



INSTITUTO DE INVESTIGACION
EN ÓPTICA



INSTITUTO DE FÍSICA
"Manuel Sandoval Vallarta"

**DEPENDENCIA CON LA TEMPERATURA DEL PUNTO
CRÍTICO E_1 DE LA ALEACIÓN $(\text{GaAs})_{(1-X)}(\text{Si}_2)_X$ PARA
DIFERENTES CONCENTRACIONES DE Si.**

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**MAESTRO EN CIENCIAS
(FÍSICA)**

PRESENTA

PORFIRIO D. ROSENDO FRANCISCO

FACULTAD DE CIENCIAS

INSTITUTO DE FÍSICA

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ

NOVIEMBRE DE 1994.

A mis Padres y Hermanos por su
confianza y apoyo incondicional.

A Rebe por todo el cariño, amor
y apoyo que me ha brindado.

Y... a todos aquellos que hicieron
posible su realización.

Agradezco al Dr. Hugo Navarro Contreras por la dirección de este trabajo, al M. en C. Gustavo Flores Ramírez por su valiosa ayuda brindada en la parte experimental, así mismo al Dr. Alfonso Lastras Martínez por sus comentarios y sugerencias.

De forma especial doy gracias al Dr. Alfonso y al Dr. Hugo por haberme brindado la oportunidad de realizar mi tesis en las instalaciones del Instituto de Investigación en Comunicaciones Ópticas IICO-UASLP, y a todo su personal académico y administrativo por su cooperación.

La realización de este proyecto de investigación fue gracias al apoyo económico brindado por la Dirección Adjunta de Formación de Recursos Humanos del CONACYT, a través del programa de apoyo al postgrado. Parte de los costos de operación del sistema experimental se financiaron a través del proyecto CONACYT 2107-E9303, del FOMES 93 y del Fondo de Apoyo a la Investigación FAI-UASLP.

RESUMEN

Desde hace varios años atrás se han sintetizado aleaciones ternarias (semiconductores) con elementos del grupo III, IV y V. Uno de ellos es el $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ el cual tiene una gran importancia tecnológicamente hablando ya que puede ser utilizado, por ejemplo, como barrera en láseres de pozo cuántico.

En este trabajo de tesis se encuentra la dependencia con la temperatura (de 10 hasta 300 °K) de los puntos críticos E_1 y $E_1+\Delta_1$ del compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ para diferentes valores de x , mediante las técnicas de electrorreflectancia modulada y fotorreflectancia modulada.

Los espectros obtenidos experimentalmente se ajustaron mediante una expresión para la energía (obtenida con ayuda de la función dieléctrica compleja) y se compara el resultado experimental obtenido con el que genera la ecuación de Varshni (teórico).

Se reportan por primera vez (dentro de la literatura especializada) las ecuaciones que dan el comportamiento funcional de E_1 y $E_1+\Delta_1$ con respecto a la temperatura para cada valor de x (0, 0.01, 0.04 y 0.27) de acuerdo a las muestras utilizadas.

ÍNDICE GENERAL

INTRODUCCIÓN.....	1
<u>PARTE I- TEORÍA</u>	
CAPITULO I- EL ARSENIURO DE GALIO Y EL SILICIO	
1.1- Semiconductor GaAs y Si	4
1.2- Compuesto ternario $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$	8
CAPITULO II- ESPECTROSCOPIA DE MODULACIÓN	
2.1- Generalidades y técnicas de modulación.	10
2.2- La función dieléctrica compleja.	14
2.3- Puntos críticos.	17
2.4- El modelo de aproximación parabólico simple.	18
2.5- Determinación de los parámetros de un punto crítico.	20
2.6- Espectro óptico de tercera derivada (límite de campo bajo).	21
<u>PARTE II- PARTE EXPERIMENTAL</u>	
CAPITULO III- EXPERIMENTO	
3.1- Fotorreflectancia y electrorreflectancia modulada.	24
3.2- Arreglo experimental.	25
CAPITULO IV- RESULTADOS	
4.1- Espectros	
4.1.1- Energía vs $\Delta R/R$ por muestra en función de T.....	29
4.1.2- Energía vs $\Delta R/R$ para los diferentes valores de X a una determinada T.	33
4.1.3- Transición de la energía E_1 y $E_1 + \Delta_1$ en función de la temperatura.	36
4.2- Análisis de resultados.	38
4.3- Conclusiones.	44
REFERENCIAS.	46

INTRODUCCIÓN

En la actualidad existe un gran interés por sintetizar materiales semiconductores a los cuales se les pueda predeterminar el ancho de la banda prohibida con toda precisión, cubriendo los rangos espectrales desde el infrarrojo medio al UV, pasando por el visible. Como caso particular varios grupos han sintetizado aleaciones de $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$, con la esperanza de cubrir con éstas la región espectral de 1.12 eV (para el Si) a 1.42 eV (para el GaAs).

Para determinar algunas de las propiedades ópticas de los materiales semiconductores se han implementado diferentes técnicas en la espectroscopia óptica. Una de ellas es la espectroscopia de modulación, con la cual se puede medir e interpretar de forma eficaz cambios en el espectro óptico originados por alguna modificación hecha a propósito en las condiciones de medición, las cuales se pueden provocar de forma directa ó indirecta según sea el caso.

En este trabajo se hace uso de las técnicas de fotorreflectancia y electrorreflectancia modulada aplicada al compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ a diferentes concentraciones de Si, con el fin de estudiar la dependencia con la temperatura del punto crítico E_1 y $E_1 + \Delta_1$ de dicha aleación en el rango de temperatura de 10 a 300 grados Kelvin.

El GaAs es un material semiconductor muy importante, tecnológicamente hablando, así como lo es el Si. Por otro lado el $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ es un compuesto semiconductor que puede ser utilizado, por ejemplo como barrera de potencial en láseres de pozo cuántico o emisores de luz de altas energías, de ahí el gran interés por tener caracterizado dicho compuesto. A pesar de la gran importancia tecnológica de este compuesto ternario, no se le ha puesto el interés suficiente para ser completamente estudiado y como consecuencia se sabe muy poco acerca de él en comparación con cualquier otro material semiconductor.

Hay dos grupos que han sintetizado dicho compuesto ternario, el primero de ellos encabezado por Noreika y Francombe¹ quienes usaron para crecer este material la técnica de "Sputtering", siendo capaces de extender la solubilidad del Si en el GaAs desde su valor de

equilibrio de $\cong 0.5$ a $\cong 0.55$ %. Sin embargo ellos no presentaron información acerca de la microestructura de ésta aleación. Por otro lado el grupo de J.E.Greene^{1,2,3} quien también ha sintetizado ésta aleación ($x=0$ a $x=0.53$) mediante una técnica híbrida de deposición-evaporación (Sputtering) presenta una caracterización estructural, donde la composición de las películas se determinó mediante microscopía electrónica y la caracterización estructural por difracción de rayos X ($30 \text{ arcsec } 2\theta$).

Este material se ha venido estudiando paulatinamente y como consecuencia se han logrado obtener algunas de sus características físicas al igual que las condiciones y técnicas de crecimiento. Por ejemplo se sabe que para $0 < x < 0.12$ se obtienen crecimientos de alta aleación sin defectos ¹ y para $x > 0.12$ se presentan ciertas evidencias de defectos interfaciales asociados con defectos en la red. Sin embargo las aleaciones con $x > 0.30$ se ven libres de defectos.

Además se ha encontrado que la constante de red obedece la ley de Vegard y decrece linealmente conforme aumenta el valor de x (de 0.56531 nm para el GaAs a 0.55510 nm para $(\text{GaAs})_{(0.60)}(\text{Si}_2)_{(0.40)}$).³

En la literatura se encuentra reportado que a altos niveles de dopante (Si , $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) se origina que la celda unitaria de $(\text{GaAs})(001)-(2 \times 4)$ se reordene para formar "retorcimientos" en las hileras con vacancias las cuales se consideran como superficiesceptoras ya que la carga negativa se atrapa localizándose en dichos sitios retorcidos, lo cual ocasiona que el nivel de Fermi se localice a la mitad de la banda prohibida.^{4,5,6,7}

Como se sabe el $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ es un material del tipo zinc-blenda y se ha encontrado que en $x \cong 0.37$ ocurre la transición zinc-blenda a diamante⁸, determinado por mediciones de rayos X.

Las películas semiconductoras del compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ con las que se trabajaron fueron crecidas sobre un sustrato de GaAs(001) mediante una técnica híbrida de deposición-evaporación (Sputtering, depositados en un sustrato a una temperatura de $570 \pm 10 \text{ }^\circ\text{C}$), el grosor de las películas es del orden de $2-3 \text{ } \mu\text{m}$.⁸

El contenido de este trabajo se presenta en dos partes: el aspecto teórico y la parte experimental los cuales se encuentran divididos en varios capítulos de la siguiente forma:

-Capítulo I - El arseniuro de galio y el silicio. En este capítulo se mencionan algunas de las características más importantes del GaAs, Si, así como del compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ (lo poco que se sabe de él), tales como el tipo de estructura cristalina, forma de la primera zona de Brillouin, estructura de bandas, etc. y para el $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ se menciona como el Si va causando ciertas modificaciones en la estructura del GaAs.

-Capítulo II - Espectroscopia de modulación. Aquí se presentan las generalidades y diferentes técnicas de modulación, de igual forma se realiza un análisis de la función dieléctrica compleja, y de los puntos críticos o singularidades de Van Hove de $\epsilon(E, \Gamma)$. También se hace notar la importancia del modelo de aproximación parabólica simple para $\epsilon(E, \Gamma)$, la determinación de los parámetros de un punto crítico, y el tipo de espectro óptico (tercera derivada en el límite de campo bajo).

-Capítulo III - Experimento. Se explican las técnicas de modulación empleadas en este trabajo así como el arreglo experimental utilizado para cada técnica.

-Capítulo IV - Resultados. Se discuten los tipos de espectros obtenidos experimentalmente (para las diferentes concentraciones de Si) en función de la temperatura de 10 a 300 grados Kelvin. Se obtiene la transición de la energía E_1 y $E_1 + \Delta_1$ en función de la temperatura y se realizan los ajustes teóricos con ayuda de la fórmula de Varshni para obtener la forma funcional del comportamiento con respecto a la temperatura del $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$. Se presentan también las conclusiones del trabajo.

CAPITULO I- EL ARSENIURO DE GALIO Y EL SILICIO

1.1- SEMICONDUCTOR GaAs Y Si

El Galio (Ga) es un metal del grupo III, el Arsénico (As) y Silicio (Si) son semimetales del grupo V y IV, respectivamente.

El GaAs es un semiconductor binario, el cual tiene una estructura cristalina del tipo zinc-blenda en la que los átomos se encuentran arreglados de forma tetraédricamente. Esta puede ser vista como dos estructuras fcc desplazadas una de la otra un cuarto de la diagonal ⁹. La estructura zinc-blenda aparece cuando los átomos del Ga se colocan en una de las redes fcc y los del As sobre la otra, donde las coordenadas de los átomos del Ga son 000; 0½½; ½0½; ½½0 y del As: ¼¼¼; ¼¾¾; ¾¼¾; ¾¾¼. Como la red espacial es una fcc, hay cuatro moléculas de GaAS por celda convencional (cúbica) como se muestra en la figura 1 ⁹.

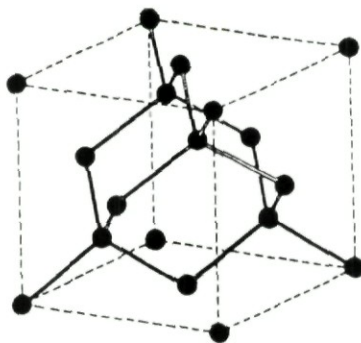


Fig.1. Estructura cristalina del diamante mostrando la disposición tetraédrica de los enlaces.

Una zona de Brillouin es definida como una celda de Wigner-Seitz en la red recíproca. Y la primera zona de Brillouin es el mínimo volumen encerrado por planos que bisectan perpendicularmente a los vectores k de la red recíproca desde el origen.

En la siguiente figura se muestra la primera zona de Brillouin (celda de Wigner-Seitz) de un semiconductor tipo diamante y zinc-blenda (fcc), así como la estructura de bandas del diamante ¹⁰:

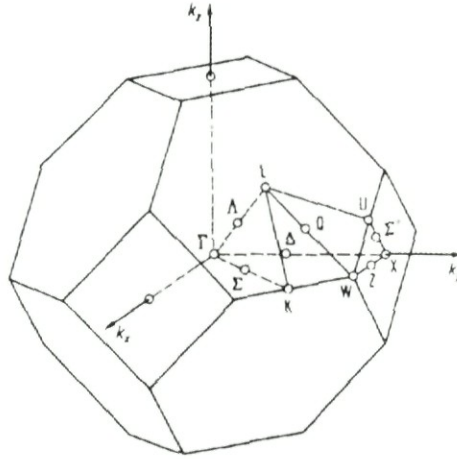


Fig.2. Zona de Brillouin de una red cúbica centrada en la cara (estructura del diamante y tipo zinc-blenda).

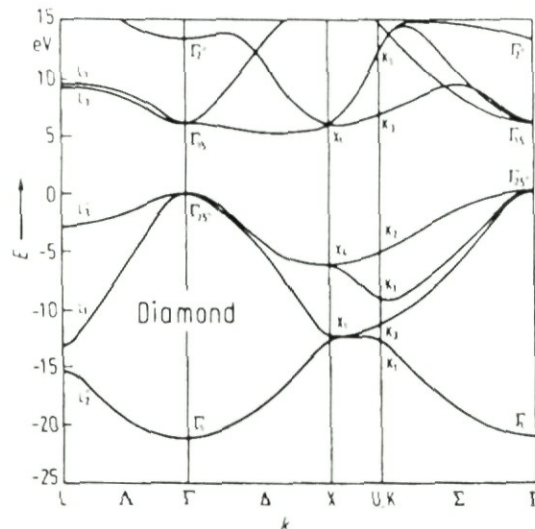


Fig.3. Estructura de bandas del diamante.

donde la dirección a lo largo de $[100]$ se le denota como Δ , y al punto en esta misma dirección pero en el borde de la ZB ($\kappa = 2\pi(100)/a$) se le llama X, sobre $[111]$ se les conoce como direcciones Λ y en el borde de la ZB ($\kappa = \pi(111)/a$) se localiza el punto L, en $[110]$ se encuentra la dirección Σ y sobre el borde de la ZB el punto K. Al centro de la ZB, $[000]$, se le conoce como Γ .

De acuerdo a lo dicho anteriormente se muestra en la siguiente figura la estructura de bandas en la dirección $[100]$, $[111]$, y en $[000]$ del GaAs donde se resalta de forma apreciable la banda de valencia y de conducción ¹¹:

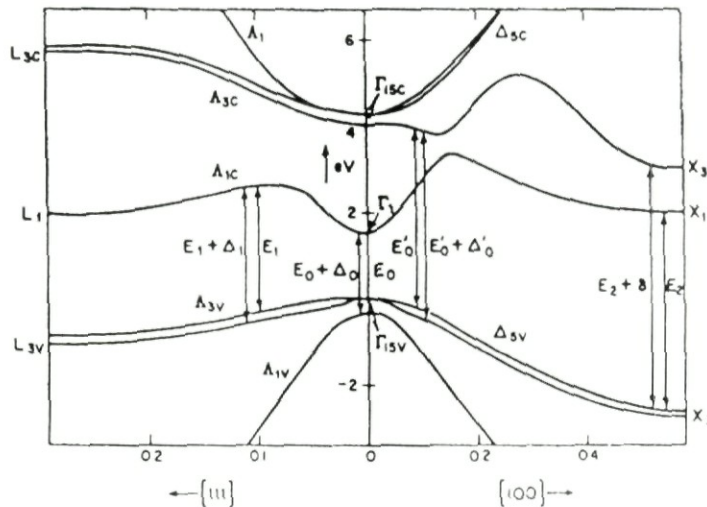


Fig.4. Estructura de bandas del GaAs.

de forma análoga se muestra la estructura de bandas del Si ¹⁰

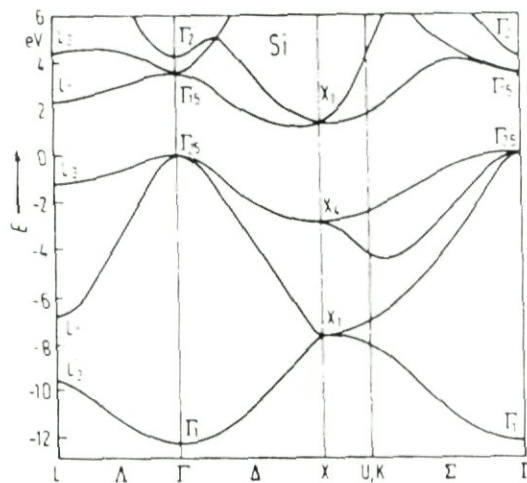


Fig.5. Estructura de bandas del Si

En muchos de los materiales del tipo zinc-blenda y diamante el mínimo absoluto de la banda de conducción se localiza en la dirección de Γ (Γ_1), estos estados son orbitales del tipo s y en el punto más alto del borde de la banda de valencia (Γ_{15}) se encuentran los estados con orbitales del tipo p (son triplemente degenerados). Al siguiente estado más alto en la misma dirección Γ sobre la banda de conducción se le denota Γ_{15}^+ . Esta situación física no se cumple para el Si.

En la siguiente figura se muestra un diagrama simplificado de la energía contra el vector de onda para semiconductores con ancho de banda prohibida directa o de transiciones directas (Γ_1 y Γ_{15} se encuentran con el mismo valor del vector de onda K en la zona de Brillouin) donde se muestra de forma simplificada la estructura real de bandas de un semiconductor de este tipo ^{12,13}.

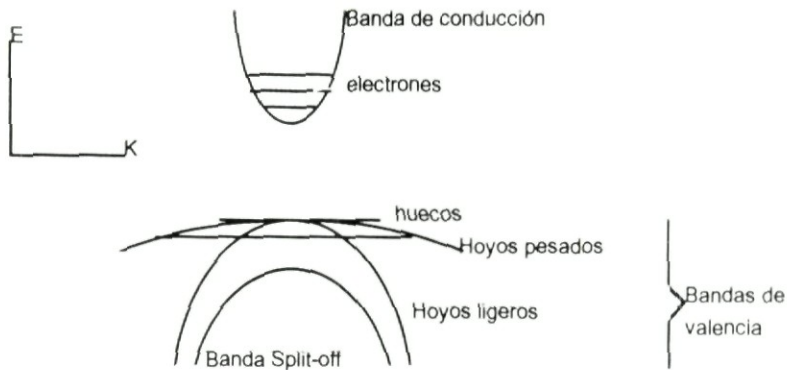


Fig.6. Diagrama esquemático de la banda de valencia y de conducción para un semiconductor de transiciones directas.

Cuando se excita a los átomos de un semiconductor con la energía necesaria para lograr que los electrones pasen de la banda de valencia a la de conducción, en la zona de Brillouin se realzan transiciones asociadas a los pares de estados que tengan ciertas singularidades conjuntas a las cuales se les llama puntos críticos ¹¹, y en la espectroscopia

óptica de modulación lo que se hace es inducir cambios en las propiedades ópticas del cristal únicamente alrededor de dichos puntos críticos.

Los puntos críticos de menor energía en el GaAs son los siguientes:

- 1.- E_0 , define la transición de Γ_{15} a Γ_1 .
- 2.- $E_0 + \Delta_0$, es la componente de E_0 del desdoblamiento espín-órbita.
- 3.- E_0' , transición entre Γ_{15} y Γ_{15}' .
- 4.- E_1 , transición interbanda de la banda de valencia a la de conducción a lo largo de Λ .
- 5.- $E_1 + \Delta_1$, desdoblamiento espín-órbita de E_1 .
- 6.- E_2 , transición UV en X.

En este trabajo se encuentran E_1 y $E_1 + \Delta_1$ para el $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ mediante las técnicas de fotorreflectancia y electrorreflectancia modulada.

1.2- COMPUESTO TERNARIO $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$

Desde hace varios años atrás se han hecho aleaciones epitaxiales meta estables ^{1,2,3,8,14} de los elementos del grupo III, IV y V de la tabla periódica de los elementos, $(III-V)_{(1-x)}(IV_2)_x$, como $(GaAs)_{(1-x)}(Ge_2)_x$, $(GaSb)_{(1-x)}(Ge_2)_x$, $(GaSb)_{(1-x)}(Sn_2)_x$, $(GaSb)_{(1-x)}(Ge_{2(1-y)}Sn_{2y})_x$. Últimamente es de gran interés estudiar el $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$, ya que éste se puede utilizar como pequeñas barreras en $GaAs/(Ga,Al)As$ en láseres de pozo cuántico ó emisores de luz de altas energías ^{1,3}.

En este trabajo se utiliza como material de estudio el Arseniuro de Galio con diferentes concentraciones de Silicio.

De acuerdo a los cálculos hechos ¹⁵ y múltiples resultados experimentales se encontró que en equilibrio, el Si es un dopante amfotérico en $GaAs$. Esto es, el Si puede ocupar los sitios del Ga o del As con frecuencias comparables (predominantemente determinado por los potenciales químicos del As y Ga). Los resultados predicen que la solubilidad del Si esta de acuerdo con el experimento ¹⁵ y muestran que para altas concentraciones ($\geq 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) de

Si una fracción significativa (más del 10%) aparece en la forma de pares Si-Si a primeros vecinos.

En la siguiente figura se ve como un átomo de Si se acomoda en una supercelda de GaAs:

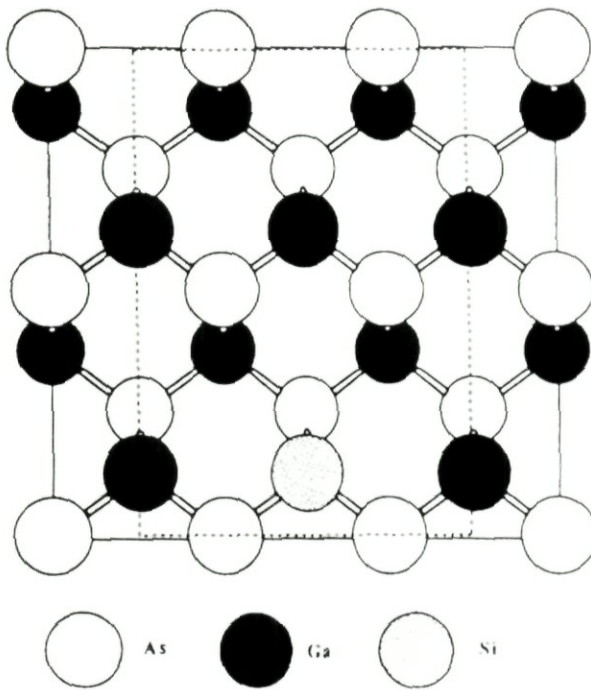


Fig. 7. Vista superior de una supercelda donde se muestra el GaAs (110) dopado por el Si.

Cuando un átomo de Si reemplaza a uno de Ga en una superficie GaAs(110) surge un cambio muy fundamental en la química de dicha superficie, porque de la carga extra de valencia, el electrón del Si prefiere la hibridación sp^2 del átomo de Ga desplazado.

Las modificaciones "ab initio" en la estructura electrónica inducidas por el dopante de Si son significantes:

- 1- Los enlaces sueltos del As son ocupados por los del Si ocasionando que los estados que tenían este tipo de enlaces desciendan 0.4 eV de su posición normal (situados cerca del tope de la banda de valencia).
- 2- El empuje de estados superiores sobre los átomos de Ga abajo de la siguiente cadena del dopante de Si son empujados 0.1 eV hacia arriba en la banda de conducción.
- 3- Aparecen nuevos estados aproximadamente a 0.2 eV arriba de la mitad del ancho de la banda prohibida asociado con el estado superior medio lleno de la superficie atómica del Si.

2.1- GENERALIDADES Y TÉCNICAS DE MODULACIÓN

En la espectroscopia óptica hay varias ramas con técnicas diferentes que se aplican para saber ciertas propiedades físicas de algunos materiales semiconductores ^{11,17}. Una de ellas es la espectroscopia de modulación, que permite medir e interpretar de forma eficaz, cambios en el espectro óptico de una muestra, originados por una modificación (periódica) hecha a propósito en las condiciones de medición.

Dichas modificaciones pueden ser causadas de forma directa (o interna) aplicando alguna perturbación (o un conjunto de perturbaciones) como un campo eléctrico ó magnético, tensión uniaxial, pulsos de calor, etc. También se puede lograr de forma indirecta (o externa), esto es, se varía el agente físico perturbador en lugar de la muestra.

Con la técnica de espectroscopia de modulación se puede obtener los cambios directamente de la medición y no de la diferencia de espectros absolutos como lo hacen las demás técnicas ^{11,17,18}. Esto conduce a tener varias ventajas como: minimizar los errores sistemáticos en los resultados, la naturaleza derivativa (1ª o 3ª derivada) del espectro de modulación facilita la comprensión de los datos obtenidos y ayuda a definir el tipo de estructura que se tiene (modelo parabólico), evita corrimientos en las componentes del espectro debidos a posibles cambios en la muestra, elimina efectos de fondo que carecen de importancia, resalta la estructura localizada en energía (estructura débil) que pudiera estar oculta en un espectro absoluto, etc., como se puede ver en la fig. 8 ¹⁹. Además, en semiconductores, el rango de amplitud de la espectroscopia modulada ¹⁷ va de 10^{-5} a 10^{-2} (esto determina cambios relativos tan pequeños como una parte en 10^5) la cual es más fácil de medir con los detectores actuales.

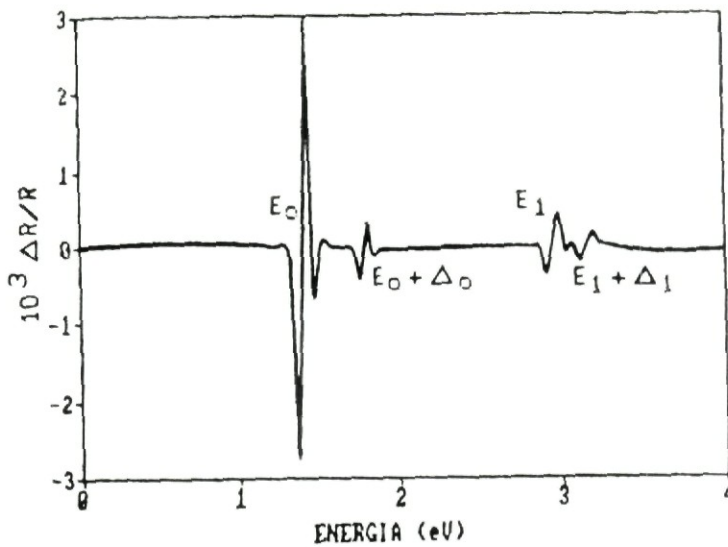


Fig 8. Espectro de electrorreflectancia a campo bajo del GaAs en $T=300$ K.

Como se había mencionado antes, el objetivo de la espectroscopia de modulación es el de cambiar algunos parámetros de la muestra (modulación externa) o del sistema de modulación (interna) para producir un cambio en el espectro de reflectancia o transmitancia de la muestra. Debido a que los cambios producidos son típicamente menores al uno por ciento, siempre es necesario hacer uso de un procesamiento de la señal obtenida. Para ello se utiliza (típicamente) un detector que sea sensitivo al cambio de fase.

Un gran número de técnicas involucrando modulación interna, externa o sus combinaciones se han desarrollado para obtener diferentes tipos de información acerca de la muestra. Usualmente estas técnicas se han clasificado de acuerdo a su tipo ¹⁷: escalar, incluye todos los métodos internos y las perturbaciones externas no direccionales tales como la temperatura y presión hidrostática (esto es usado principalmente en análisis de espectroscopia general y para estudiar la dependencia del umbral de energía y parámetros de desdoblamiento de la estructura en función de la perturbación específica). El otro tipo se conoce como tensorial; también se consideran aquí algunas de las perturbaciones externas pero tomando en cuenta un eje de simetría, tal como un campo eléctrico ó magnético y una tensión uniaxial. Estos tienen la ventaja de proporcionar información acerca de la simetría (pero introduciendo un eje de simetría), por ejemplo en un material isotrópico, pero **este tipo** de perturbaciones tienen la desventaja de que pueden causar degeneraciones y producir un espectro con desdoblamientos que sean característicos de la simetría de transiciones **dada** por la estructura.

En la espectroscopia modulada se utilizan más comúnmente las siguientes técnicas:

1- Modulación de la longitud de onda (MO) ó Reflectancia derivada en la energía (RDE). Es del tipo escalar-interno, los principales parámetros que se determinan son E_g y Γ (parámetro de anchura), el parámetro variable es λ ó $\hbar\omega$, la línea espectral es del tipo 1ª derivada, se aplica a cualquier material, la muestra a analizar requiere el mínimo de preparación y es una técnica muy rápida. La principal desventaja es que el sistema de medición puede generar la aparición de estructura intrínseca que no es fácil de eliminar.

2- Elipsometría espectroscópica (EE). Es del tipo escalar-interno y se puede determinar con ella la función dieléctrica compleja $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$, la línea espectral que se obtiene es de carácter absoluto. La desventaja de esta técnica es que es influenciada fuertemente por la preparación de la muestra.

3- Modulación composicional (MC). Escalar-interna, sirve para determinar la presencia de impurezas y tipo de aleación, la muestra se compara con una muestra control, la línea espectral obtenida es complicada. La ventaja es que se obtienen diferencias de parámetros imposibles de variar cíclicamente. Por otro lado, la alineación y preparación de la superficie son críticas.

4- Termo modulación (TM). Escalar-externa, con ella se puede obtener $E_g, \Gamma, dE_g / dT$ y $d\Gamma / dT$, la variable modulante es la temperatura (con ella se afectan E_g y los parámetros de anchura Γ), la línea espectral es del tipo 1ª derivada y es una técnica que se aplica a cualquier tipo de material (permite identificar transiciones del nivel de Fermi en los metales). Sin embargo, es de respuesta lenta y los espectros son muy anchos.

5- Modulación por presión hidrostática (MPH). Escalar-externa, la variable modulante es la presión, se afecta al umbral E_g , revela la magnitud del potencial de deformación. La línea espectral es de 1ª derivada y se aplica a cualquier material. La desventaja es que no puede ser fácilmente modulada y tiene que ser aplicada junto con otra técnica.

6- Modulación por luz (ML) ó fotorreflectancia (FR). Escalar-externa, el agente modulante es la intensidad I de un haz secundario y con esto se afecta la concentración de portadores ó el campo eléctrico superficial de la muestra, se puede obtener E_g y Γ . La línea espectral que genera es de forma complicada pero se puede ajustar con línea del tipo de tercera derivada. Las ventajas que presenta es que es una técnica de alta resolución, se aplica a cualquier material y la muestra requiere un mínimo de preparación. El inconveniente es que los efectos sobre el material no están bien definidos.

7- Modulación por campo eléctrico (MCE) ó electrorreflectancia (ER). Tensorial-externa, la variable modulante es el campo eléctrico y lo que se afecta es la energía eléctrica $E(\vec{k})$. Con esta técnica se puede determinar E_g, Γ, m^* e impurezas. La línea espectral es del tipo tercera derivada (campo bajo), presenta oscilaciones del tipo Franz-Keldysh (a campo alto) y es de

muy alta resolución. La gran desventaja es que se requiere un cierto rango de resistividad, de donde su aplicación esta limitada a semiconductores y aislantes.

8- Modulación por campo magnético (MCM). Tensorial-externa, el modulante es el campo magnético afectándose de esta forma los niveles de energía eléctrica permitiendo obtener E_g y m^* . La línea espectral es del tipo de niveles de Landau, aplicable a cualquier material obteniéndose muy alta resolución. El inconveniente es que sólo se realiza para mínimos de la banda de conducción de menor energía.

9. Modulación por tensión uniaxial (MTU). Tensorial-externa, el modulante es la tensión X , se afecta con esto a E_g y a los elementos de la matriz de deformación obteniéndose E_x, Γ y simetrías, la línea espectral es de primera derivada. Su principal desventaja es que únicamente se aplica a materiales 'duros' ya que es difícil realizar la modulación.

En este trabajo se utilizan las técnicas de ER y FR para obtener E_1 y $E_1 + \Delta_1$ del $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ en función de la temperatura para diferentes valores de X . Para realizar el análisis de las líneas espectrales se ajustan mediante la forma de línea de electrorreflectancia en la aproximación de campo bajo (combinaciones lineales del tipo 1^a, 2^a y 3^a derivada). Esto se puede hacer ya que las dos técnicas son muy parecidas ¹⁷.

2.2- LA FUNCIÓN DIELECTRICA COMPLEJA ^{9,17}

Cuando se desean saber las propiedades ópticas de algún material semiconductor, la función que se determina primero para ello es la función dieléctrica $\epsilon(\bar{\kappa}, \omega)$, la cual es un tensor de segundo rango para un material no isotrópico que depende del vector de onda $\bar{\kappa}$ y la frecuencia ω del campo electromagnético aplicado a la muestra. Esto es, mediante $\epsilon(\bar{\kappa}, \omega)$ se describe la respuesta que tiene un cristal a un campo electromagnético.

Veamos como ocurre esto desde un punto de vista cualitativo: como la perturbación de un campo eléctrico E produce cambios en las propiedades dieléctricas de la muestra a estudiar y estos se manifiestan en términos de un cambio en la función dieléctrica $\Delta\epsilon(E)$, entonces para obtener este cambio necesitamos añadir un término perturbativo al Hamiltoniano H_0 del sistema (cristal) sin perturbar, esto es H' . Mediante la teoría de perturbaciones a primer orden nos damos cuenta que si consideramos un campo eléctrico uniforme $H' = eE \cdot r$ que no tenga periodicidad en la red, entonces se anulará completamente la invariancia traslacional del Hamiltoniano en las direcciones del campo y por lo tanto aparecerá una fuerza neta que acelera los electrones.

Tomando al electrón dentro de un cristal, el Hamiltoniano tendrá la siguiente forma $H_0 = p^2 / 2m + V(r)$ (invariante únicamente para translaciones del mismo cristal). El valor de p se considera, ahora, como un buen número cuántico pero únicamente dentro de un vector κ_r de la red recíproca. Entonces la forma parabólica de la energía del electrón libre se descompone en diferentes bandas. De esta forma se logra la absorción óptica (a primer orden) pero utilizando un vector de la red recíproca para que el momento se conserve. En el esquema de zona reducida, la transición óptica aparece como una línea vertical en un diagrama de bandas de energía.

Si el cristal sufre alguna perturbación, entonces $H_0 = p^2 / 2m + V(r) + H'$ y si se sigue teniendo la periodicidad, el momento todavía es un buen número cuántico dentro de algún vector de la red recíproca y las transiciones todavía son verticales, de donde, los cambios que dominan se manifiestan directamente como pequeños corrimiento en las brechas de energía. Debido a la magnitud de estas variaciones, las perturbaciones inducen cambios de primer orden en la función dieléctrica.

Por otro lado, si el agente perturbante es un campo eléctrico $H' = eE \cdot r$ esto provoca que la invariancia traslacional se pierda. Los electrones se aceleran y el momento ya no es un buen número cuántico en la dirección del campo (las funciones de Bloch de un electrón dentro de un cristal sin perturbar $\Psi_n(\kappa, r) = |n, \kappa\rangle = e^{i\kappa \cdot r} u_n(\kappa, r)$ se transforman en funciones mezcladas con la perturbación).

Analíticamente la situación física se ve de la siguiente forma: la respuesta de un material cuando se le aplica un campo eléctrico (E) la podemos escribir como $P = \chi E$ (aproximación lineal), siendo P el momento dipolar por unidad de volumen y χ la susceptibilidad (tensor). Puesto que $D = E + 4\pi P$, entonces ⁹:

$$D = E + 4\pi\chi E = (1 + 4\pi\chi)E = \varepsilon E \quad (1)$$

de donde, nos damos cuenta que ε está relacionado con la susceptibilidad de la siguiente forma:

$$\varepsilon = 1 + 4\pi\chi \quad (2)$$

el cual es una ecuación tensorial. Para materiales cuya estructura tiene simetría cúbica (del tipo Zinc-blenda) ε es un escalar.

Para simplificar las cosas, se desprecia cualquier efecto de dispersión óptica ($\kappa \rightarrow 0$), esto es, se toma a ε como una función que depende sólo de la frecuencia ω de la luz utilizada, $\varepsilon = \varepsilon(\omega)$. Como ε generalmente es una función compleja, entonces:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (3)$$

Por otro lado⁹ se tiene que $\varepsilon \equiv N^2$, donde N es el índice de refracción complejo del material, definido de la siguiente forma:

$$N = n + i\chi \quad (4)$$

$n = n(\omega)$ = índice de refracción

$\chi = \chi(\omega)$ = coeficiente de extinción

de donde:

$$\varepsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - \chi^2(\omega) \quad (5)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 2n(\omega)\chi(\omega)$$

Si consideramos ahora al campo eléctrico en un sólido como:

$$E = E_0 e^{-i(\omega t - \kappa x)} = E_0 e^{-i\omega(t - \kappa x/\omega)} \quad (6)$$

donde $\omega = c\kappa/N$ describe la relación de dispersión, c la velocidad de la luz, de donde $\kappa/\omega = N/c$ y de acuerdo a la ecuación (4)

$$E(x,t) = E_0 e^{-\omega\chi x/c} e^{-i\omega(t-nx/c)} \quad (7)$$

debido a que la densidad de energía del campo es proporcional a $|E|^2$ obtenemos:

$$|E|^2 \cong |E_0|^2 e^{-2\omega\chi x/c} = |E_0|^2 e^{-\alpha x} \quad (8)$$

donde $\alpha = 2\omega\chi/c$

esto nos lleva a deducir que la radiación electromagnética en un sólido se ve atenuada por una constante α a la cual se le llama coeficiente de absorción del material: $\alpha(\omega) = \omega\varepsilon_2/cn$.

En cualquier medición óptica la mayor información sobre el sistema a analizar nos la da el coeficiente de reflectividad (incidencia normal sobre el cristal), $r(\omega)$, el cual es una función compleja definida en la superficie del cristal como la razón del campo eléctrico reflejado y el incidente ⁹:

$$r(\omega) = \frac{E_{ref}}{E_{inc}} = \rho(\omega) e^{i\theta(\omega)} \quad (9)$$

donde $\rho(\omega)$ es la amplitud y $\theta(\omega)$ la fase.

En términos de $N(\omega)$ el coeficiente de reflectividad toma la siguiente forma:

$$r(\omega) = \frac{N(\omega) - 1}{N(\omega) + 1} = \frac{n + i\chi - 1}{n + i\chi + 1} \quad (10)$$

la cual surge de haber considerado la continuidad de la componente paralela a la superficie del cristal de los campos eléctrico y magnético.

Sin embargo, la cantidad que es más fácil de medir en el experimento es la reflectancia R la cual queda definida como:

$$R = r^* r = \frac{E_{ref}^* E_{ref}}{E_{inc}^* E_{inc}} = \rho^2 \quad (11)$$

esto es, la razón de la intensidad reflejada con la incidente. De forma análoga se puede expresar en términos de n y χ :

$$R(\omega) = \left| \frac{N(\omega) - 1}{N(\omega) + 1} \right|^2 = \frac{[n(\omega) - 1]^2 + \chi^2(\omega)}{[n(\omega) + 1]^2 + \chi^2(\omega)} \quad (12)$$

o bien

$$R(\omega) = \frac{|\varepsilon| + 1 - [2(\varepsilon_1 + |\varepsilon|)]^{1/2}}{|\varepsilon| + 1 + [2(\varepsilon_1 + |\varepsilon|)]^{1/2}} \quad (13)$$

donde se han considerado únicamente las raíces positivas de n^2 y χ^2 , $|\varepsilon| = (\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2)^{1/2}$.

Para poder medir el valor de la fase $\theta(\omega)$ de la onda reflejada se hace uso de la técnica de reflectancia cuando se conoce el valor de ω (ya que por otros medios es difícil de

obtener), esto se consigue mediante una deconvolución de Kramers-Kronig de $R(\omega)$, la cual es una integral sobre la reflectancia:

$$\epsilon(\omega) = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \text{Ln} \left| \frac{\omega' + \omega}{\omega' - \omega} \right| \frac{d \text{Ln} R(\omega')}{d\omega'} d\omega' \quad (14)$$

La región espectral en que la reflectancia es constante no contribuye a la integral, más aún, las regiones espectrales $\omega' \gg \omega$ y $\omega' \ll \omega$ no contribuyen mucho ya que la función $\text{Ln} \left| \frac{\omega' + \omega}{\omega' - \omega} \right|$ es pequeña en dichas regiones.

2.3- PUNTOS CRÍTICOS ^{11,17}

Cuando se considera el caso de la aproximación de un electrón en el semiconductor, la expresión más general que se obtiene para $\epsilon(E = \hbar\omega)$ mediante un estado de Bloch $\psi_n(\kappa, r)$ con energía $E = E_n(\kappa)$ de índice de banda n y vector de onda κ es ²⁰:

$$\epsilon(E, \Gamma) = 1 + \frac{4\pi e^2 \hbar^2}{m^2 E^2} \sum_{\kappa, c, v} |\hat{e} \cdot \bar{P}_{cv}(\kappa)|^2 \left(\frac{1}{E_{cv}(\kappa) - E - i\Gamma} + \frac{1}{E_{cv}(\kappa) + E + i\Gamma} \right) \quad (15)$$

con $n = c, v$ denotando la banda de conducción (vacío) y valencia (lleno) respectivamente, \hat{e} al vector de polarización unitario del campo electrónico (del fotón), P_{cv} el elemento de matriz del momento

$$\bar{P}_{cv}(\kappa) = \langle c\kappa | p | v\kappa \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_c^*(\kappa, r) P \psi_v(\kappa, r) dr \quad ,$$

la energía interbanda dada por $E_{cv}(\kappa) = E_c(\kappa) - E_v(\kappa)$ y Γ es el parámetro (factor) de ensanchamiento fenomenológico. El vector de onda κ en $\epsilon(E, \Gamma)$ es sumado en la primera zona de Brillouin.

Para poder obtener la información que necesitamos del espectro óptico, primero se muestra el origen de la estructura en $\epsilon(E, \Gamma)$ convirtiendo la suma sobre κ en una integral

$$\sum_{\kappa} \rightarrow \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{ZB} d^3\kappa, \quad \text{debido a que en la primera zona de Brillouin, los valores de}$$

$\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$ forman un casi continuo, de donde:

$$\varepsilon(E, \Gamma) = 1 + \frac{e^2 \hbar^2}{\pi^2 m^2 E^2} \int_{ZB} |\hat{e} \cdot \bar{P}_c(\kappa)|^2 \left(\frac{1}{E_{cv}(\kappa) - E - i\Gamma} + \frac{1}{E_{cv}(\kappa) + E + i\Gamma} \right) d^3 \kappa \quad (16)$$

Ahora se reemplazarán $\kappa_x, \kappa_y, \kappa_z$ por la energía E y dos variables κ_1, κ_2 las cuales nos localizan un punto sobre la superficie de energía constante S dada por $E = E(\kappa) = E_{cv}$. Y puesto que el Jacobiano de transformación para nuestro caso está definido como $|\nabla E_{cv}(\kappa)|_E^{-1}$, tenemos:

$$\varepsilon(E, \Gamma) = 1 + \frac{e^2 \hbar^2}{\pi^2 m^2 E^2} \int dE \int_S d\kappa_1 d\kappa_2 \frac{|\hat{e} \cdot \bar{P}_c(\kappa)|^2}{|\nabla E_{cv}(\kappa)|} \left(\frac{1}{E_{cv}(\kappa) - E - i\Gamma} + \frac{1}{E_{cv}(\kappa) + E + i\Gamma} \right) \quad (17)$$

Observando esta última ecuación con un poco de cuidado, se notará que presenta una singularidad en κ para un par de bandas dado c, v en el que

$$\nabla_{\kappa} E_{cv}(\kappa) = 0 \quad (17a)$$

Los puntos (críticos) $\kappa = \kappa_j^{cv}$ solución a la ecuación (17a) son conocidos como singularidades de Van Hove de $\varepsilon(E, \Gamma)$ son de extrema importancia en espectroscopia de modulación ya que en las regiones alrededor de estos puntos se origina la estructura en los espectros ópticos modulados.

2.4- EL MODELO DE APROXIMACIÓN PARABÓLICO SIMPLE ^{11,17}

Con el fin de simplificar enormemente los resultados en $\varepsilon(E, \Gamma)$ y poder analizar los espectros de modulación se realiza una expansión de $E_{cv}(\kappa)$ en serie de potencias en κ alrededor del punto crítico, y se hace una clasificación de los diferentes tipos de puntos críticos en la estructura de bandas del cristal, para lo cual se consideran únicamente los términos cuadráticos, A esto se le llama aproximación de bandas parabólicas, esto es:

$$E_{cv}(\kappa) \cong E_{cv}(\kappa_j^{cv}) + \frac{1}{2} \hbar^2 \left[(\kappa_x - \kappa_{jx}^{cv})^2 / \mu_{xx}^{cv} + (\kappa_y - \kappa_{jy}^{cv})^2 / \mu_{yy}^{cv} + (\kappa_z - \kappa_{jz}^{cv})^2 / \mu_{zz}^{cv} \right] \quad (18)$$

centrado alrededor de cada punto crítico κ_j^{cv} para un par de bandas dado c, v , donde el tensor de masas recíproco esta definido como $\mu_{cv}^{-1} = (1/\hbar^2)\nabla_{\kappa}\nabla_{\kappa}E_{cv}(\kappa)$ (y debido a que μ_{cv}^{-1} es simétrico con respecto a la diagonal, y tomando el sistema de coordenadas adecuado, este puede reducirse a un tensor en el cual solo las componentes de la diagonal sean diferentes de cero), si se toma únicamente un punto crítico (suprimiendo todos los índices) y haciendo $\kappa - \kappa_j^{cv}$ la variable relativa a la coordenada local que diagonaliza μ^{-1} se tiene que:

$$E_{cv}(\kappa) = E_g + \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\kappa_x^2}{\mu_{xx}} + \frac{\kappa_y^2}{\mu_{yy}} + \frac{\kappa_z^2}{\mu_{zz}} \right) \quad (19)$$

Para calcular el espectro de modulación (pero no la función dieléctrica como un todo) se puede escribir a $\varepsilon(E, \Gamma)$ como una superposición de funciones locales:

$$\varepsilon(E, \Gamma) = \frac{e^2 \hbar^2 |\hat{e} \cdot \bar{P}_{cv}|^2}{\pi^2 m^2 E^2} \int \frac{d^3 \kappa}{E_{cv}(\kappa) - E - i\Gamma} \quad (20)$$

con E_{cv} definida en la ecuación (19). Debido a que la región de expansión es local se asume $P_{cv}(\kappa)$ como independiente localmente de κ . Realizando la integral explícitamente para una, dos y tres dimensiones (donde una, dos y tres de las μ_{ii} no son infinitas, respectivamente), tenemos:

$$\varepsilon(E, \Gamma) = \begin{cases} \frac{Q}{E^2} D_x \kappa_y \kappa_z i^{l+1} (E - E_g + i\Gamma)^{-1/2} \dots\dots\dots 1D \\ \frac{Q}{E^2} D_x D_y \kappa_z i^{l+2} \ln(E_g - E + i\Gamma) \dots\dots\dots 2D \\ \frac{2\pi Q}{E^2} D_x D_y D_z i^{l+1} (E - E_g + i\Gamma)^{1/2} \dots\dots\dots 3D \end{cases} \quad (21)$$

donde

$$Q = \frac{e^2 \hbar^2}{\pi m^2} |\hat{e} \cdot \bar{P}_{cv}|^2$$

$$D_i = \left(\frac{2|\mu_{ii}|}{\hbar^2} \right)^2, i = x, y, z$$

con $\kappa_i = \kappa_y$ o κ_z son las longitudes de corte en la zona de Brillouin para los puntos criticos de una y dos dimensiones, y l es el orden del punto critico que es igual al número de masas μ_{ii} negativas, $D, 2D$ y $3D$ denota la solución para una, dos y tres dimensiones respectivamente.

2.5- DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS DE UN PUNTO CRÍTICO ^{11,17}

Como se mostró anteriormente, la función dieléctrica en un punto crítico (aproximación parabólica) tiene, generalmente el siguiente comportamiento:

$$\varepsilon(E, \Gamma) = A \Gamma^{-n} e^{i\theta} (E - E_g + i\Gamma)^n \quad (22)$$

donde A es la amplitud, θ el factor de proyección en la fase, E_g la energía de umbral, Γ el parámetro de desdoblamiento, y n un número real ($-1/2$ para una dimensión, 0 o logaritmo para dos dimensiones y $1/2$ para tres dimensiones).

Uno de los objetivos principales en espectroscopia modulada es el determinar cada uno de los parámetros anteriores y auxiliar a establecer el modelo de la estructura de bandas, para ello se procede de la siguiente forma: dado un espectro experimental con una forma de línea determinada, E_g y Γ son determinados por la localización de la energía y el ancho de la estructura respectivamente, n por el número de oscilaciones lo cual hace que esté relacionado con la dimensionalidad efectiva de los puntos críticos en la zona de Brillouin y el orden de la diferenciación, θ se conoce de la asimetría de la estructura lo cual ocasiona que se relacione con la variable de diferenciación, la dimensión, el tipo de punto crítico, posibles interacciones Coulombianas e inhomogeneidades en la perturbación. La amplitud se relaciona con los elementos de la matriz de momento, la masa efectiva, la división del espacio- κ en una y dos dimensiones, posibles interacciones Coulombianas y la dimensión del punto crítico efectivo. Debido a que, entre A y Γ existe un fuerte acople, particularmente para n grande, el análisis de la amplitud se realiza únicamente tomando la dependencia con la polarización la cual se encuentra contenida en la información de los elementos de la matriz de momento. Si la radiación incidente no se polariza de manera especial, A se utiliza como un mero parámetro se ajuste.

2.6- ESPECTRO ÓPTICO DE TERCERA DERIVADA (Limite de campo bajo)

Puesto que una perturbación induce cambios ΔR o ΔT en la reflectancia R o transmitancia T de una muestra entonces se produce un cambio en la intensidad reflejada o transmitida por ésta, tal que: $\Delta I / I = \Delta R / R$ o $\Delta T / T$. El resultado experimental de un espectro de modulación es $\Delta R / R$ o $\Delta T / T$, pero para nuestro caso nos restringiremos al estudio de la reflectancia aplicada al $(GaAs)_{(1-X)}(Si_2)_X$ a diferentes valores de X .

Consideremos ahora, el efecto que una perturbación ξ aplicada a una muestra produce sobre la reflectancia R . Para ello recordemos que en la ecuación (13) se establece que $R = R(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ de donde:

$$\frac{1}{R} \frac{dR}{d\xi} = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_1} \frac{d\varepsilon_1}{d\xi} + \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_2} \frac{d\varepsilon_2}{d\xi} \quad (23)$$

y si hacemos

$$dR / d\xi = \Delta R$$

$$d\varepsilon_1 / d\xi = \Delta\varepsilon_1$$

$$d\varepsilon_2 / d\xi = \Delta\varepsilon_2$$

se tiene

$$\frac{\Delta R}{R} = \alpha \Delta\varepsilon_1 + \beta \Delta\varepsilon_2 \quad (24)$$

con $\alpha(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \equiv \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_1}$, $\beta(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \equiv \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \varepsilon_2}$ a los que se les conoce como coeficientes de Seraphin^{17,21}, los cuales tienen un comportamiento particular para cada semiconductor.

De forma análoga se puede escribir la ecuación (24) como

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re}[(\alpha - i\beta)\Delta\varepsilon] \quad (25)$$

donde $\Delta\varepsilon \equiv \Delta\varepsilon_1 + i\Delta\varepsilon_2$ es el cambio inducido en ε por la perturbación.

Cuando se considera una perturbación que destruye de alguna forma la simetría traslacional del cristal, como por ejemplo un campo eléctrico, la situación física se complica ya que el vector de onda toma la siguiente forma $\kappa(t) = \kappa_0 - e\xi t / \hbar$ donde t es el tiempo a

partir de la última colisión del electrón con la red y además el momento $p = \hbar\kappa$ ya no se considera como un número cuántico en la misma dirección que el campo. Esto ocasiona que la función de Bloch para el electrón en el cristal se tome como una superposición de funciones sin perturbación.

El estudio de esta dependencia fue tratada inicialmente por Aspnes y Rowe ²² de la siguiente forma: como los estados de Bloch están dados por $|c, \kappa\rangle = e^{i\kappa r} u_c(\kappa, r)$ para un electrón en la banda de conducción, entonces se puede escribir la función dieléctrica como:

$$\varepsilon(E, \Gamma) = \frac{Q}{E^2} \int_{ZB} d^3\kappa \langle c, \kappa | G_0 | c, \kappa \rangle \quad (26)$$

con Q definida anteriormente, $G_0 = (H_0 - E_v(\kappa) - E - i\Gamma)^{-1}$ y H_0 el Hamiltoniano sin perturbar, de donde $H = H_0 + e\xi \cdot \bar{r}$ y $G = G_0(1 + e\xi \cdot \bar{r}G_0)^{-1}$. Si se expande G a segundo orden en ξ (aproximación a campo bajo) se tiene

$$\begin{aligned} \Delta\varepsilon &= \varepsilon(E, \Gamma, \xi) - \varepsilon(E, \Gamma, 0) \\ &= \frac{-Q}{E^2} \int_{ZB} d^3\kappa \langle c, \kappa | G_0^2 e\xi \cdot \bar{r} - e^2 G_0 (\xi \cdot \bar{r} G_0) (\xi \cdot \bar{r} G_0) | c, \kappa \rangle \end{aligned} \quad (27)$$

el primer término de la integral no contribuye, ya que es proporcional a una transición dipolar. Si $r \rightarrow i\hbar\nabla_p = i\nabla_\kappa$ y debido a que los estados de Bloch de los electrones en la banda de conducción son eigenfunciones del Hamiltoniano H_0 con energía $E_c(\kappa)$: $H_0 |c, \kappa\rangle = E_c(\kappa) |c, \kappa\rangle$ y de acuerdo al factor de espín

$$\Delta\varepsilon = \frac{-2Q}{E^2} \int_{ZB} d^3\kappa \frac{e^2}{W} \xi \cdot \nabla_\kappa \left(\frac{1}{W} \xi \cdot \nabla_\kappa (1/W) \right) \quad (28)$$

con $= E_{cv}(\kappa) - E - i\Gamma$, $E_{cv}(\kappa) = E_c(\kappa) - E_v(\kappa)$, $E_g = E_c(0) - E_v(0)$,
alternativamente se tiene que

$$\Delta\varepsilon(E, \Gamma, \xi) = \frac{2Q}{E^2} \int_{ZB} \frac{(\hbar\Omega)^3 d^3\kappa}{(E - E_{cv}(\kappa) + i\Gamma)^4} \quad (29)$$

donde $(\hbar\Omega)^3 = \frac{e^2}{8} (\xi \cdot \nabla_\kappa)^2 E_{cv}(\kappa) = \frac{e^2}{8\mu_{par}} \xi^2 \hbar^2$, y μ_{par} es la masa reducida de la interbanda entre c y v evaluadas en la dirección del campo ξ .

Comparando la forma de $\varepsilon(E, \Gamma)$ con la de $\varepsilon(E, \Gamma, \xi)$ se obtiene $\Delta\varepsilon$, esto es

$$\Delta\varepsilon(E, \Gamma, \xi) = \frac{1}{3E^2} (\hbar\Omega)^3 \frac{\partial^3}{\partial E^3} (E^2 \varepsilon(E, \Gamma)) = \frac{e^2 \hbar^2 \xi^2}{24 \mu_{par} E^2} \frac{\partial^3}{\partial E^3} (E^2 \varepsilon(E, \Gamma)) \quad (30)$$

donde se nota que el campo ξ produce un cambio en ε el cual se encuentra relacionado con la tercera derivada con respecto a E de $\varepsilon(E, \Gamma)$.

Por otro lado $\Delta\varepsilon(E, \Gamma, \xi)$ puede ser relacionado con los valores de $\Delta R/R$ obtenidos experimentalmente de la reflectancia de la muestra, ya que al aplicar la ecuación (22) en la (30) tenemos:

$$\Delta\varepsilon(E, \Gamma, \xi) \propto \frac{\xi^2}{E^2} e^{i\theta} (E - E_g - i\Gamma)^m \quad (31)$$

con $m=n-3$, y si sustituyendo la ecuación (31) en la (25) :

$$\frac{\Delta R}{R} = \Re \left[(\alpha - i\beta) \frac{B\xi^2}{E^2} e^{i\theta} (E - E_g - i\Gamma)^m \right] \quad (32)$$

con B la constante de proporcionalidad en la ecuación (31). Reescribiendo la ecuación (32) tenemos:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\xi^2}{E^2} \Re \left[C e^{i\theta} (E - E_g - i\Gamma)^m \right] \quad (33)$$

donde C es la amplitud y θ es el factor de fase (ambos: C y θ , varían lentamente con la energía por ello se les considera como independientes de E cuando ésta tiene cambios pequeños). Puesto que $\Delta R/R$ es evaluado en un rango muy pequeño de energía y ξ^2 actúa únicamente con la amplitud, entonces, tanto E^{-2} como ξ^2 las podemos incluir en C, de donde:

$$\frac{\Delta R}{R} = \Re \left[C e^{i\theta} (E - E_g - i\Gamma)^m \right] \quad (34)$$

CAPITULO III- EXPERIMENTO

3.1- FOTORREFLECTANCIA Y ELECTORREFLECTANCIA MODULADA

Las técnicas de modulación son muy útiles para medir la absorción y/o reflectancia en los sólidos debido a que tienen una alta sensibilidad y resolución ^{11,17,18,19}.

Gracias a estas técnicas se han logrado medir pequeños cambios en las propiedades ópticas producidas por diferentes tipos de perturbaciones, y de esta forma se obtienen espectros diferenciales que nos muestran la forma de las bandas en su estructura electrónica. La fotorreflectancia modulada (FRM) y electrorreflectancia modulada (ERM) son las técnicas que se utilizan en este análisis para el $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ en función de la temperatura a diferentes valores de X.

La técnica de FRM no necesita de algún arreglo experimental complicado ni de una preparación minuciosa de la muestra, lo único que se debe cuidar mucho es que los dos haces (el perturbador y modulante) coincidan en la misma región de incidencia sobre la muestra. La razón física por la cual el haz modulante causa un cambio en las propiedades ópticas de la muestra es que se provoca una modulación de la barrera de potencial, como se discute en el siguiente párrafo.

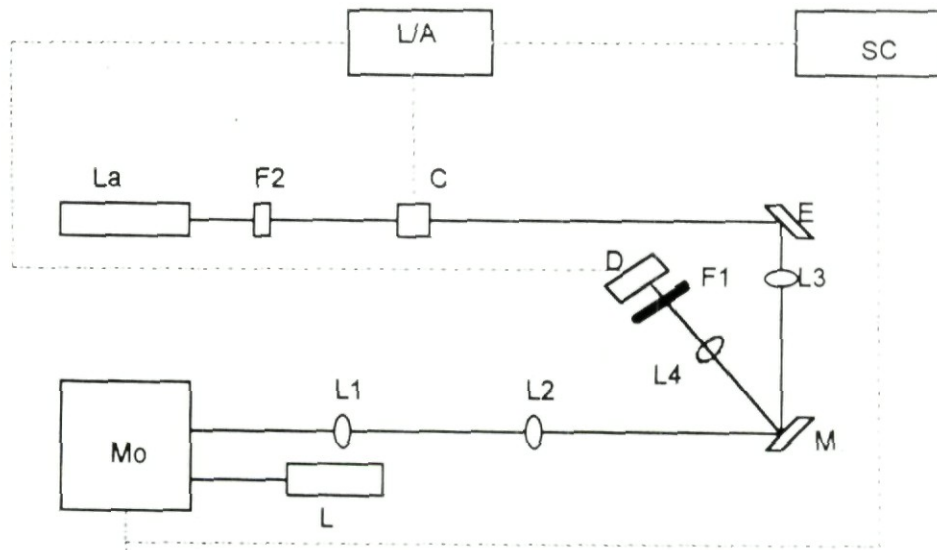
Una consecuencia directa es que las bandas de valencia y conducción varían en su forma al incidir luz. Esto es equivalente a que el potencial y el campo eléctrico intrínseco del material sobre y cerca de su superficie varían, y entonces la principal causa que produce el espectro de fotorreflectancia será la inyección electrón-hueco generada por el haz modulante, donde, la barrera superficial provocará un movimiento en sentido opuesto de los electrones con los huecos ocasionando que se separen espacialmente originándose un campo eléctrico adicional en la barrera de potencial.

Algo similar (situación física) ocurre con la técnica de ERM y al igual que en la de FRM no se necesita algún arreglo experimental complicado.

3.2.- ARREGLO EXPERIMENTAL

a).- Fotorreflectancia:

En la siguiente figura se muestra el arreglo experimental utilizado para realizar las mediciones de fotorreflectancia modulada:



L=Lámpara, Mo=Monocromador, L1,L2,L3,L4=Lentes, M=Muestra,

E=Espejo, F1=Filtro (CuS), D=Detector, C=Chopper, F2=Filtro interferencial,

La= Láser (HeN 20 μ W), L/A=Lock-in/amplificador, SC=Sistema de Cómputo.

Fig.9. Arreglo experimental utilizado para medir la fotorreflectancia modulada en el $(GaAs)_{(1-X)}(Si_2)_X$

La lámpara L de Argón (Arc Lamp Supply, LPS-220, Photon Technology International) emite luz blanca hacia el monocromador Mo (Sciencetech-model 9040 HR),

el cual la descompone en todo el espectro y sintoniza la longitud de onda λ que deseamos hacer llegar a la muestra M. El haz proveniente de Mo es recolectado por las dos lentes, L1 y L2, para garantizar una buena convergencia sobre la superficie de M.

Por otro lado, el sistema láser La (Helium-Neon/ 20 mW, model 1135, uniphase) produce el haz de modulación el cual va a pasar a través de un filtro interferencial, para evitar el paso de cualquier haz de luz con λ diferente a la del láser, después se obstruye periódicamente su paso con cierta frecuencia mediante un chopper C (Princeton Applied Research- model 125A), el haz de modulación continuará hasta llegar a un espejo que lo refleja en dirección a M; y para garantizar que éste incida en la misma región que el haz del monocromador hacemos uso de una lente L3 convergente. De este modo se logra que M fotorrefleje con una intensidad $I + \Delta I$. Tal radiación luminosa se recolecta con la ayuda de la lente L4 y se hace pasar a través de un filtro F de CuS para evitar que la radiación del láser llegue junto con el haz $I + \Delta I$ al detector D.

El detector, al recibir la radiación de intensidad $I + \Delta I$, manda una señal en forma de corriente eléctrica al Lock-in L/A (SR510 Lock-in amplifiel Stanfor Research Systems), el cual de acuerdo a la señal de referencia del chopper actuará como un amplificador de banda estrecha alrededor de dicha frecuencia (siendo el incremento ΔR periódico con esta misma frecuencia y amplificado preferencialmente por el Lock-in. Por otro lado, R no es amplificado por ser una señal de D.C.) y hará llegar la información al sistema de cómputo para registrar y graficar los datos obtenidos.

En este trabajo se realiza la fotorreflectancia en función de la temperatura, para lo cual se colocó a las muestras sobre un dedo frío refrigerado por un sistema APD-Cryogenics HC-2. La temperatura es controlada con un dispositivo Scientific Instruments Inc. 9600-5, Thermocouple. El rango de temperatura en el que se trabajó fue de 10 a 300 con un incremento de 10 en 10 grados Kelvin.

Cuando se baja la temperatura para analizar la muestra es necesario que esta se encuentre en un ambiente de vacío mínimo de 1×10^{-2} mbar para evitar la condensación de las moléculas de agua sobre la muestra lo cual evita una buena incidencia de los haces de luz sobre la superficie a estudiar. Para ello se utilizó un sistema de vacío Leybold PT50.

b).- Electrorreflectancia:

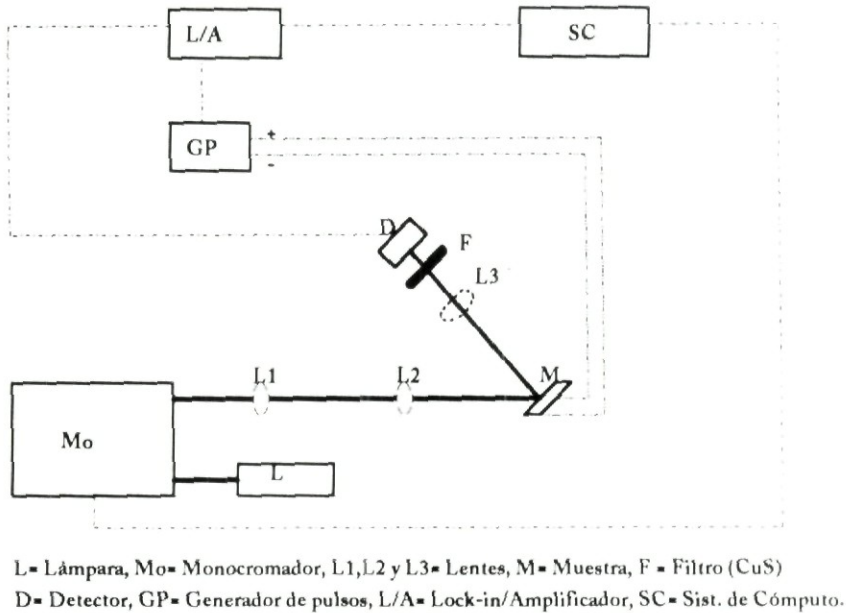
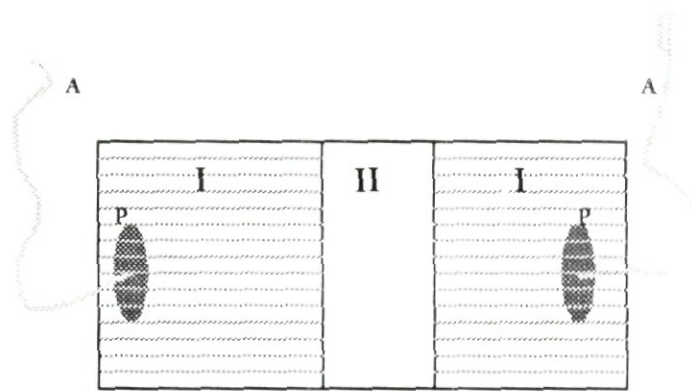


Fig.10. Arreglo experimental utilizado para medir la electrorreflectancia modulada en el $(\text{GaAs})_{(1-X)}(\text{Si}_2)_X$.

En la figura anterior se muestra el arreglo experimental utilizado para realizar las mediciones de electrorreflectancia modulada. Al igual que en el de fotorreflectancia, L, Mo, L1, L2, L3, F, D, L/A y SC tienen la misma función.

La gran diferencia con la técnica anterior es que ahora ya no se utiliza como agente modulante un haz láser, sino que se le aplica un campo eléctrico a la muestra para modular al haz reflejado. El campo eléctrico se le aplica a la muestra mediante dos contactos puestos sobre su superficie como se puede observar en la siguiente figura:



I= Zona evaporada con Au, II= Zona limpia, P= Contactos , A= Alambres de Au.

Fig. 11. Contactos sobre una muestra de $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ para realizar medidas de electroreflectancia.

Sobre la superficie de cada muestra se realizó una evaporación de Au (zona I) depositándose una capa delgada de tal forma que fuera transparente y permitiera el paso de la luz hasta donde empezara el $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ esto se hizo con el fin de poder obtener una barrera del tipo Schottky¹². La zona marcada como II no tiene evaporación alguna (zona limpia). Sobre el Au se depositaron los contactos utilizando pintura de plata para fijar cada uno de los alambres de Au mediante los cuales se pudo aplicar el campo eléctrico ($5 V_{pp}$) a la muestra mediante un generador de pulsos (funciones): Elenco (function generator), model GFG-8016G.

Al igual que en el dispositivo de fotorreflectancia la muestra se colocó sobre un dedo frío para poder obtener la reflectancia modulada generada por el campo eléctrico pero en función de la temperatura desde 10 hasta 300 grados Kelvin con incrementos de 10 en 10.

En este dispositivo se utilizó la misma instrumentación (controles) que en el anterior.

4.1- ESPECTROS.

4.1.1- Energía vs $\Delta R/R$ por muestra en función de T

Como se ha mencionado anteriormente, en este trabajo se utilizó la técnica de fotorreflectancia y electrorreflectancia modulada a campo bajo para obtener E_1 y $E_1 + \Delta_1$ en función de la temperatura (de 10 a 300 K), del compuesto ternario $(GaAs)_{(1-X)}(Si_2)_X$ para diferentes valores de X.

La forma de los espectros obtenidos experimentalmente son los que se muestran a continuación:

a)- X=0, GaAs. Como se muestra en la gráfica, la posición del espectro se va corriendo hacia una de menor energía de acuerdo al aumento de la temperatura, lo que sugiere (de forma intuitiva) que el valor de E_1 y $E_1 + \Delta_1$ también va disminuyendo

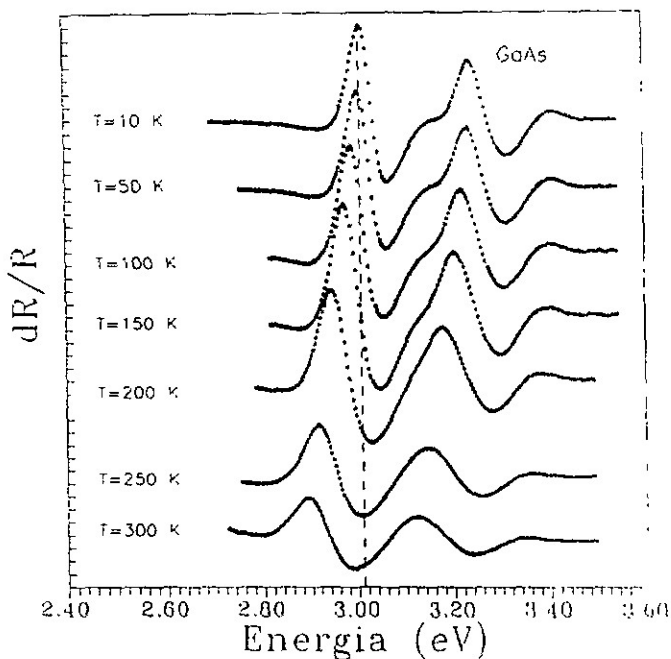


Fig 12. Energía vs $\Delta R/R$ para el GaAs en función de T.

En el eje de las abscisas se tiene la energía en eV y en el de las ordenadas se toma a $\Delta R/R$. En esta gráfica como en las demás que siguen el cero de cada espectro con respecto al eje de $\Delta R/R$ no es la real (se han desplazado a proposito), ya que se han colocado de esta forma para poder notar el corrimiento real de acuerdo a cada temperatura que se ha elegido para ser presentado como ejemplo, de lo contrario sería, relativamente hablando, imposible de poder apreciar.

Notemos que estos espectros están los suficientemente "limpios" de ruido como para suponer que nuestro arreglo experimental se encuentra en optimas condiciones (de alineación óptica, sin fluctuaciones en la potencia de la lámpara de iluminación, láser, detector, lock-in, etc.). Estos espectros se tomaron como referencia para optimizar nuestro dispositivo experimental para las demás mediciones referentes a cada muestra.

b)- $X=0.01$, $(GaAs)_{(0.99)}(Si_2)_{(0.01)}$ Al igual que en la muestra anterior, el comportamiento de los espectros es irse corriendo hacia bajas energías conforme aumenta el valor de la temperatura T.

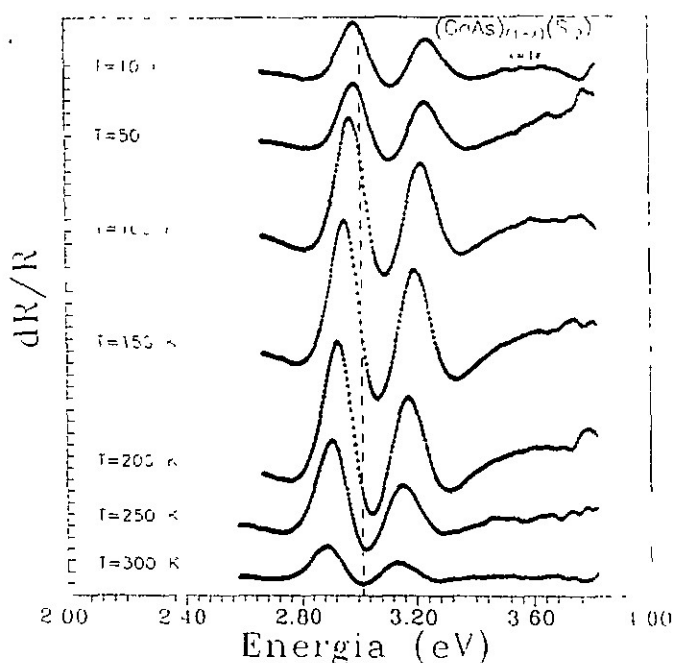


Fig 13 Energía vs $\Delta R/R$ para $(GaAs)_{(0.99)}(Si_2)_{(0.01)}$ en función de T.

A diferencia del conjunto de espectros mostrados para $X=0$, estos empiezan a presentar un poco de ruido al final del espectro (mayor energía) pero esto no implica que

nuestro dispositivo experimental empiece a fallar, sino que la respuesta es que ahora el Si empieza a hacer "acto de presencia" como se puede ver en la forma de cada espectro al ser comparado con los del conjunto anterior siguen apareciendo dos de los tres máximos relativos en la curva, y el tercero se ha suavizado completamente a tal grado que ha desaparecido en su totalidad ocasionando que uno de los mínimos casi desaparezca y también el "hombro" que antes se apreciaba a un costado del segundo de los picos ha desaparecido por completo.

El ruido que aparece al final de cada espectro no es significativo ya que en esa región no se encuentra E_1 ni $E_1 + \Delta_1$, además de que tampoco "compite" con la señal registrada (magnitud de $\Delta R / R$).

c)- $X=0.04$, $(GaAs)_{(0.96)}(Si_2)_{(0.04)}$. Sigue apareciendo un corrimiento hacia bajas energías conforme aumenta T.

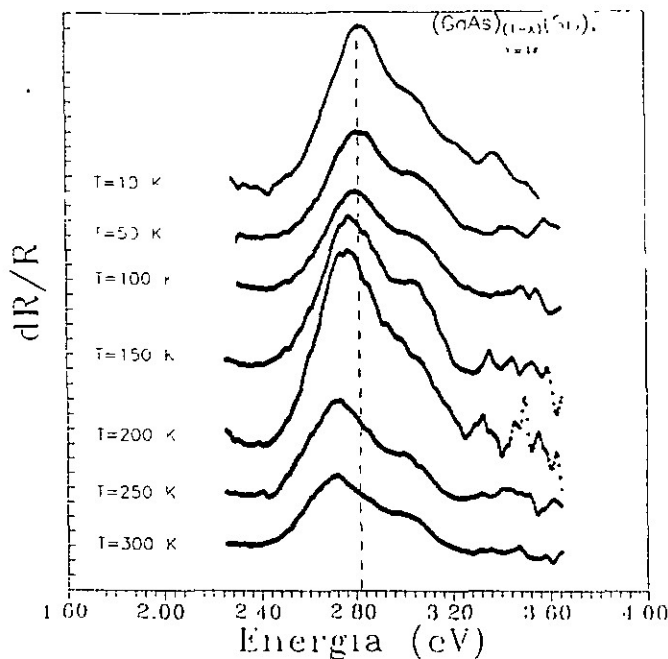


Fig 14 Energía vs $\Delta R / R$ para $(GaAs)_{(0.96)}(Si_2)_{(0.04)}$ en función de T

El ruido empieza a ser ligeramente mas grande pero sin afectar significativamente la medición de $\Delta R / R$. Ahora los dos picos dan una apariencia de haberse juntado mucho mas que en la muestra anterior a tal grado que el mínimo que los separaba casi ha desaparecido,

pero aún se nota el pico de menor magnitud en forma de hombro en el lado de altas energías.

d)- $X=0.27$, $(GaAs)_{(0.73)}(Si_2)_{(0.27)}$. El corrimiento a bajas energías de los espectros sigue siendo evidente de acuerdo al aumento de T.

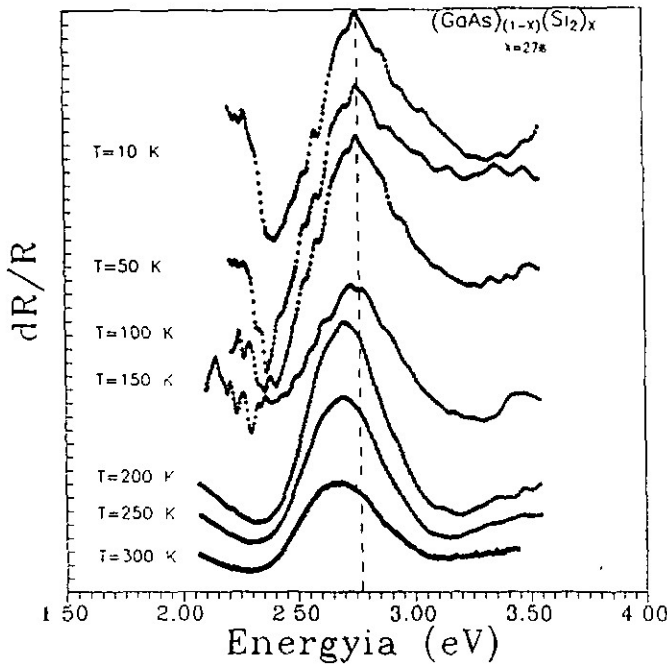


Fig 15. Energía vs $\Delta R / R$ para $(GaAs)_{(0.73)}(Si_2)_{(0.27)}$ en función de T.

Ahora el segundo pico ha desaparecido totalmente. La aparición más notoria del ruido es debido a la mayor concentración de Si y a que en esta muestra se terminó de obtener los espectros de reflectividad por medio de fotorreflectancia.

4.1.2 - Energía vs $\Delta R/R$ para los diferentes valores de X a una determinada T.

El objetivo primordial de esta parte es mostrar la forma de los espectros para cada X de forma conjunta para una T determinada, por ejemplo:

1)- T=10 K. Aquí se puede notar que la forma del espectro cambia y a la vez aparece un corrimiento hacia bajas energías conforme aumenta el valor de X.

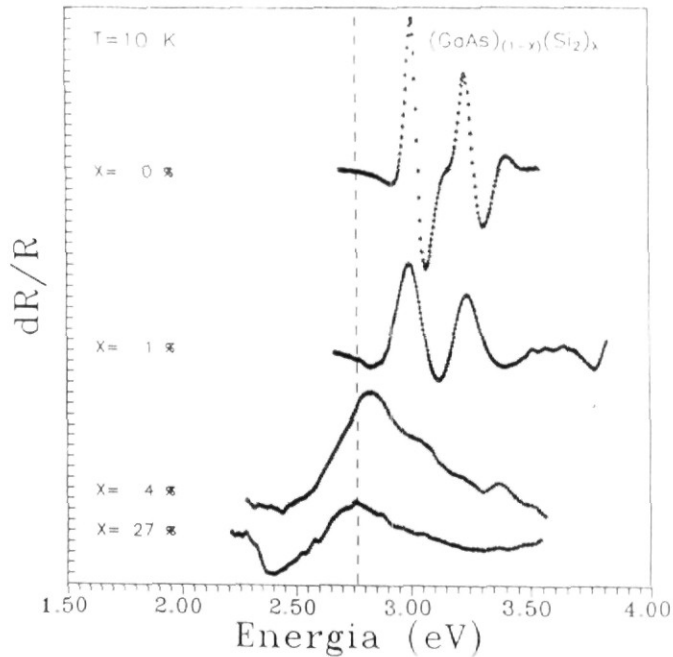


Fig.16. Energía vs $\Delta R/R$ para $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ a diferentes valores de X en T=10 K.

En $X=0$ se tienen tres picos y un pequeño "hombro" entre el más alto y el que le sigue de tamaño, en $X=0.01$ desaparece el hombro y el tercer pico, surge de forma más notoria un poco de ruido. En $X=0.04$ el segundo pico deja de aparecer de forma clara como en las anteriores y el mínimo que lo separa del primer pico desaparece. En $X=0.27$, relativamente hablando, sólo hay un pico.

2)- $T=100$ K. Aparece de nuevo el corrimiento hacia bajas energías de acuerdo al valor creciente de X y se hace muy notorio (al igual que en la figura anterior) el cambio de forma del espectro.

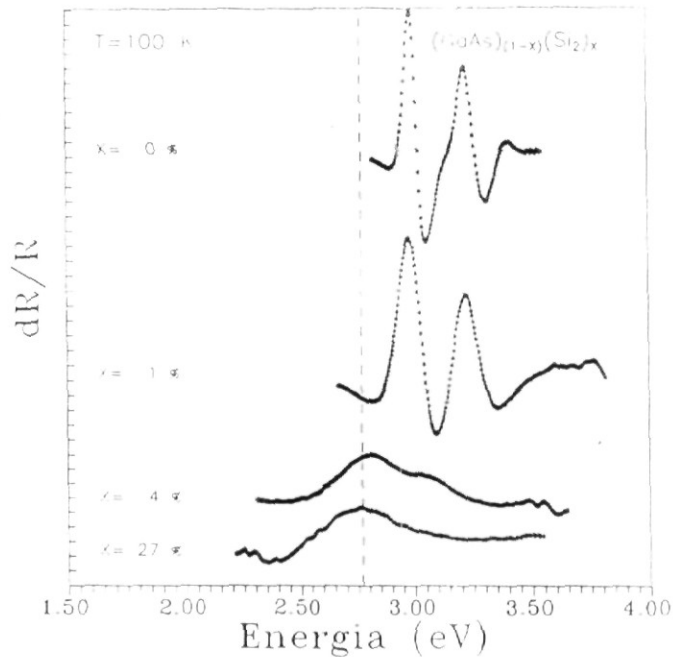


Fig.17. Energia vs $\Delta R / R$ para $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ a diferentes valores de X en $T=100$ K.

3)- T=200 K. El corrimiento a bajas energías sigue siendo evidente. Ahora la forma del espectro en X=0 y X=0.01 se parecen mucho más, esto es debido a la temperatura en que se obtuvo dichos espectros.

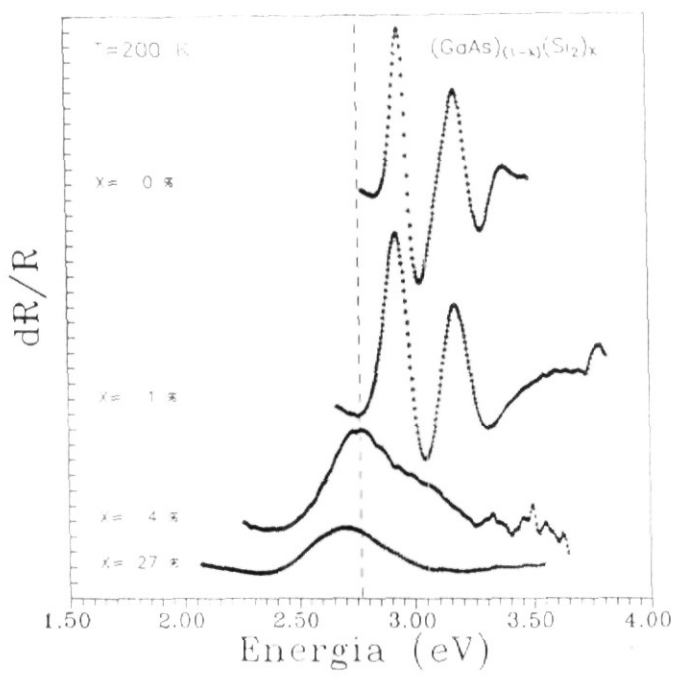


Fig.18. Energía vs $\Delta R / R$ para $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ a diferentes valores de X en T=200 K.

4)- T=300 K. De nuevo, conforme aumenta el valor de T sigue apareciendo un corrimiento hacia bajas energías y la forma de los espectros de X=0 y X=0.01 se parecen en su forma. En X=0.04 el segundo pico ya no se percibe claramente y en X=0.27 desaparece.

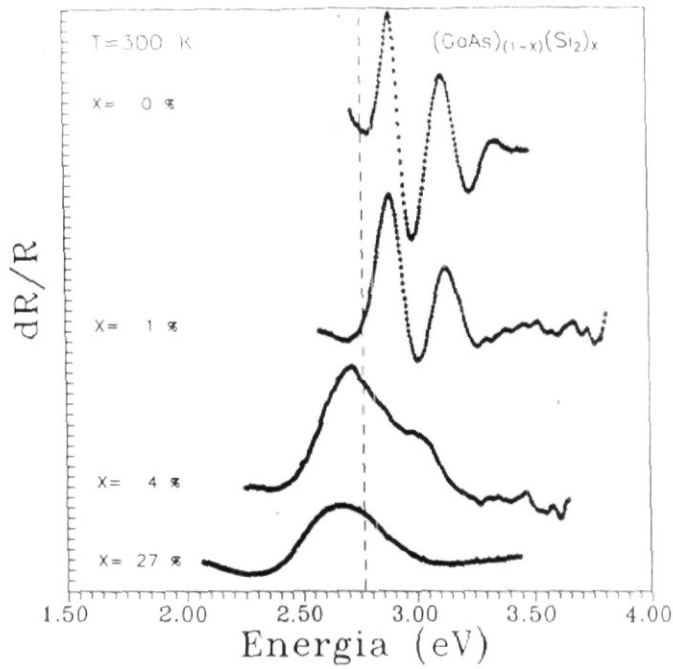


Fig.19. Energía vs $\Delta R / R$ para $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ a diferentes valores de X en $T=300$ K.

4.1.3 - Transición de la energía E_1 y $E_1+\Delta_1$ en función de la temperatura.

Para poder obtener el comportamiento (gráficamente) de E_1 y $E_1+\Delta_1$ en función de la temperatura, los espectros de fotorreflectancia obtenidos de forma experimental se ajustaron visualmente con ayuda de la ecuación (34), donde C es real.

Si ahora hacemos que:

$$(E - E_g - i\Gamma)^m = (re^{i\Phi})^m = r^m e^{im\Phi}$$

donde

$$r = \left[(E - E_g)^2 + \Gamma^2 \right]^{1/2} \quad \text{y} \quad \Phi = \arctan g(\Gamma / (E - E_g))$$

entonces podemos re escribir la ecuación (34), esto es:

$$\frac{\Delta R}{R} = \text{Re} \left[C r^m e^{i(\theta+m\Phi)} \right] = C \cos(\theta+m\Phi) \left[(E - E_g)^2 + \Gamma^2 \right]^{1/2} \quad (35)$$

El ajuste (visual) se realiza dando valores a las variables E_g , Γ , θ y C para cada espectro obtenido.

De todo esto se obtuvo la siguiente gráfica general:

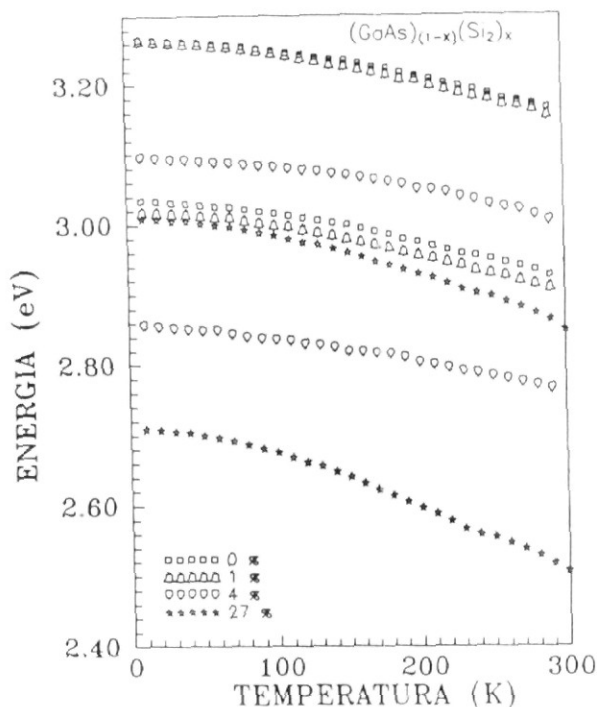


Fig 20. Muestra conjunta del resultado experimental de la variación en la banda prohibida E_1 y $E_1+\Delta_1$ como función de la temperatura del $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ para los diferentes valores de X .

Para cada una de las muestras (diferentes valores de X) el valor de E_1 y $E_1+\Delta_1$ (valor de E_g) va disminuyendo gradualmente conforme aumenta la temperatura. En el siguiente cuadro se registran los valores de cada energía en 10 K y 300K para mostrar el cambio que sufre.

X	10 K		300 K	
	E_1	$E_1+\Delta_1$	E_1	$E_1+\Delta_1$
0	3.0340	3.2663	2.9270	3.1660
1	3.0175	3.2640	2.9100	3.1550
4	2.8570	3.0955	2.7650	3.0050
27	2.7090	3.0085	2.5070	2.8500

La diferencia (promedio), como se ve en la gráfica, de E_1 con $E_1+\Delta_1$ para $x=0$ en cada valor de T es ligeramente menor a la que se presenta en $x=1$ y va aumentando conforme crece el valor de x .

4.2- ANÁLISIS DE RESULTADOS.

Después de haber obtenido el ajuste visual para cada espectro (30 espectros para cada muestra) y obtener el comportamiento cualitativo de E_1 y $E_1+\Delta_1$ con la temperatura para cada muestra (como se hace notar en la figura 20), se utilizó un programa de computadora para realizar el ajuste matemático de los parámetros obtenidos anteriormente con ayuda de la ecuación (35). Dicho ajuste matemático se realizó por el método SIMPLEX²³ y de ahí poder obtener los valores más aproximados de E_1 y $E_1+\Delta_1$ para cada muestra, como se ve en la siguiente tabla:

X	E_1 [eV]	Error Fraccional	$E_1+\Delta_1$ [eV]	Error fraccional
0	3.0339	9×10^{-7}	3.2674	1×10^{-6}
0.01	3.0182	1×10^{-6}	3.2641	1×10^{-6}
0.04	2.8528	1×10^{-6}	3.0960	1×10^{-6}
0.27	2.7411	1×10^{-6}	3.0478	1×10^{-6}

Para saber que tan buenos fueron estos valores obtenidos se utilizó la fórmula de Varshni^{24,25}:

$$E_g(T) = E_0 - \frac{\alpha T^2}{(\Theta + T)} \quad (36)$$

ya que con esta ecuación se tiene una mejor aproximación (Funcional) al comportamiento de la energía de la banda prohibida con la temperatura. Donde para nuestro caso, E_0 es el valor de E_1 ó de $E_1+\Delta_1$ según sea el caso, α es el coeficiente de variación de la banda con la temperatura T y Θ es la temperatura de Debye.

Con todo esto se obtuvieron las siguientes gráficas:

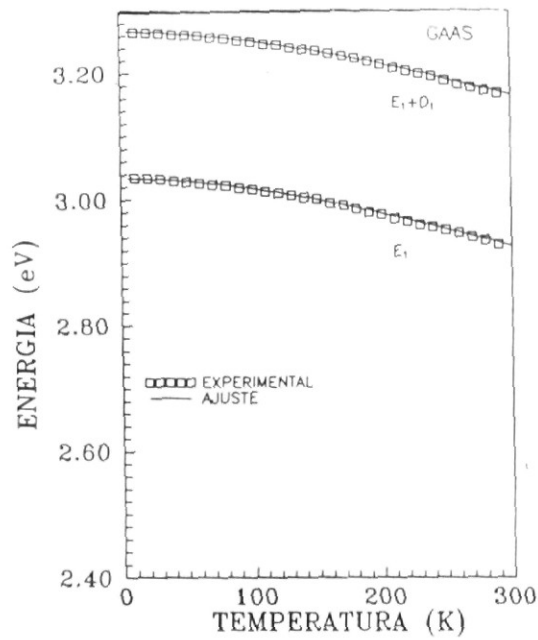


Fig.21. Resultado experimental de la variación en la banda prohibida E_1 y $E_1+\Delta_1$ como función de la temperatura y ajuste teórico de acuerdo a la fórmula de Varshni ($E_g=E_0-\alpha T^2/(\Theta+T)$) para el GaAs.

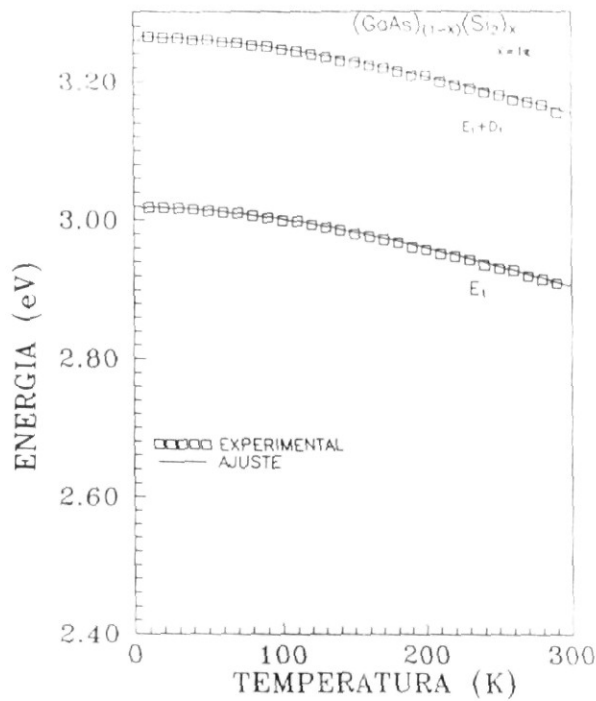


Fig 22. Resultado experimental de la variación en la banda prohibida E_1 y $E_1+\Delta_1$ como función de la temperatura y ajuste teórico de acuerdo a la fórmula de Varshni ($E_g=E_0-\alpha T^2/(\Theta+T)$) para el $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ con $X=0.01$.

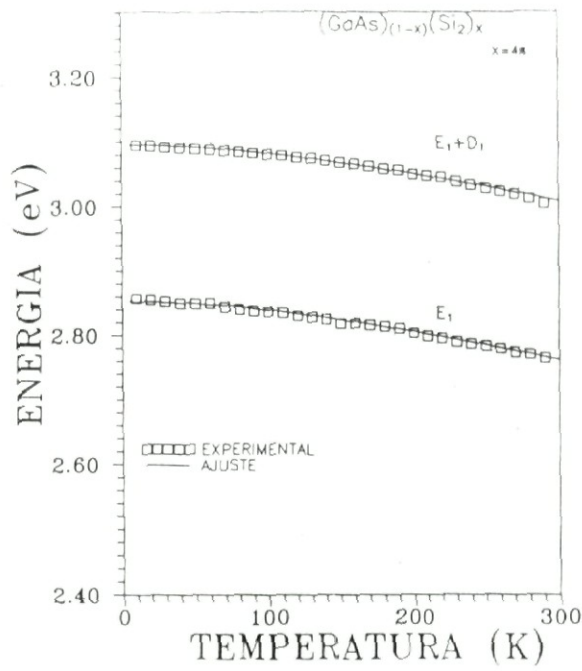


Fig 23. Resultado experimental de la variación en la banda prohibida E_1 y $E_1 + \Delta_1$ como función de la temperatura y ajuste teórico de acuerdo a la fórmula de Varshni ($E_g = E_0 - \alpha T^2 / (\Theta + T)$) para el $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ con $X=0.04$.

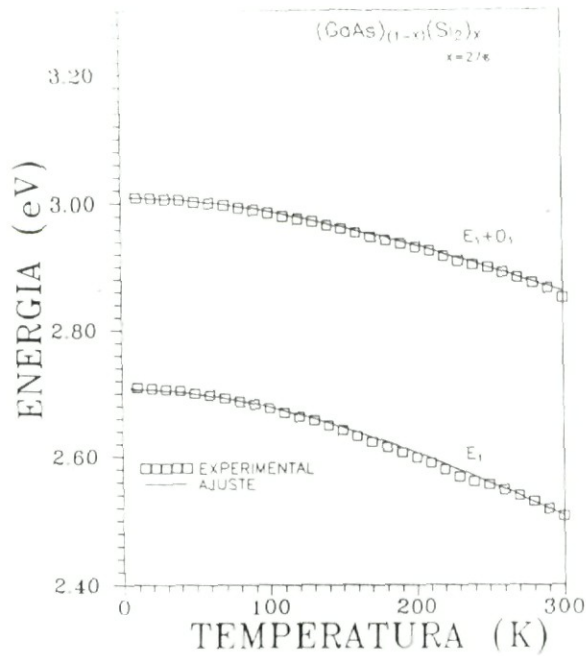


Fig 24. Resultado experimental de la variación en la banda prohibida E_1 y $E_1 + \Delta_1$ como función de la temperatura y ajuste teórico de acuerdo a la fórmula de Varshni ($E_g = E_0 - \alpha T^2 / (\Theta + T)$) para el $(GaAs)_{(1-x)}(Si_2)_x$ con $X=0.27$.

En la siguiente tabla se muestran los parámetros de ajuste de acuerdo a la fórmula de Varshni para cada valor de X:

X	E ₀ [eV]		α(10 ⁻⁴) [eV/K]		Θ [K]
	E ₁	E ₁ +Δ ₁	E ₁	E ₁ +Δ ₁	
0	3.0339	3.2674	7.9634	7.5992	344
0.01	3.0182	3.2641	8.2890	8.1264	346.92
0.04	2.8528	3.0960	6.8083	6.4932	355.68
0.27	2.7411	3.0478	0.1886	0.1360	422.84

El error fraccional estimado para cada energía es del orden de 1x10⁻⁶ y para cada valor de α de 1x10⁻⁵. Cabe mencionar que el valor de Θ se tomó del obtenido en forma experimental ¹⁰.

De los datos de la tabla anterior se obtiene la forma funcional de la energía con la temperatura para cada muestra, esto es:

1) X=0

$$E_1: E_g(T) = 3.0339 - (7.9634 \times 10^{-4})T^2 / (344 + T).$$

$$E_1 + \Delta_1: E_g(T) = 3.2674 - (7.5992 \times 10^{-4})T^2 / (344 + T).$$

2) X=0.01

$$E_1: E_g(T) = 3.0182 - (8.2890 \times 10^{-4})T^2 / (346.92 + T).$$

$$E_1 + \Delta_1: E_g(T) = 3.2641 - (8.1264 \times 10^{-4})T^2 / (346.92 + T).$$

3) $X=0.04$

$$E_1: E_g(T) = 2.8528 - (6.8083 \times 10^{-4})T^2 / (355.68 + T).$$

$$E_1 + \Delta_1: E_g(T) = 3.0960 - (6.4932 \times 10^{-4})T^2 / (355.68 + T).$$

4) $X=0.27$

$$E_1: E_g(T) = 2.7411 - (0.1886 \times 10^{-4})T^2 / (422.84 + T).$$

$$E_1 + \Delta_1: E_g(T) = 3.0478 - (0.1360 \times 10^{-4})T^2 / (422.84 + T).$$

En la siguiente gráfica se muestra cualitativamente una extrapolación del comportamiento de las energías E_0 , $E_0 + \Delta_0$, E_1 , $E_1 + \Delta_1$ y E_2 desde el GaAs al Si para el compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-X)}(\text{Si}_2)_X$.

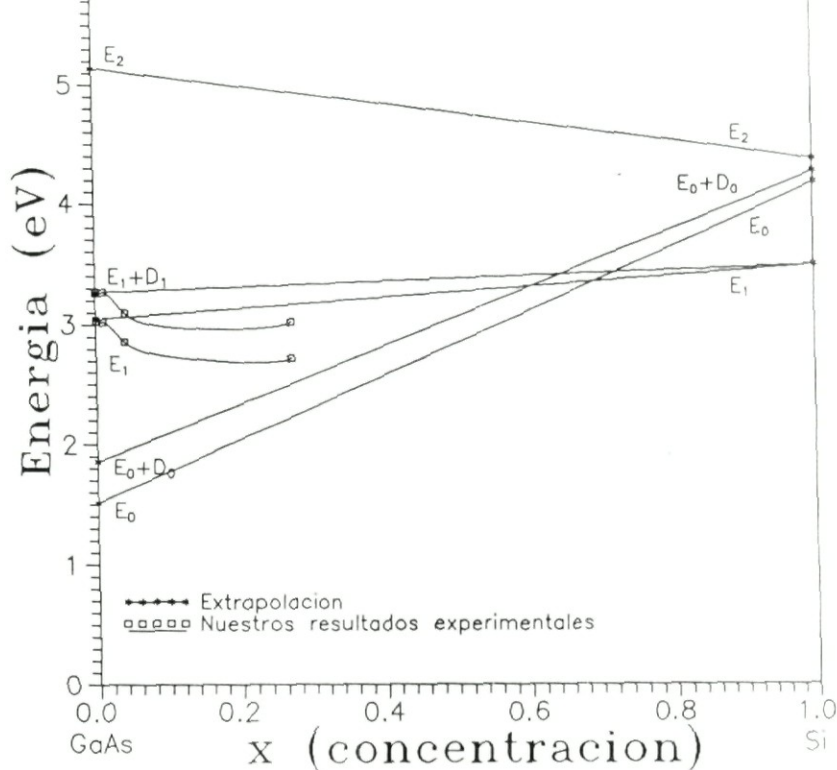


Fig.25. Extrapolación del comportamiento de las energías E_0 , $E_0+\Delta_0$, E_1 , $E_1+\Delta_1$ y E_2 para el compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ a bajas temperaturas (10 K).

Para E_0 y $E_0+\Delta_0$ su valor va aumentando conforme aumenta x , sin embargo el valor de Δ_0 va disminuyendo gradualmente desde 0.341 eV para el GaAs asta 0.045 eV para el Si. Por otro lado la magnitud de E_2 disminuye de 5.137 eV (GaAs) a 4.33 eV (Si) al momento que x crece.

La magnitud de E_1 crece de 3.043 eV (GaAs) a 3.46 eV (Si) de acuerdo al aumento de x , para $E_1+\Delta_1$ no podemos decir gran cosa ya que se conoce su valor para el GaAs pero no se ha podido determinar con precisión para el Si. Sin embargo, de acuerdo a los resultados experimentales obtenidos nos damos cuenta que la forma de línea obtenida de la extrapolación para E_1 está lejos de parecerse a la realidad física. También se obtiene la forma para $E_1+\Delta_1$. Aparentemente el valor de Δ_1 va aumentando conforme crece x .

De acuerdo a los resultados experimentales obtenidos para E_1 , $E_1+\Delta_1$ del compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ nos damos cuenta que al ir aumentando paulatinamente el valor de x desde 0 hasta ≈ 1 podríamos predecir con cierto margen de error el valor de $E_1+\Delta_1$ para el Si.

4.3- CONCLUSIONES.

Como se mencionó anteriormente, las técnicas de fotorreflectancia y electrorreflectancia modulada tienen como característica principal el que poseen alta sensibilidad y una gran resolución.

Por otro lado, la situación física mediante la cual el haz modulador provoca que se modulen las propiedades ópticas de la muestra y en consecuencia que se module el haz reflejado, no se ha podido determinar en su totalidad, para lo cual se mencionan algunos de los mecanismos que pueden originar la reflectancia modulada, esto es:

- a).- Efectos térmicos.
- b).- Variaciones del ancho en la barrera de potencial.
- c).- Dispersión de excitones.

Los efectos térmicos podrían ser de alguna forma los causantes de que se termo-modulen las propiedades ópticas de la muestra pero debido a la forma de línea que se registra experimentalmente podemos concluir que ésta no se hace presente ya que es diferente a la de una de termo-modulación. Sin embargo cuando se aplica un campo electromagnético sobre la superficie de la muestra se tiene que, muy cerca de la superficie del cristal, el campo eléctrico se ve modificado debido a que se provoca un flujo de pares electrón-hueco generado por el haz modulante, de donde podemos deducir que ésta es la principal situación física que produce el espectro de fotorreflectancia modulada (ya que se produce un campo eléctrico adicional en la barrera de potencial). Por otro lado, los fotones incidentes sobre la superficie de la muestra pueden tener la energía necesaria para actuar sobre la de los excitones y provocar que estos se dispersen ocasionando que la densidad de portadores varíe y de esta forma contribuir a la modulación del haz reflejado.

Mediante las técnicas de electrorreflectancia y fotorreflectancia modulada se ha podido determinar el valor de E_1 y $E_1 + \Delta_1$ donde Δ_1 es la componente de interacción espín-orbita del compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-x)}(\text{Si}_2)_x$ en muestras con valores de $x = 0, 0.01, 0.04$ y 0.27 .

Se ha determinado el comportamiento de E_1 y $E_1 + \Delta_1$ en función de la temperatura en el rango de 10 A 300 grados Kelvin para diferentes valores de "X" de dicho compuesto ternario.

Para determinar la variación de la banda prohibida como función de la temperatura la " formula de Varshni " es una excelente aproximación, ya que se utilizan parámetros naturales que tienen significado físico. En particular se han utilizado temperaturas de Debye extrapoladas linealmente entre la del GaAs y la del Si.

Se observa que aún al acercarse (en concentración de Si) a la transición de red zinc-blenda a diamante ($X \approx 0.35$) el parámetro Δ_1 preserva una magnitud similar a la del GaAs en contraste con la del Si, dicha magnitud es muy pequeña y no se encuentra reportada en la literatura.

La forma funcional de E_1 y $E_1 + \Delta_1$ con respecto a la temperatura obtenidas en este trabajo para el compuesto ternario $(\text{GaAs})_{(1-X)}(\text{Si}_2)_X$ no se encuentran reportadas en la literatura especializada por lo cual se dan a conocer por primera vez mediante este trabajo de investigación.

PERSPECTIVAS DE ESTE TRABAJO:

- Sirve como motivación para seguir estudiando este material semiconductor ya que es de gran importancia tecnológica.
- Se seguirán analizando más muestras con diferentes concentraciones de Si hasta pasar la concentración de cambio de fase ($\approx 37\%$).
- Mediante este tipo de caracterización se puede obtener mucha información necesaria para el cálculo de estructura de bandas electrónicas.
- Es interesante también realizar las mediciones de E_0 y $E_0 + \Delta_0$ para tener una caracterización mas completa de este material.

REFERENCIAS.

- 1.- D. H. Mei, Y. W. Kim, D. Lubben, I. M. Robertson, and J. E. Greene, Appl. Phys. Lett., **55** (25), 2649 (1989).
- 2.- L. T. Romano, I. M. Robertson, J. E. Greene, and J. E. Sundgren. Phys. Rev. B, **36** (14), 7523 (1987-I).
- 3.- Y. W. Kim, D.H. Mei, D. Lubben, I. Robertson, and J. E. Greene, J. Appl. Phys., **76** (3), 1644 (1994).
- 4.- M. D. Pashley and K.W. Haberern, Phys. Rev. Lett., **67**(19), 2697 (1991).
- 5.- M. D. Pashley, K.W. Haberern and R. M. Feenstra, J. Vac. Sci. Technol. B, **10**(4) 1874 (Jul/Aug 1992).
- 6.- M. D. Pashley and K.W. Haberern, Ultramicroscopy, 42-44 (1992), 1281-1287.
- 7.- M. D. Pashley, K.W. Haberern, R. M. Feenstra and P. D. Kirchner, Phys. Rev. B, **48**(7), 4612 (1993-I).
- 8.- A. Lastras-Martínez, G. Rodriguez-Pedroza, D. H. Mei, B. Kramer, D. Lubben and J. E. Greene, Phys. Rev. B, **43** (17), 14035 (1991-I).
- 9.- C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics", John Wiley and Sons, 5th edition (1985).
- 10.- Landolt-Börnstein, "Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology", Group III, Vol. 17 (semiconductors), subvolume a.
- 11.- M. Cardona, "Modulation Spectroscopy", Academic Press (1969).
- 12.- G. Burns, "Solid State Physics", Academic press, Inc. (1985).
- 13.- G. P. Agrawal and N. K. Dutta, "Long-Wavelength Semiconductor Lasers", Van Nostrand Reinhold Electrical / Computer Science and Engineering Series (1986).
- 14.- E. A. Stern, F. Ellis, K. Kim, L. Romano, S. I. Shah, and J. E. Greene, Phys. Rev. Lett., **54** (9), 905 (1985).
- 15.- J. E. Northrup and S. B. Zhang, Phys. Rev. B, **47** (11), 6791 (1993-I).
- 16.- J. Wang, T. A. Arias, J. D. Joannopoulos, G. W. Turner, and O. L. Alerhand, Phys. Rev. B, **47** (16), 10326 (1993-II).
- 17.- D. E. Aspnes, "Modulation Spectroscopy / Electric Field Effects on the Dielectric Function of Semiconductors", Handbook on Semiconductors, Vol 2 edited by M. Balkanski (1980).

- 18.- S. Hernando Ariza C., Tesis para doctorado en ciencias (Física) "Propiedades ópticas de soluciones solidas semiconductoras $(III-V)_{(1-x)}(IV_2)_x$ ", ESFM-IPN, México, D. F. (1988).
- 19.- M. Valentin Rodriguez S., Tesis para maestria en Ciencias (Física) "Determinación experimental del ancho de banda energético prohibido del $Al_xGa_{(1-x)}As$ con bajas concentraciones de aluminio", Instituto de Ciencias, Depto. de Física - UAP, Puebla, México (1988).
- 20.- Y. Petroff, in "Proceeding of the 13th International Conference on the physics of Semiconductors", Rome, edited by Fumi (North-Holland, Amsterdam, 1976).
- 21.- B. O. Seraphin and N. Bottka, Phys. Rev., **139**, A560 (1965).
- 22.- D. E. Aspnes and J. E. Rowe, Solid State Comm., **8**, 1145 (1970).
- 23.- M. S. Caceci and W. P. Cacheris, Byte, 340 (may 1984).
- 24.- Y. P. Varshni, Physica (Utrecht), **34**, 149 (1967).
- 25.- E. López-Cruz, Rev. Mexicana de Física, **37** (3), 495 (1991).
- 26.- D. E. Aspnes and A. A. Studna, Phys. Rev. B, **7**(10), 4605 (1973).

EX LIBRIS



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

No. DE REG.