C, (2007).
- [7] D. E. Aspnes, en Handbook on Semiconductors, editado por M. Balkanski (North-Holland, Amsterdam, 1980), Vol. 2, p. 121.
- [8] D. E. Aspnes and A. Frova, Solid State Commun. 7, 155 (1969).
- [9] U. Rossow, L. Mantese, and D. E. Aspnes, Appl. Surf. Sci. 123/124, 237 (1998).
- [10] L. F. Lastras-Martínez, M. Chavira-Rodríguez, A. Lastras-

Martínez, and R. E. Balderas-Navarro, Phys. Rev. B 66 075315 (2002).

[11] F. H. Pollak and M. Cardona, Phys. Rev. 172, 816 (1968).

[12] A. Lastras-Martínez, R. E. Balderas-Navarro, L. F. Lastras-Martínez, and M. A. Vidal, Phys. Rev. B 59, 10234 (1999).

[13] See, e.g., Peter Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors (Springer-Verlag, Berlin, (1996), p. 256.

[14] P. Y. Yu and M. Cardona, Fundamentals of Semiconductors (Springer, 1996).

[15] P. Lautenschlager, M. Garriga, S. Logothetidis, and M. Cardona, "Interband critical points of GaAs and their temperature dependence," Phys. Rev. B 35, 9174–9189 (1987).

[16] M. Cardona, Modulation Spectroscopy (Academic, 1969).

[17] D. E. Aspnes, "Modulation spectroscopy/electric field effects on the dielectric function of semiconductors," Handbook on Semiconductors, M. Balkanski ed. (North-Holland, 1980), Vol. 2, pp. 109–179.

[18] A. B. Djuricic, Y. Chan, E. H. Li, "Progress in the room temperature optical functions of semiconductors," Mater. Sci. Eng. R. 38, 237–293 (2002).

[19] J. E. Rowe and D. E. Aspnes, "Approximate treatment of exciton effects in electric field modulation via the Slater–Koster interaction," Phys. Rev. Lett. 25, 162–165 (1970).

[20] B. Velický and J. Sak, "Excitonic effects in the interband absorption of semiconductors," *Phys. Status Solidi B* 16, 147–157 (1966).

[21] S. D. Yoo and D. E. Aspnes, "Elimination of endpoint-discontinuity artifacts in the analysis of spectra in reciprocal space," *J. Appl. Phys.* 89, 8183–8192 (2001).

[22] D. E. Aspnes, "Fourier critical-point analysis-extension to Gaussian lineshapes," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 32, 413–419 (1994).

[23] L. F. Lastras-Martínez, R. E. Balderas-Navarro, J. Ortega-Gallegos, A. Lastras-Martínez, J. M. Flores-Camacho, and K. Hingerl, *J. Opt. Soc. Am. B* 26, No. 4 (2009).

[24] M. O. Villalobos Aguilar. Tesis de Maestría (2009).

[25] M. Chavira-Rodríguez. Tesis de Doctorado. (2004).

[26] Antonio Salvati and P. Chiaradia, *Applied Optics/ Vol. 39. No. 31* (2000).

[27] L.F. Lastras-Martínez and A. Lastras-Martínez, *Solid State Communications* 98, 479 (1996).

[28] L.F. Lastras-Martínez and A. Lastras-Martínez, *Phys. Rev. B* 54, 10726 (1996).

[29] *Elements and III-V Compounds*, edited by O. Mandelung, M. Schultz, and H. Weiss, *Landolt-Bornstein, New Series*, Vol. III (1982).

- [30] Sadao Adachi, *J. Applied Phys.* 58, R1 (1985).
- [31] D. E. Aspnes, *Surface Sci.* 135, 284 (1983).
- [32] D. E. Aspnes, and H. Arwin, *J. Opt. Soc. Am.* 73, 1759 (1983).
- [33] L. F. Lastras-Martínez, M. Cardona, *Superficies y Vacío* 18(4), 7-12, diciembre de 2005.