



INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN  
COMUNICACIÓN OPTICA  
*Facultad de Ciencias*  
Universidad Autónoma de San Luis Potosí



Crecimiento Homoepitaxial de GaAs en superficies (631)

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIAS APLICADAS

PRESENTA

Francisco Javier Ramírez Arenas

ASESORES: Dr. Víctor Hugo Méndez García

Dr. Máximo López López

# Resumen

---

---

En los últimos años el interés por las Nanoestructuras y en particular por el estudio de los sistemas de baja dimensión ha aumentado considerablemente. Lo anterior se debe a que las investigaciones previas predicen un desempeño muy superior de los dispositivos basados en éstas estructuras en comparación con las actuales, las cuales se basan en sistemas de 2 dimensiones denominados pozos cuánticos. En lo que se refiere a los hilos cuánticos, se han realizado varios intentos para lograr un crecimiento exitoso y confinamiento a una dimensión. El principal reto es obtener hilos de dimensiones uniformes y densidad aprovechable. Muchas de las investigaciones previas sobre este tema involucran procesos de litografiado los cuales degradan o introducen defectos cristalinos en las interfaces, resultando no solo en estructuras poco aprovechables para dispositivos optoelectrónicos sino además resulta ser un método poco rentable. Otra alternativa, lo conforma el crecimiento sobre planos cristalográficos de altos índices. En este trabajo de tesis investigamos desde sus etapas iniciales la homoepitaxia de GaAs en el plano cristalográfico (631) con miras a la obtención de hilos cuánticos. Iniciamos con algunos cálculos teóricos concernientes al arreglo de los átomos en la superficie (631) así como su distribución de enlaces de las últimas capas. Posteriormente realizamos experimentos para indagar el efecto que tienen los ataques químicos en esta superficie y se compara con ataques en superficies más conocidas. Finalmente se presentan resultados concernientes a la homoepitaxia de GaAs en donde evaluamos la posibilidad de en un futuro cercano llegar a la realización de hilos cuánticos sobre esta superficie.

# Índice

---

<b>Capítulo 1</b>	<b>Introducción</b>	
1.1.	Propiedades del GaAs	1
1.2.	Sistemas de Baja Dimensionalidad	3
1.3.	Métodos de Síntesis de Nanoalambres Semiconductores	6
	1.3.1. Litografiado de Pozos	6
	1.3.2. Superficies Escalonadas	6
	1.3.3. Substratos Grabados	7
1.4.	Objetivo	8
<b>Capítulo 2</b>	<b>Sistemas Experimentales</b>	
2.1	La técnica de Epitaxia por Haces Moleculares (MBE)	10
	2.1.1 Generalidades del Sistema de MBE	11
	2.1.1.1 Formación de Capas Cristalinas	12
	2.1.1.2 Cámara de crecimiento	14
	2.1.1.3 Celdas Knudsen	16
2.2	Reflexión de Electrones Difractados de Alta Energía.	17
	2.2.1 Análisis Cinético	18
	2.2.2 Barras de la red recíproca	20
	2.2.3 Rectas y Anillos de Laue	21
	2.2.4 Distancia entre las Líneas	22
	2.2.5 Anillos de Laue	23
	2.2.6 Oscilaciones en Intensidad y sus Aplicaciones.	24
2.3	Microscopía por Fuerza Atómica	25
<b>Capítulo 3</b>	<b>Resultados y Discusión</b>	
3.1	Estudios Teóricos	28
	3.1.1 Análisis teórico del plano (631).	28
	3.1.1.1 Programa cristal de Zinblenda	28
	3.1.1.2 Cálculos en el Programa Cristal de Zinblenda	30
	3.1.1.3 Aplicación al plano (631).	36
3.2.	Estudios Experimentales	40
	3.2.1 Remoción química de óxidos nativos.	40
	3.2.2 Desorción térmica de Óxidos	44
	3.2.3 Homoepitaxia de GaAs(631)	46
	3.2.3.1 Crecimiento inicial	46
	3.2.3.2. Nucleación en función de la temperatura	49
<b>Capítulo 4</b>	<b>Conclusiones</b>	53

# Capítulo 1

---

## INTRODUCCION

Este trabajo está organizado de la siguiente manera: en este Capítulo se indican las propiedades ópticas, térmicas y mecánicas del GaAs, así como también se presenta una breve discusión de los sistemas de baja dimensión. En el Capítulo 2 describimos las cuestiones fundamentales de la técnica de crecimiento de epitaxia por haces moleculares (MBE del inglés, *molecular beam epitaxy*), la cual fue utilizada para el crecimiento de nuestras películas; así mismo se presentan los fundamentos de las técnicas de análisis utilizadas. En el Capítulo 3 se presentan y analizan los resultados de nuestro trabajo el cual consistió en estudiar la homoepitaxia de GaAs(631) comenzando con el análisis teórico del plano y posteriormente se discuten los resultados experimentales. Finalmente, en el Capítulo 4 se listan las conclusiones más relevantes del presente trabajo.

### 1.1 Propiedades del GaAs.

Los compuestos III-V formados de los elementos de los grupos IIIB y VB de la tabla periódica son los semiconductores más importantes para el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos y circuitos electrónicos integrados. La ventaja particular de estos compuestos radica en que proveen a los diseñadores de dispositivos de la posibilidad de modular en un amplio rango las energías prohibidas de las aleaciones obteniendo además altas movilidades eléctricas de forma tal que los materiales están disponibles con las propiedades exactas que se requieren. En la Figura 1-1 se grafican las energías de las bandas prohibidas en función de la constante de red para los compuestos III-V y II-VI más importantes, además del Si y Ge. Se han realizado extensos estudios sobre las propiedades de estos materiales<sup>[1][2][3][4]</sup> pero en particular, este trabajo, se centra en el estudio del crecimiento de GaAs. Así pues, nos detendremos a detallar un poco más las propiedades de este elemento.

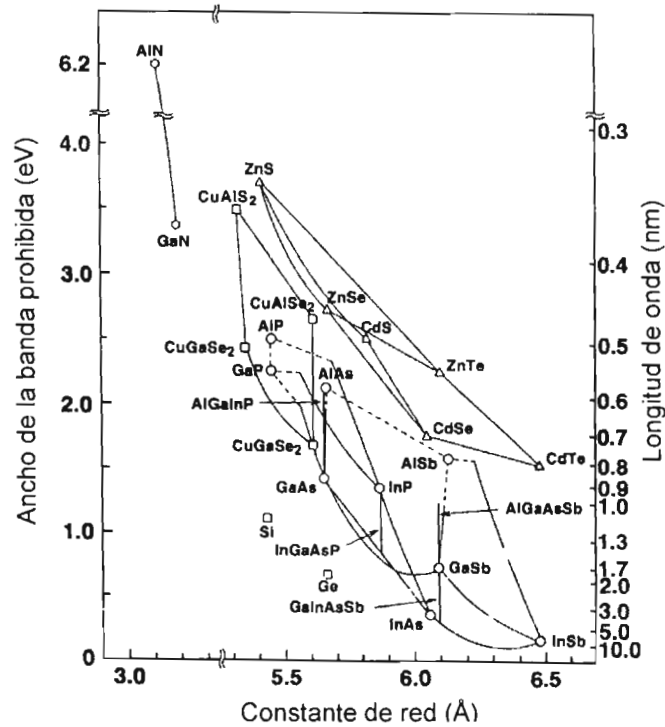


Figura 1-1. Ancho de la banda prohibida de algunos semiconductores vs. constante de red.

El GaAs es uno de los compuestos semiconductores más versátiles e útiles que existen debido a que sus propiedades químicas, mecánicas y ópticas proveen de una alta movilidad a los electrones. Los componentes de GaAs pueden operar en el rango de las frecuencias de microondas con un bajo consumo de potencia, mientras que los dispositivos de Si no lo hacen. A pesar de que su costo es más alto, esto es con respecto al Si, el GaAs es el material preferido para los circuitos integrados monolíticos de microonda (MMICs del inglés: *monolithic microwave integrated circuits*). Los substratos de GaAs son ampliamente utilizados en los teléfonos celulares, satélites, sistemas de radar y en varios dispositivos electrónicos. Además de esto, el GaAs es el material que más se utiliza en los láseres y LEDs. El amplio rango de las aplicaciones de estos dispositivos opto electrónicos basados en GaAs abarca las comunicaciones que hacen uso de fibra óptica, indicadores en algunos aparatos, automóviles, señales de tráfico y pantallas comerciales además de que se utilizan para almacenar/leer datos en discos compactos.

El GaAs tiene la estructura de la zinc blenda, que es la estructura típica de los semiconductores III-V, Figura 1-2. Su energía de banda prohibida directa es de 1.424 eV a 300K. Algunas otras propiedades del GaAs se resumen en la Tabla 1-1.

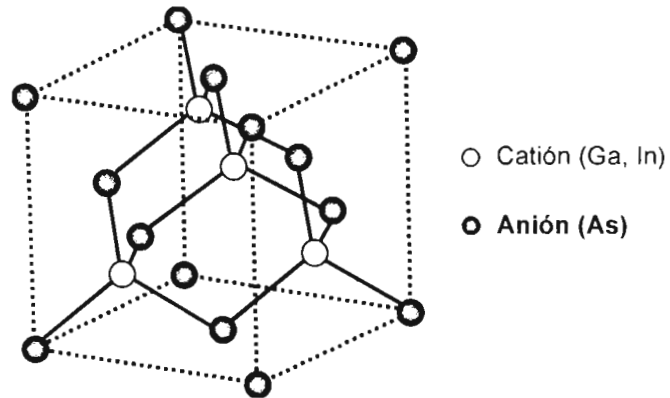


Figura 1-2. Estructura de la zinc blenda.

<i>Propiedades</i>	<i>GaAs</i>
<i>Átomos/cm<sup>3</sup></i>	4.42x10 <sup>22</sup>
<i>Estructura de cristal</i>	<b>Zinc blenda</b>
<i>E<sub>g</sub> (eV)</i>	1.424
<i>Constante de red (Å)</i>	5.6533
<i>Coefficiente de expansión térmica (K<sup>-1</sup>)</i>	6.86x10 <sup>-6</sup>
<i>Movilidad de electrones (cm<sup>2</sup>/V-s)</i>	8500
<i>Temperatura de fusión (K)</i>	1513

Tabla 1-1. Algunas propiedades del GaAs a 300 K.

## 1.2 Sistemas de baja Dimensionalidad.

La investigación de las nanoestructuras cuánticas de semiconductores se inició con el descubrimiento de superredes por Esaki y Tsu (1969,1970)<sup>[5]</sup>. Estos científicos observaron efectos cuánticos en las estructuras periódicas que consisten en alternar

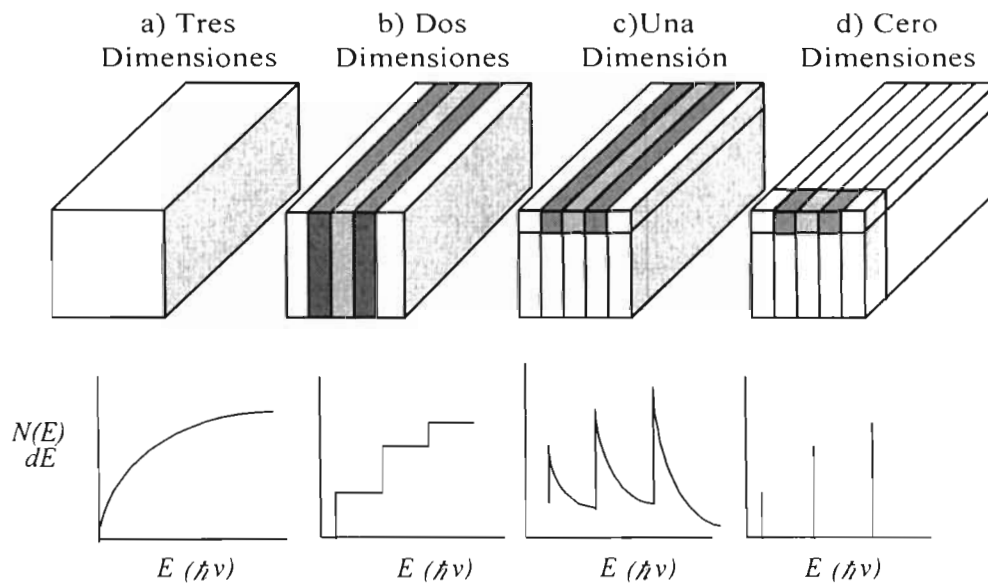
diferentes capas cuyo espesor era menor que la trayectoria libre media del electrón. Esta estructura periódica recibió el nombre de superred semiconductor y rápidamente se volvió el estándar para producir y diseñar multicapas de semiconductores con propiedades ópticas y electrónicas deseables<sup>[6]</sup>.

Los pozos cuánticos de semiconductores, en los cuales una película delgada semiconductor se coloca entre diferentes materiales vía heterouniones, confinan el movimiento del electrón en el plano bidimensional de la película delgada. Esta bidimensionalidad da lugar a nuevas propiedades ópticas no observadas en los materiales de bulto, tales como la absorción óptica y un espectro de ganancia característico de la densidad de estados de escalón<sup>[7]</sup>. Estas propiedades condujeron a una variedad de nuevos dispositivos ópticos: láseres de pozos cuánticos, moduladores ópticos de alta velocidad, interruptores ópticos, dispositivos bistables ópticos tales como los dispositivos de efecto electro-óptico auto generados (SEED's del inglés: *self-generated electro-optic effect devices*), etc. En particular, los láseres y moduladores de pozos cuánticos se han vuelto convencionales y ampliamente usados en sistemas de transmisión óptica y almacenamiento de datos<sup>[8]</sup>.

El reducir la dimensión del movimiento de los portadores libres resulta en la modificación de la densidad de estados (DOS del inglés: *density of states*). Con la densidad de estados podemos calcular el número máximo de portadores que pueden ocupar un rango de energía. En la Figura 1-3(a) se muestra la densidad de estados causada por el movimiento de los portadores en las direcciones  $x$ ,  $y$  y  $z$ , en la región activa de un láser de heteroestructura doble. Se puede ver que para una banda dada, ya sea la de conducción o la de valencia, la densidad de estados es pequeña cerca del borde de la banda y se incrementa cuando se incrementa la energía. En la Figura 1-3(b) se muestra que reduciendo el espesor de la capa activa al tamaño de la longitud de onda de De Broglie se obtiene una heteroestructura de pozos cuánticos. La densidad de estados correspondiente al restringir el movimiento de los portadores a las direcciones  $x$  y  $y$ , tiene forma de escalón ofreciendo una mejora sobre los láseres de heteroestructura doble. En los láseres de pozos cuánticos, el número de electrones y huecos de las bandas de conducción y de valencia es más grande cerca de los bordes. Es más, la energía de la transición óptica, por ejemplo, la frecuencia de la luz de salida, puede ser controlada por el espesor del pozo. La cuantización de los niveles

de energía también conlleva que las transiciones ópticas serán más agudas. Como resultado de estos efectos, se reduce significativamente la densidad de corriente umbral y su dependencia con la temperatura, además de que la longitud de onda de emisión es más corta.

Al limitar aún más el movimiento de los portadores, esto es, al restringir su movimiento en la dirección  $x$ , se obtienen los hilos cuánticos, Figura 1-3(c). En la Figura 1-4(d), se muestra el confinamiento de los portadores en las tres dimensiones que resulta en los puntos cuánticos<sup>[9]</sup>.



**Figura 1-3.** Densidad de estados al confinar el movimiento de los electrones.

Los puntos e hilos cuánticos semiconductores con suficientemente grande confinamiento de energía y distribución de tamaños muy uniforme tienen gran importancia desde el punto de vista de la física fundamental y en ingeniería de dispositivos. Sin embargo, las investigaciones actuales en esta área están limitados aún en el control de la distribución espacial y uniformidad de éstas nanoestructuras. En la siguiente sección describiremos algunos aproximaciones realizadas para sintetizar los nanoalambres.

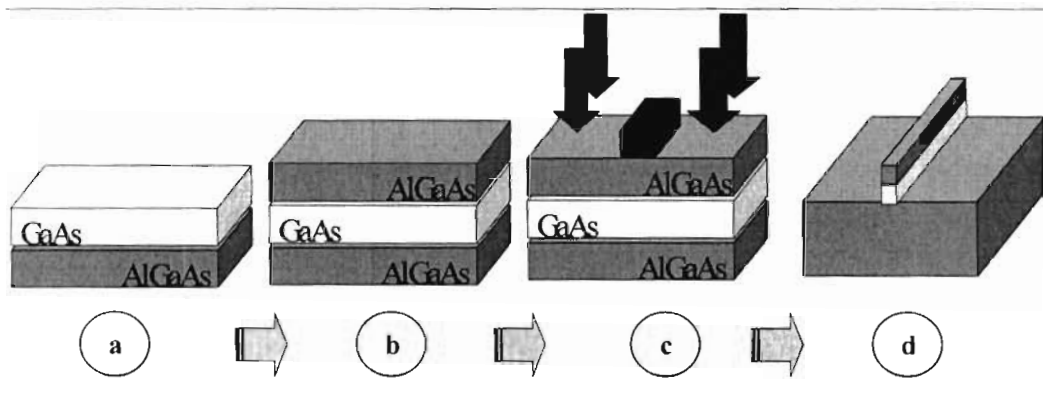


### 1.3. Métodos de Síntesis de Nanoalambres semiconductores.

#### 1.3.1. Litografiado de Pozos.

La Figura 1-4 esquematiza los pasos para la obtención de los nanoalambres por medio de éste método. Inicialmente se comienza con una capa de GaAs la cual se cubre con AlGaAs para formar un pozo cuántico. Así, los electrones son limitados a moverse en el plano formado por el GaAs, es decir se encuentran confinados a dos dimensiones. Posteriormente se coloca una máscara de ancho nanométrico para atacar parte del pozo cuántico. La remoción posterior del AlGaAs expuesto da como resultado una tira de dimensiones nanométricas, tal como se observa en la Figura 1-4(d).

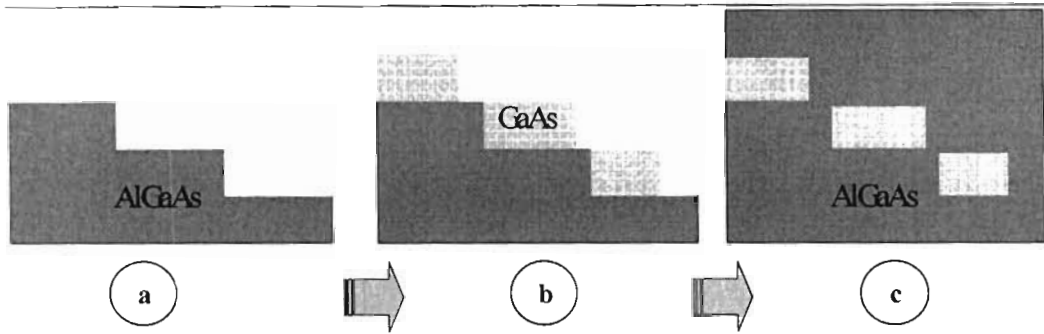
La principal desventaja de éste método es la degradación de las paredes laterales de los nanoalambres debido al daño que sufren durante el ataque a la película de AlGaAs.



**Figura 1-4.** Método de síntesis de nanoalambres por litografiado de pozo

#### 1.3.2. Superficies Escalonadas.

En éste método comienza con una superficie de AlGaAs la cual tiene gran densidad de escalones, tal como lo muestra la Figura 1-5. Con las condiciones de crecimiento adecuadas y en orientaciones cristalográficas específicas, es posible propiciar la nucleación en los bordes del escalón de GaAs sin cubrir toda la terraza de AlGaAs, tal como lo muestra la Figura 1-5(b). Una vez recreciendo AlGaAs sobre la estructura anterior, se obtienen los hilos nanométricos embebidos en el AlGaAs.

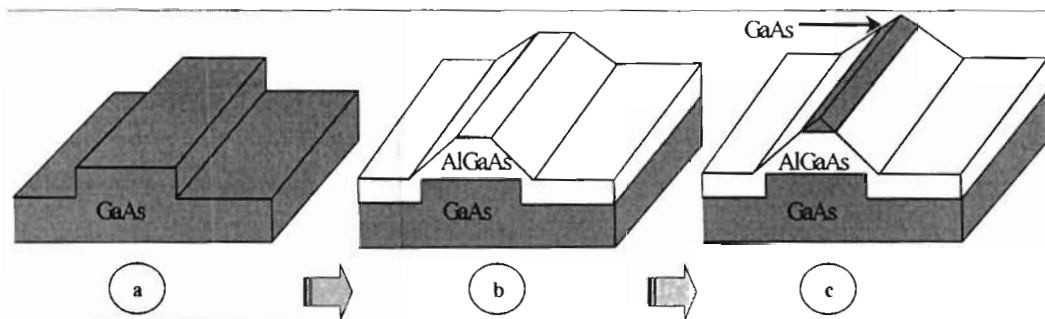


**Figura 1-5.** Método de síntesis de nanoalambres sobre superficies escalonadas.

La principal desventaja de este método es la no uniformidad de los hilos dado por el difícil control en el crecimiento de GaAs sobre la terraza. En general la deposición de GaAs sobre los escalones no ocurre perfectamente lineal sobre la terraza y se obtienen dimensiones laterales de los hilos muy variables.

### 1.3.3. Substratos Grabados.

Un método alternativo se ilustra en la Figura 1-6. Se comienza con un sustrato previamente grabado en forma de una meseta sobre la cual se deposita el material barrera, el cual puede ser el AlGaAs. Al depositar suficiente cantidad de AlGaAs, se formará una mesa muy estrecha en la parte de arriba (ver Figura 1-6). Sobre esta mesa se deposita ahora GaAs formando un prisma alargado el cual actuará como un medio efectivo de confinamiento de electrones en una dimensión. El posterior cubrimiento con AlGaAs de este sistema permite la síntesis de nanoalambres semiconductores.



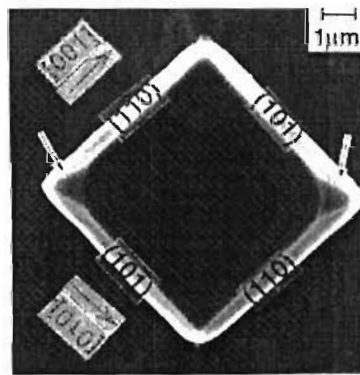
**Figura 1-6.** Método de síntesis de nanoalambres sobre sustratos grabados.

Mediante el anterior método las dimensiones de los nanoalambres son extremadamente uniformes. Sin embargo la desventaja de este método es la muy baja densidad de nanoestructuras obtenibles en un sustrato grabado.

#### 1.4 Objetivo

En la Figura 1-7 se muestra una imagen tomada mediante microscopía electrónica de barrido de un crecimiento de AlGaAs sobre un sustrato grabado de GaAs. El patrón grabado es un cuadro, por lo que al depositar AlGaAs se forma una pirámide arriba de este cuadro. Éste es un método muy utilizado en la síntesis de puntos cuánticos. Algo que resulta muy interesante es que en dos de los vértices opuestos de la pirámide se observa un escurrimiento de material, indicado con flechas en la Figura 1-7. Lo anterior sugiere que a lo largo de éstas direcciones existe una gran difusión superficial de los átomos. Analizando las facetas del escurrimiento se encuentra que éste ocurre en planos (631). Entonces surge la duda: ¿si en el plano (631) observamos una dirección preferencial de difusión de los átomos, se podrá propiciar la autoorganización de hilos?.

Entonces nuestro objetivo es el estudio del crecimiento sobre GaAs(631) con miras a la obtención de nanoalambres semiconductores. En esta tesis de maestría pretendemos estudiar en detalle la homoepitaxia de GaAs(631), dado que no existe ningún trabajo previo acerca del crecimiento sobre este plano.



**Figura 1-7.** Crecimiento sobre un sustrato litografiado en forma de cuadro.

## Referencias

- [1] S. Adachi, J. Appl. Phys., **58** (1985) R1.
- [2] K. Alavi, R. L. Aggarwal, S.H. Groves, J. Magn. and Magn. Mater., (Netherlands), **11** (1979) 136.
- [3] K. Alavi, R. L. Aggarwal, S. H. Groves, Phys. Rev. B, **22** (1980) 1311.
- [4] S. Adachi, "Physical Properties of III-V Compounds: InP, InAs, GaP, InGaAs, and InGaAsP," J. Wiley and Sons, New York (1992).
- [5] L. Esaki, and R. Tsu, J. Res. Develop, **14** (1970) 61.
- [6] J. Ding, M. Hagerott, T. Ishihara, H. Jeon, and A. V. Nurmiko, Phys. Rev. B, **47** (1993) 10528.
- [7] C. Weisbuch, Semiconductors and Semimetals, Academic Press, New York, **24** (1987).
- [8] Zhores Alferov, IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics, **6** (2000) 832.
- [9] <http://www.sciam.com/specialissues/1097solidstate/1097corcoran.html>
- [10] Mark A. Reed, Scientific American, Jan 1993, 98.
- [11] I. N. Stranski and L. von Krastanow, Akad. Wiss. Let. Mainz Math. Natur K1 lib **146** (1939) 797.
- [12] L. Goldstein, F. Glas, J. Marzin, M. Charasse, and G. LeRoux, Appl. Phys. Lett. **47** (1985) 1099.
- [13] M. Suguwara: Self-assembled InGaAs/GaAs quantum dots, Semiconductors and Semimetals, Academic Press, New York, **60** (1990).

# Capítulo 2

---

---

## SISTEMAS EXPERIMENTALES

### 2.1. La técnica de Epitaxia por Haces Moleculares (MBE).

El término epitaxia apareció por primera vez hace aproximadamente 50 años, proviene del griego *epi*, que significa sobre y *taxis*, orden. Este término se refiere a un proceso de crecimiento orientado de una película sobre un sustrato, que puede ser del mismo material que la película en cuyo caso se denomina homoepitaxia, o bien de un material diferente a lo cual se llama heteroepitaxia.

La utilización de la técnica MBE comenzó a principio de los años 70<sup>[14][15]</sup>. Las tecnologías de crecimiento de películas delgadas empleadas hasta ese momento, tales como epitaxia en fase líquida, deposición de vapores químicos, “sputtering” y evaporación en el vacío, no eran suficientes para el desarrollo de los nuevos dispositivos y el estudio de sistemas de dimensiones nanoscópicas. Fue entonces cuando se hizo necesario buscar una alternativa. De acuerdo al Dr. Cho, el inventor de esta técnica: “Hubo la necesidad de inventar un nuevo proceso. Una invención a veces sucede cuando se combina el conocimiento de dos tecnologías establecidas y los aplica a una tercera para crear una nueva tecnología. Este fue el caso del desarrollo de la Epitaxia por Haces Moleculares”.

Esta nueva tecnología surgió al combinar el conocimiento de física de superficies y la tecnología de propulsión de iones. En esencia, la técnica de MBE es un poco más que una técnica de evaporación basada en ultra alto vacío (UAV). En la práctica, es una técnica

de deposición con la capacidad de reproducibilidad y predictibilidad obteniendo materiales con niveles de impurezas por debajo de 10 partes por billón, con un control sin precedentes sobre la composición y dopaje de las estructuras diseñadas. Más adelante detallaremos las características generales de ésta técnica de crecimiento. Por el momento adelantaremos algunas de las ventajas que tiene MBE respecto a otras técnicas de crecimiento<sup>[16]</sup>:

1. La velocidad de crecimiento del orden de  $1\mu\text{m h}^{-1}$  ( $\sim 3 \text{ \AA seg}^{-1}$ ) nos permite realizar cambios en la composición desde dimensiones atómicas. Esto es determinado por el tiempo de operación de los obturadores ( $< 1$  segundo).
2. La interdifusión puede considerarse despreciable debido a las bajas temperaturas de crecimiento en comparación con otras técnicas.
3. El ambiente de UHV permite el empleo de métodos de análisis para indagar las características químicas y/o estructurales antes, durante y después del crecimiento.
4. Es posible el uso de máscaras mecánicamente movibles para crear estructuras geométricas en el plano del sustrato (escritura epitaxial).
5. Es posible el depósito secuencial de diferentes materiales.
6. La automatización de todos los procesos proporciona mayor control i.e. reproducibilidad en los crecimientos.

### 2.1.1 Generalidades del Sistema de MBE

Dadas las ventajas anteriormente enumeradas, mediante MBE ha sido posible además de investigar en los conceptos básicos de la cinética de crecimiento de materiales y en el área de sistemas de baja dimensionalidad lo cual conlleva nuevos e interesantes fenómenos dominados por el mundo cuántico, ha sido posible sintetizar materiales semiconductores a fin de diseñar gran variedad de dispositivos como lo han sido por ejemplo los transistores de alta velocidad, diodos y láseres. La utilidad de tales dispositivos es innegable. Actualmente son comúnmente empleados en el acoplamiento de fibras ópticas, teléfonos portátiles, satélites, sistemas del radar, etc.

Los dispositivos semiconductores son básicamente capas de materiales diferentes apiladas verticalmente. Cada capa, posee características electrónicas distintas las cuales determinan la utilidad y función del conjunto de capas. Así pues, el desarrollo exitoso de

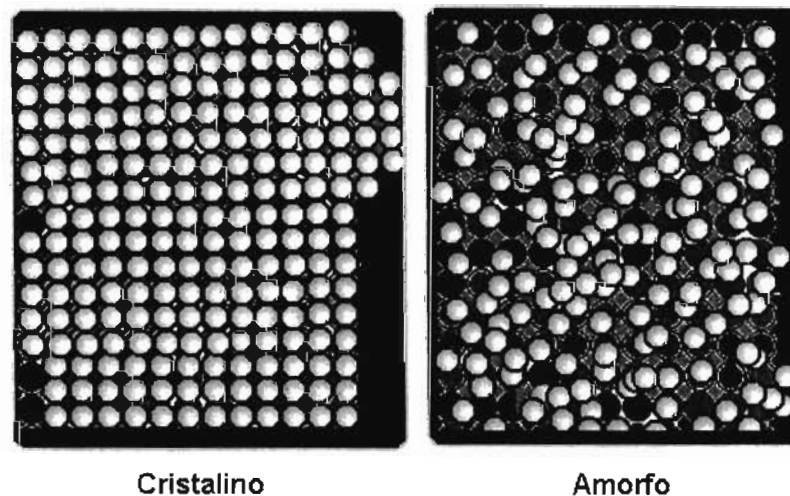
nuevos dispositivos se reduce a la habilidad para manipular el crecimiento ordenado de películas delgadas.

**2.1.1.1 Formación de Capas Cristalinas**

Los materiales sólidos pueden ser amorfos ó cristalinos. En un sólido amorfo, los átomos se arreglan aleatoriamente. En un sólido cristalino, los átomos se arreglan en un patrón de repetición. Por ejemplo, será *amorfo* el patrón de ordenamiento que pueden tomar algunas naranjas al colocarse aleatoriamente dentro de un bolso. Para el caso de un patrón *cristalino*, las naranjas estarían ordenadas en filas dentro de un cajón. Vea la Figura 2-1.

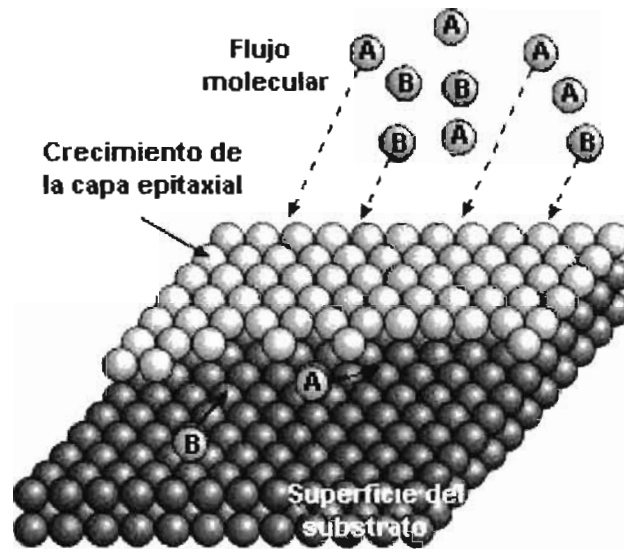
Muchos procesos de deposición hechos en vacío, producen capas amorfas. La deposición epitaxial es un caso especial de deposición, que da lugar a un sólido cristalino. Una de las técnicas características con las que se logra obtener sólidos cristalinos es precisamente mediante MBE.

El crecimiento epitaxial comienza con la irradiación de un haz molecular o atómico de la superficie de un sustrato. En la Figura 2-2 se muestra esquemáticamente la incidencia del flujo molecular a fin de cristalizar un semiconductor compuesto por átomos A y B. Los átomos A pueden ser precisamente los Ga y los átomos B los As, a fin de formar GaAs. Al llegar a la superficie los átomos experimentan una gran variedad de procesos tales como la absorción en la superficie, la migración superficial, la incorporación en la red



**Figura 2-1.** *Ordenamiento cristalino y amorfo.*

cristalina y la desorción térmica. Todos estos factores altamente dependientes de las condiciones de crecimiento determinan la calidad cristalina, morfología y en general el tipo de crecimiento. Por ejemplo, para una baja temperatura del sustrato, los átomos se pegarán donde puedan ligarse a la superficie, sin tener orden, provocando una pobre calidad cristalina. Para cierto rango apropiado de temperatura, los átomos tendrán suficiente energía para moverse a la posición apropiada respecto a la superficie, generando crecimiento cristalino.



**Figura 2-2.** *Mecanismo de crecimiento por MBE*

Un buen dispositivo semiconductor depende en grande parte en la calidad cristalina. Los defectos producidos en el cristal, los cuales son sitios donde los átomos no consiguieron acomodarse correctamente antes de que se convirtieran al sólido, producen una obstaculización del flujo de electrones a través del material. Los defectos pueden ser originados por la suciedad en la superficie del sustrato, las grandes diferencias en la



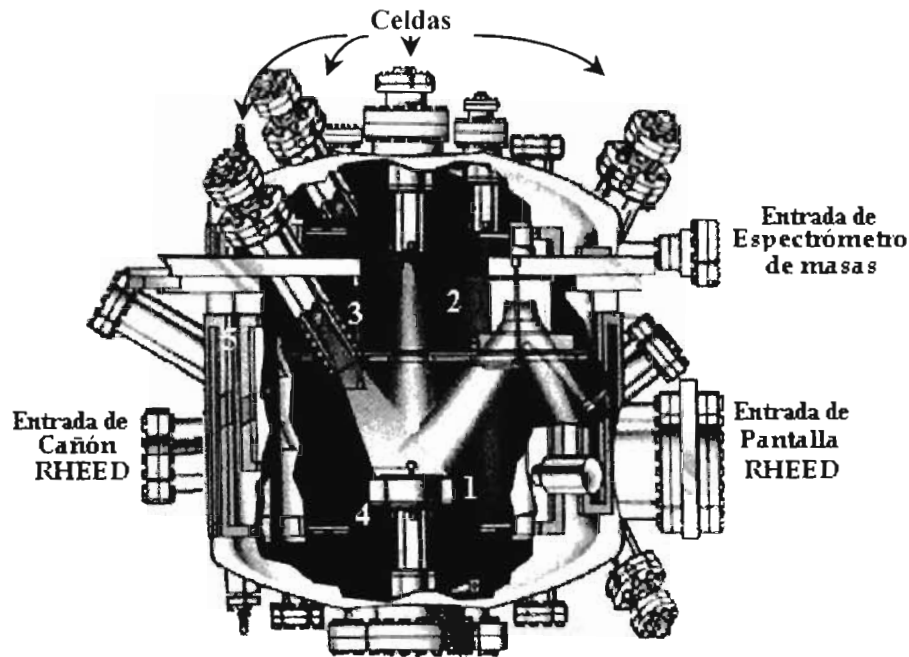
estructura cristalina (desacople de red) del material y el sustrato, o la incorporación unintentional de otros átomos denominados defectos nativos.

### 2.1.1.2 Cámara de crecimiento

El depósito de los materiales se realiza en la cámara de crecimiento la cual se muestra en la Figura 2-3. Esta es la cámara principal del MBE cuya presión base es en torno a  $10^{-12}$  Torr (UAV). El compartimiento de las cámaras es de acero inoxidable. El sistema de crecimiento contiene varios compartimientos independientes donde se instalan las llamadas celdas de efusión o celdas-K en las cuales se generan los haces moleculares y serán descritas en detalle más adelante. Cada celda tiene obturadores mecánicos independientes (también conocidos como “*shutters*”) para controlar la incidencia de cada haz.

El proceso de crecimiento del cristal en bastante medida, depende de la temperatura del sustrato, de aquí que éste sea uno de los parámetros tecnológicos más importantes en la epitaxia por haces moleculares que debe controlarse con mucha exactitud. Esto se lleva a cabo con un termopar, que se coloca en el interior del sujetador del sustrato. Algunas condiciones óptimas de cristalización se obtienen cuando el sustrato tiene una temperatura de entre 300 y 500°C dependiendo de los materiales que se pretendan crecer. Para obtener las capas crecidas más homogéneas se hace girar el sujetador del sustrato sobre su eje perpendicular, durante el proceso de cristalización para asegurar la uniformidad y distribución del material. Además de controlar la temperatura del sustrato también es necesario vigilar y controlar la temperatura de la fuente evaporadora, ya que de esto depende la intensidad de los haces moleculares. Asimismo, cabe señalar que las temperaturas de las celdas evaporadoras pueden diferir entre ellas, condicionadas por las diferentes dependencias de la presión de vapor respecto a la temperatura para cada uno de los elementos. Por ejemplo, para los metales que tienen presión de vapor baja, la temperatura de sus celdas evaporadoras puede superar los 1000 °C; y por otro lado, para los elementos del grupo V de la tabla periódica que tienen una presión de vapor considerablemente mayor, la temperatura sólo alcanzará algunos cientos de grados centígrados. Para excluir la posibilidad de una interacción de las celdas con diferentes temperaturas, éstas están contenidas en compartimientos criogénicos (criopaneles)

enfriados con nitrógeno líquido ( $T=77K$ ). Además, estas cámaras frías ayudan a conservar el alto vacío dentro de la cámara de crecimiento, absorbiendo las impurezas que se desprenden de las piezas que están expuestas a altas temperaturas dentro del sistema.



**Figura 2-3.** Esquema de la cámara de crecimiento. 1) Manipulador y sujetador del sustrato, 2) cámara de UAV, 3) celda de fusión 4) detector de iones 5) criopanel y 6) flujo del haz molecular.

Finalmente, es posible acoplar técnicas de caracterización o control in-situ tales como la reflexión de electrones difractados de alta energía (RHEED, *reflection high-energy electron diffraction*). RHEED básicamente consiste de un cañón de electrones de alta energía los cuales se hacen incidir a un ángulo rasante sobre la superficie del sustrato ( $\sim 2^\circ$ ). La incidencia a bajo ángulo evita que el haz interfiera con el crecimiento y en cambio censa en tiempo real los procesos ocurrentes en la superficie<sup>[17][18]</sup>. Estos procesos son evaluados al observar en una pantalla de fósforo la difracción del haz de electrones.

Así, es posible evaluar rápidamente la calidad cristalina del crecimiento, morfología superficial, estado de tensión, velocidades de crecimiento, además de investigar gran variedad de procesos superficiales en el momento mismo en el que ocurren los crecimientos. Posteriormente analizaremos más en detalle la técnica de RHEED.

Un sistema completo de MBE, incluye varios módulos o compartimientos secundarios para evitar la exposición de la cámara principal al aire, y con ello la incorporación de contaminantes no deseables. Existe una cámara de introducción la cual es el único módulo que se expone a la presión atmosférica al cargar o descargar los substratos. Después de ser introducidos (o retirados) se cierra la cámara y comienza el bombeo hasta llegar a presiones de alto vacío. Ya en estas condiciones, podemos transferir los substratos o la cámara principal asegurando un mínimo de contaminación. Para sistemas más sofisticados existe un módulo intermedio que esta entre el compartimiento del crecimiento y el compartimiento de carga, protegiendo la limpieza de la cámara principal. Este módulo intermedio, se puede también equipar con un calentador, para tener una etapa de limpieza térmica previa en las obleas.

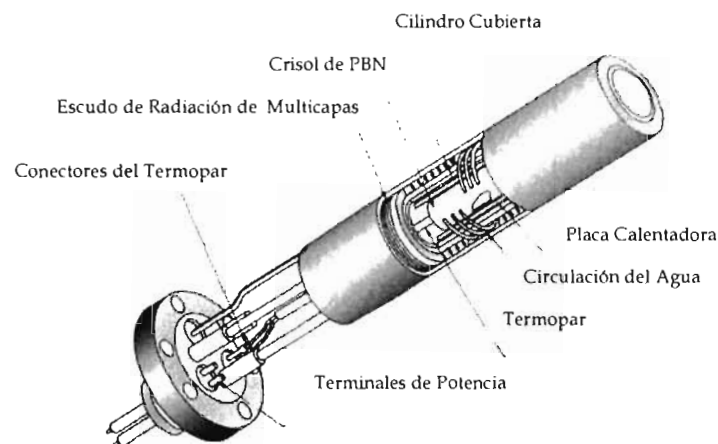
El sistema de MBE, puede crecer capas mucho muy delgadas, incluso de algunos átomos de espesor, que realmente son reproducibles. Por comparación, el cabello humano en promedio tiene  $75\mu\text{m}$  de espesor, así que tomaría una hora para crecer una capa que sea solamente  $1/75$  del grueso de un cabello. Entonces el tiempo de crecimiento de las capas, es lento comparado con el tiempo necesario para abrir y cerrar los obturadores de la celda (para iniciar o interrumpir el flujo molecular). Esto es adecuado para el crecimiento de algunos dispositivos, donde requieren interfaces agudas entre las capas.

### **2.1.1.3 Celdas Knudsen**

Un factor de gran importancia en MBE es la generación del haz molecular, dado que su uniformidad y variación temporal determinaran la calidad y reproducibilidad del crecimiento<sup>[16]</sup>. Como se mencionó anteriormente, las celdas de efusión, generan los haces moleculares del material, provenientes de la fuente sólida. Vea la Figura 2-4. Utilizan un crisol de cerámica, que es rodeado por un filamento sobre el calentador. Contiene en su interior varias capas de metal para producir el calor necesario para la efusión. Se recubre

con una hoja del tantalio que blinda a la celda para mejorar la eficacia de la calefacción y poder reducir la carga de calor en el compartimiento circundante.

En su interior también contienen conexiones para termopar y para la alimentación. El termopar esta situado junto al crisol para proporcionar una lectura exacta de la temperatura, ver la Figura 2-4. La señal del termopar esta conectado a un regulador de temperatura, así como a una fuente de alimentación que controla la cantidad de corriente que necesita la celda para incrementar o disminuir la temperatura con exactitud. Cualquier variación de la temperatura dará lugar a un cambio correspondiente en el flujo del haz molecular. Las temperaturas son extremadamente estables logrando crecimientos repetitivos. Los rápidos cambios de temperatura son necesarios, permitiendo el crecimiento de capas epitaxiales abruptas con diferentes composiciones.



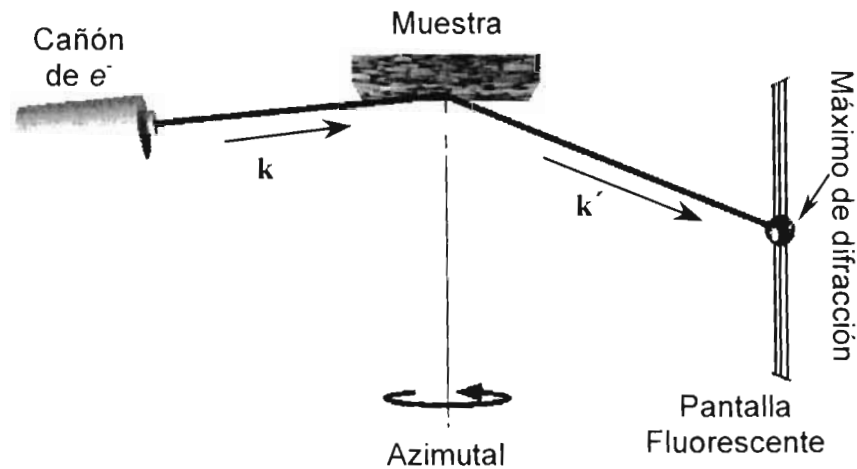
**Figura 2-4.** Esquema de una celda de efusión Knudsen.

## 2.2. Reflexión de Electrones Difractados de Alta Energía.

<sup>[20]</sup>La reflexión de electrones difractados de alta energía (RHEED del inglés: *reflection high-energy electron diffraction*) es una técnica de caracterización que se utiliza para calibrar razones de crecimiento, observar la remoción de óxidos de la superficie (desorción), calibrar la temperatura del sustrato, monitorear el arreglo de los átomos en la superficie, dar información sobre la morfología de la superficie y de la cinética de

crecimiento. Todas estas razones hacen del RHEED una de las herramientas más útiles para la caracterización *in situ* durante el proceso de crecimiento por MBE<sup>[16]</sup>.

Un haz de electrones de alta energía (~30 keV) se impacta con la superficie de la muestra a un ángulo de incidencia rasante (1-3°) y se refleja sobre una pantalla fosforescente, como se muestra en la Figura 2.5. Con una superficie de la muestra bien ordenada los electrones reflejados forman un patrón de difracción que consiste de puntos brillantes y/o líneas en la pantalla visual.



**Figura 2-5.** Dibujo esquematizando el arreglo experimental de la técnica RHEED

Primeramente analicemos un experimento RHEED idealizado en donde supondremos que:

- i) El haz de electrones es monoenergético, infinitesimalmente delgado y colimado
- ii) La energía del haz es muy alta tal que el radio de la esfera de Ewald es muy grande en comparación con las dimensiones de la malla unitaria de la superficie en el espacio recíproco
- iii) El ángulo de incidencia es igual a cero
- iv) La superficie de la muestra es perfectamente plana

### 2.2.1 Análisis Cinético

Al arribar el haz a una muestra cristalina perfecta, ésta constituye una red de difracción bidimensional. Las posiciones de los átomos en la superficie forman una red, la cual se obtiene de repeticiones periódicas de la malla unitaria. Si  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  son vectores unitarios de la malla en la superficie de la muestra en el espacio real, podemos obtener los similares en el espacio recíproco a través de las fórmulas:

$$\mathbf{a}_1^* = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}}, \quad \text{Ec. 2.1}$$

$$\mathbf{a}_2^* = 2\pi \frac{\mathbf{n} \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{n}}. \quad \text{Ec. 2.2}$$

Donde  $\mathbf{n}$  es el vector unitario normal a la superficie.

La mayoría de los electrones incidentes son dispersados elásticamente por los átomos de la superficie de la muestra debido a la condición de incidencia rasante. Los haces dispersados son caracterizados por el vector de onda  $\mathbf{k}'$ .

Los máximos de intensidad del haz difractado ocurren en direcciones de emergencia determinadas por la condición de difracción de von Laue, la cual enuncia que, para que ocurra interferencia constructiva, el producto punto del cambio en el vector de onda con cualquier vector  $\mathbf{r}$  de la superficie cristalina de la muestra debe ser un múltiplo entero ( $m$ ) de  $2\pi$ :

$$(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r} = m2\pi. \quad \text{Ec. 2.3}$$

Para dispersión elástica,  $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$  define una esfera de radio  $2\pi/\lambda$  alrededor de la punta de  $\mathbf{k}$ . Esta es la esfera de Ewald, Figura .6. El origen del espacio  $k$  es colocado en el punto sobre la superficie de la muestra donde el haz incidente llega y de donde parten los haces difractados.

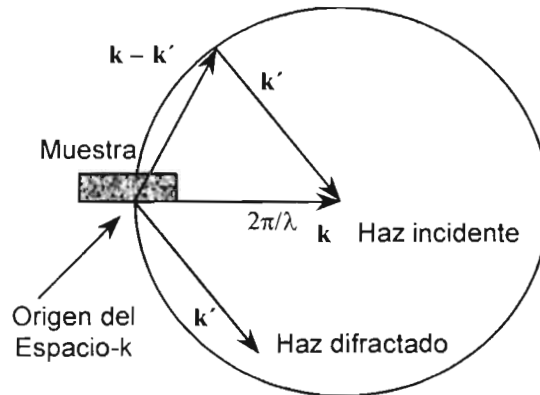
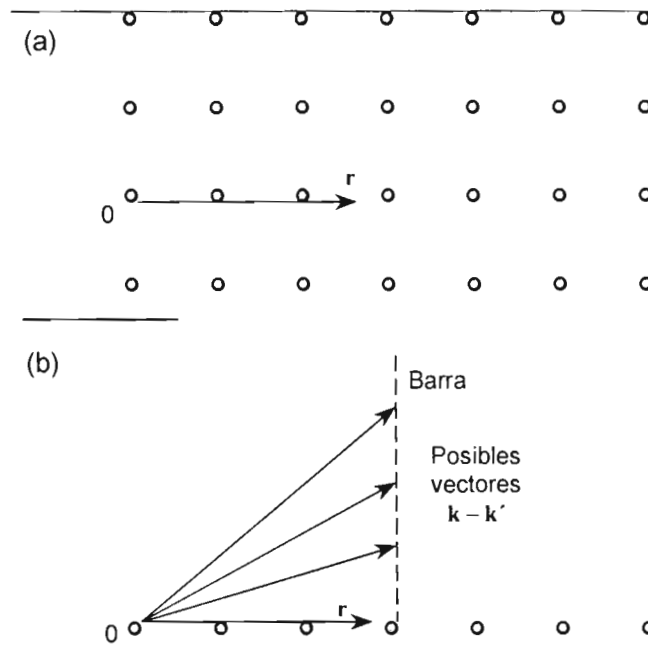


Figura 2-6. La construcción de la esfera de Ewald.

### 2.2.2 Barras de la red recíproca

Las barras de la red recíproca se extienden normales a la superficie de la muestra, el patrón RHEED es un dibujo de estas barras. Para entender esto, veamos la Figura 2-7(a) donde se muestra un vector de la red de la superficie real ( $\mathbf{r}$ ) el cual por conveniencia está en el plano de la sección transversal. En la figura, hay tres vectores ( $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ) los cuales son equivalentes con respecto a la condición de Laue.

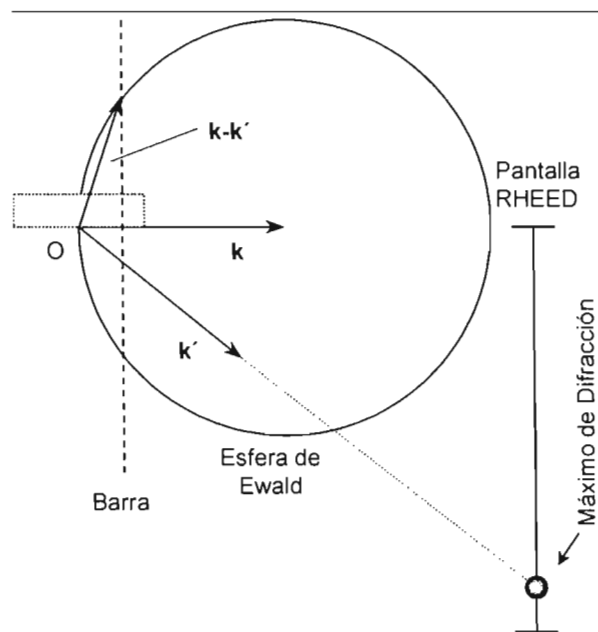
Los productos punto de los tres vectores con  $\mathbf{r}$  son iguales debido a que ellos tienen la misma componente en el plano (siendo esa componente un vector de la red recíproca). Entonces, la condición de Laue será satisfecha cuando la punta de ( $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ) caiga en algún lugar sobre una línea o barra que sea perpendicular a la superficie y que pase por un punto de la malla recíproca. Además de esto, la condición de dispersión elástica, observaremos máximos de difracción a lo largo de las direcciones para las cuales la punta de ( $\mathbf{k} - \mathbf{k}'$ ) caiga en una barra en un lugar donde la barra atraviese la esfera de Ewald.



**Figura 2-7.** (a) *Perspectiva de arriba de una red recíproca cuadrada simple con un vector  $r$  real de la red de la superficie real y (b) sección transversal mostrando el origen de las barras de la red recíproca.*

Dónde está la intersección de la barra con la esfera de Ewald para un punto visto en la pantalla?. La situación se ilustra en la Figura . La barra se extiende perpendicularmente a la superficie de la muestra en ambas direcciones. El punto de intersección de la barra con la esfera define un vector  $(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ , y entonces al vector  $\mathbf{k}'$  del máximo de difracción dado que  $\mathbf{k}$  es fijo. El haz difractado que corresponde a esta intersección particular se impacta con la pantalla en el punto donde se dibuja una línea a través del origen, y a lo largo de  $\mathbf{k}'$ , intersecta la pantalla. En principio, dado que una línea atraviesa una esfera en un punto, deberíamos de observar únicamente puntos en la pantalla de RHEED. Sin embargo no hay ideales en el experimento.





**Figura 2-8.** Una sección transversal en el plano de incidencia que muestra como una barra en particular de la red recíproca da lugar al punto de difracción en la pantalla RHEED.

### 2.2.3 Rectas y Anillos de Laue

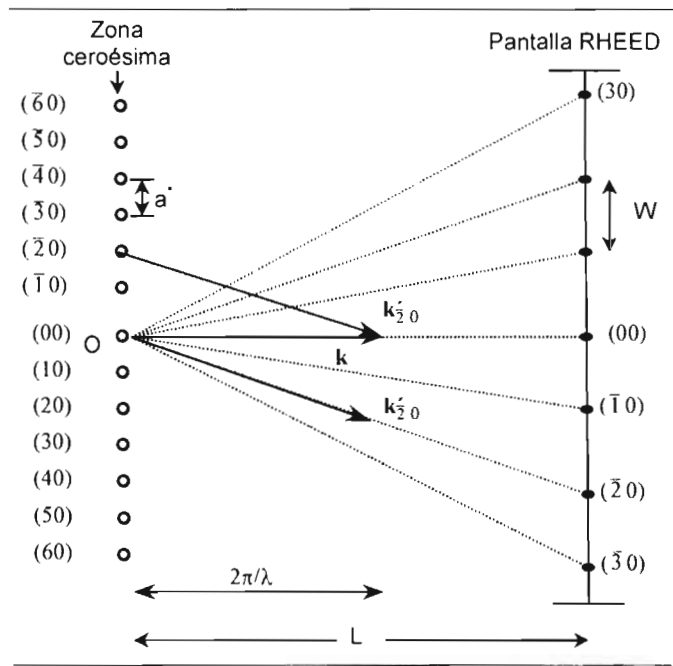
#### El Origen de las barras del patrón RHEED

En teoría el patrón RHEED debe estar formado de puntos en lugar de las ya vistas líneas. Aún con Si de alta pureza, se obtiene un patrón de líneas. El origen de esto se atribuye principalmente a las siguientes dos razones:

- 1) Instrumental: Un haz real debe tener un ancho, alguna divergencia, y alguna variación en su energía.
- 2) Muestra: Espesor finito de las barras mismas. Para una superficie con escalones, las barras tienen una sección transversal casi gaussiana cuyo ancho es inversamente proporcional a la extensión lateral de las terrazas.

### 2.2.4 Distancia entre las Líneas.

En la Figura 2-9 una vista de arriba una fila única de barras que tienen un espaciado de  $a^*$  y se indican los índices de miller ( $hk$ ) de varios puntos de la red recíproca; estos mismos índices son dados a las barras, y a los puntos o líneas correspondientes creados en el patrón RHEED.



**Figura 2-9.** Vista de arriba mostrando la relación entre la separación entre filas de las barras de la red recíproca de la zona cero-ésima y el espaciado de las líneas RHEED que se observan.

Como un ejemplo, se muestra el vector  $\mathbf{k}$  correspondiente a la reflexión  $(\bar{2}0)$ . Para satisfacer la condición de Laue con el requerimiento de dispersión elástica,  $\mathbf{k}'$  conecta el punto de intersección de la barra  $(\bar{2}0)$  con el centro de la esfera de Ewald; trasladado al origen del espacio  $k$ , este muestra la posición donde aparece la recta  $(20)$  en la pantalla. Si la separación entre líneas es  $W$ , y la distancia entre la pantalla y el punto de incidencia es  $L$ , por triángulos similares:  $W/L \sim a^*/(2\pi/\lambda)$ . Entonces, la separación de las líneas que se observa indica un espaciado de las barras de:

$$a^* = 2\pi W/\lambda L \tag{Ec. 2.4}$$

### 2.2.5 Anillos de Laue

Los puntos (o líneas) para un ángulo de incidencia  $\sim 1^\circ$  forman un arco o anillo en la pantalla. Las filas de barras a lo largo de direcciones perpendiculares al haz incidente son llamadas zonas o barras de Laue (la zona cero-ésima se ilustró en la Figura 2-9). Zonas de mayor orden en ocasiones se ven, ellas consisten de anillos de puntos. Estas zonas de

mayor orden crean anillos de mayor orden como se puede observar en la Figura 2-10. En la Figura 2-10 se muestran los índices de Miller ( $hk$ ),  $k$  especifica la zona. La  $k$ -ésima zona es frecuentemente etiquetada como  $L_k$ .

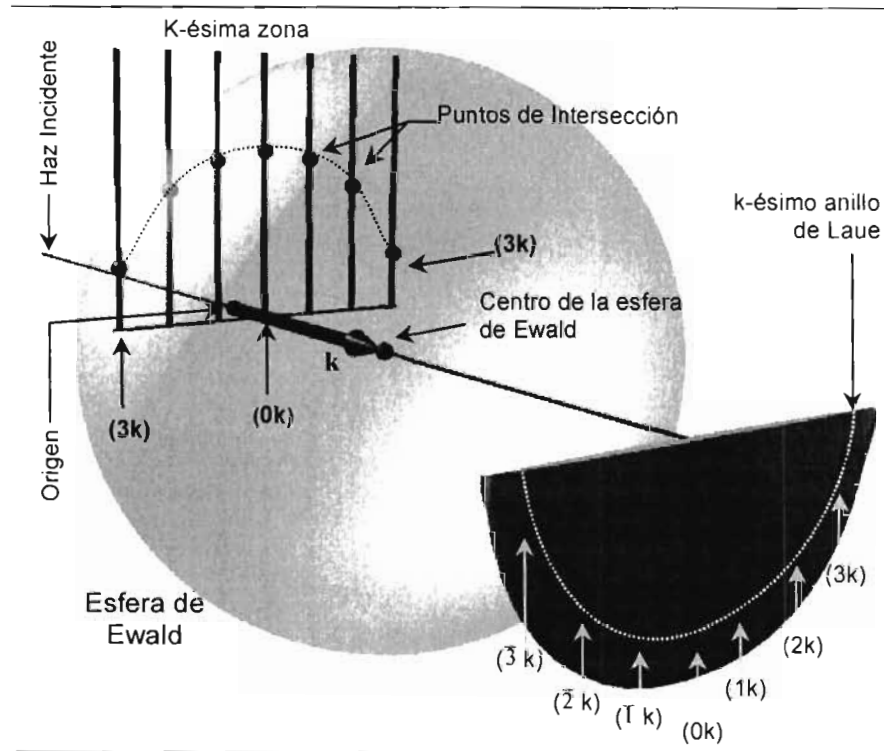
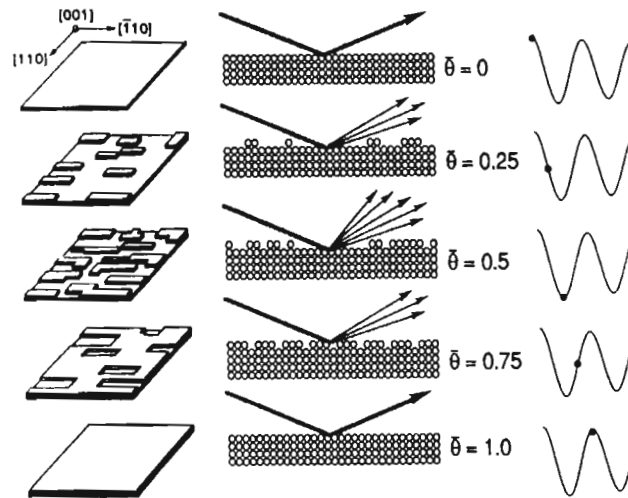


Figura 2-10. Diagrama esquemático mostrando el  $k$ -ésimo anillo de Laue correspondiente a la  $k$ -ésima zona.

### 2.2.6 Oscilaciones en Intensidad y sus Aplicaciones.

Desde 1983 la medición de la intensidad del haz especular del patrón RHEED ha sido una poderosa herramienta para investigar el modo de crecimiento en el sistema de MBE. Las oscilaciones pueden ser explicadas como un modo de crecimiento capa por capa como se muestra en la Figura 2-11. Aquí, la frecuencia de oscilación corresponde a la velocidad de crecimiento de una monocapa (ML del inglés: *monolayer*)<sup>[17]</sup>, en donde una monocapa es el espesor de una capa completa de átomos de Ga y una capa completa de átomos de As. En la Figura 2-11 se ilustra esquemáticamente la formación de la primera monocapa y se ve como ocurren las oscilaciones de la intensidad del haz especular,

observándose un máximo en la intensidad al principio y al final de la formación de la primera monocapa, que es cuando se tiene una superficie atómicamente plana, mientras que se observa un mínimo en la etapa intermedia cuando la capa crecida está aproximadamente a la mitad. La oscilación de la intensidad del punto especular ha sido atribuida a la oscilación de la rugosidad de las capas cambiando la dispersión difusa<sup>[18]</sup>, pero la dependencia en el ángulo de incidencia de las oscilaciones<sup>[19][20]</sup> sugiere que la interferencia entre los electrones dispersados de la penúltima capa y la capa parcialmente crecida contribuyen a estas oscilaciones.



**Figura 2-11.** Ilustración del mecanismo de las oscilaciones de intensidad del haz especular del RHEED durante el crecimiento de una monocapa, aquí  $\bar{\theta}$  representa la fracción de monocapas depositadas.

En resumen tenemos que el estudio de las diferentes características de las oscilaciones en intensidad del RHEED como una función de las condiciones de crecimiento y de la orientación del sustrato proveen valiosa información sobre la formación de monocapas, velocidad de crecimiento, migración en la superficie, además de la dinámica de crecimiento. Para un MBE convencional, la composición en los ternarios y cuaternarios también puede ser determinada al comparar la razón de crecimiento de los constituyentes binarios con la velocidad de crecimiento total.

### 2.3. Microscopía por Fuerza Atómica.

El principal propósito de esta técnica de caracterización, que es relativamente joven, es el medir la rugosidad de la superficie. Se pueden construir imágenes en 3D de la superficie graficando la altura local de la muestra contra la posición horizontal de la punta prueba.

Los principios sobre cómo funciona el microscopio de fuerza atómica son muy simples. Una punta muy delgada, hecha típicamente de  $\text{Si}_3\text{N}_4$  o de Si, hace un barrido sobre la superficie con un mecanismo de retroalimentación que habilita a los rastreadores (*scanners*) piezoeléctricos y así se mantiene la punta a una fuerza constante (de esta forma se obtiene información sobre la altura) o ya sea también a una altura constante (se obtiene información de la fuerza) arriba de la superficie de la muestra. En la Figura 2-12 se muestra un esquema del arreglo experimental de esta técnica de caracterización.

La cabeza del AFM emplea un sistema de detección óptica en el cual la punta se encuentra al final de un cantilever reflector. Un diodo láser se enfoca sobre este cantilever, el haz láser es reflejado por el cantilever hacia un fotodetector (FDSP) a medida que la punta hace un barrido sobre la superficie de la muestra, moviéndose hacia arriba y hacia abajo siguiendo el contorno de la superficie. Conforme la punta prueba se mueve, la posición del punto del láser en el fotodetector cambia. La variación en la posición nos da una medida de cuanto se ha deflectado la punta. Esta señal del fotodetector se manda a un circuito electrónico de retroalimentación en  $z$ . Ahí, la señal prueba se compara con un punto fijo, el cual sirve de señal de referencia para el circuito de retroalimentación en  $z$ . Luego se genera una señal de error, la cual es proporcional a la diferencia entre la señal prueba del fotodetector y el punto fijo. La señal de error se utiliza para generar un voltaje de retroalimentación, el cual se manda al rastreador piezoeléctrico y provoca contracciones y expansiones del rastreador, consecuentemente se baja y sube la muestra a fin de mantener constante la deflexión de la guía. Este movimiento hacia arriba y hacia abajo del rastreador coincide entonces con la topografía de la superficie y es utilizado para generar una imagen en  $z$  de la superficie. Finalmente un generador de barrido mueve el tubo rastreador en las direcciones  $x$  y  $y$ .

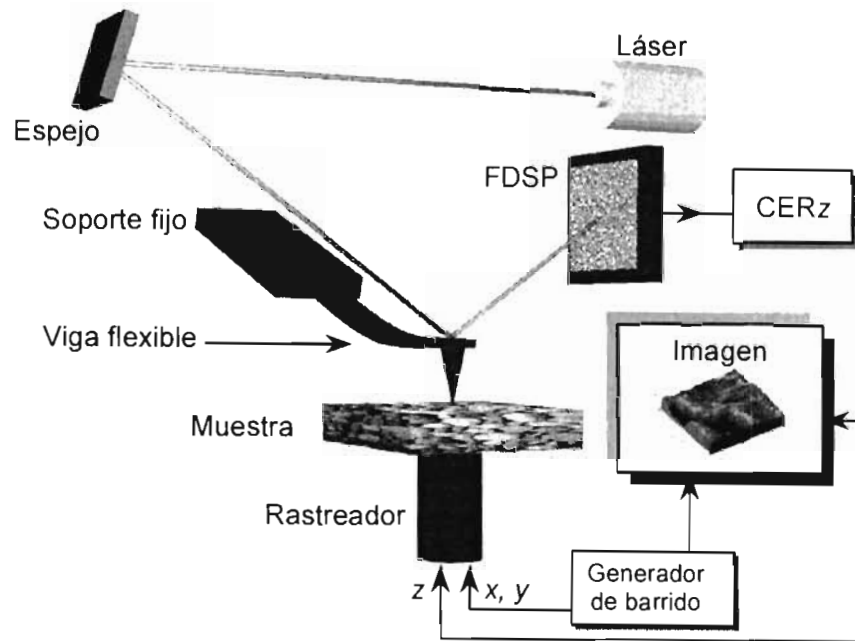


Figura 2-12. Esquema del arreglo experimental del microscopio por fuerza atómica.

## REFERENCIAS

- [14] A. Cho, *J. Vac. Sci. Tech.*, **8** (1971) S31.
- [15] A. Cho, J. Arthur, *Prog. Solid-State Chem.*, **10** (1975) 157.
- [16] M.A. Herman y H. Sitter: *Molecular Beam Epitaxy*, Springer-Berlag Berlin Heidelberg (1989).
- [17] J. Harris, B. Joyce, P. Dobson, *Surf. Sci.*, **103** (1981) L90.
- [18] J. Neave, B. Joyce, P. Dobson, N. Norton, *Appl. Phys. A*, **31** (1983) 1.
- [19] P. Cohen, P. Pukite, J. van Hove, C. Lent, *J. Vac. Sci. Tech. B*, **3** (1986) 1251.
- [20] T. Block, K. Eyink, D. Neikirk, B. Streetman, *SPIE Proceedings, Epitaxial Growth Processes*, **2140** (1994) 10.

# Capítulo 3

---

---

## RESULTADOS Y DISCUSION

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en este trabajo de tesis, comenzando con la descripción del programa que se realizó para estudiar planos cristalográficos para estructuras de tipo Zinblendas y su aplicación al plano con dirección (631). De ahí se siguen las características de ésta superficie, morfología, celda unitaria, etc. Posteriormente se muestran los resultados del ataque químico aplicado al sustrato. Y finalmente se estudia la homoepitaxia de GaAs/GaAs(631) mediante AFM y patrones de RHEED.

### 3.1. Estudios Teóricos

#### 3.1.1 Análisis del plano (631).

Para estudiar un plano cristalográfico se necesita de un modelo que lo represente, éste puede ser construido físicamente con esferas unidas de material plástico, madera, etc. y así observar la estructura atómica en el espacio. Sin embargo, en el presente trabajo de tesis se decidió hacer un programa de computadora para tales fines, ya que de ésta manera se puede obtener de forma rápida y para cualquier dirección de interés, distancia entre átomos y ángulos sin el inconveniente de tener que hacer mediciones con regla y otros instrumentos más imprecisos para luego hacer el corte del plano en cuestión.

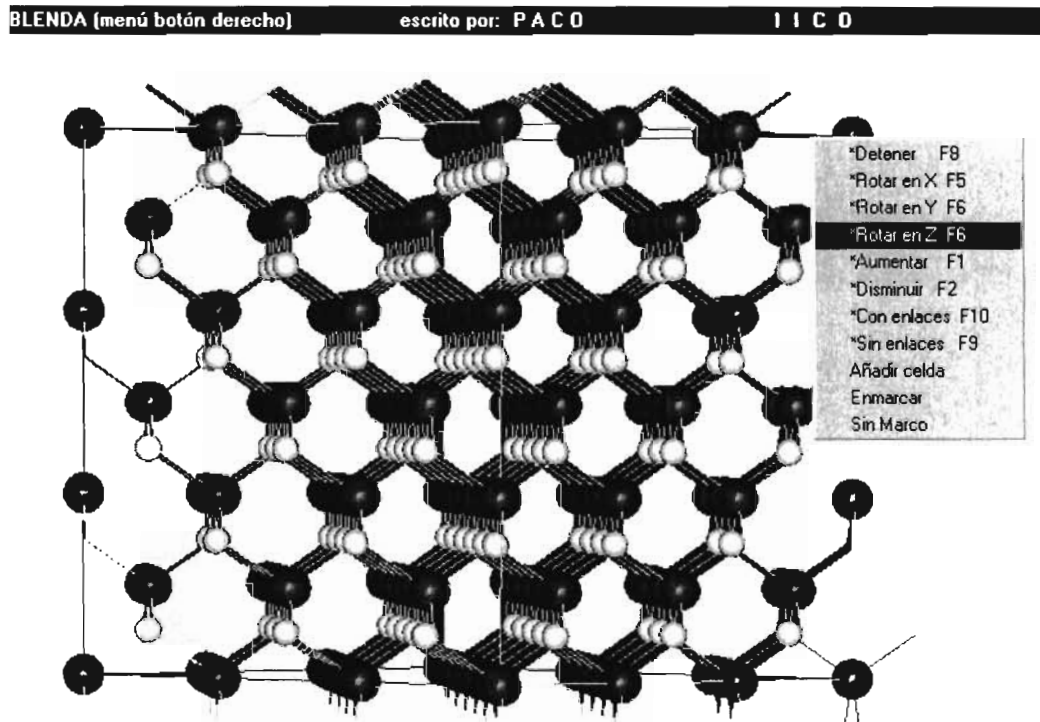
##### 3.1.1.1 Programa cristal de Zinblendas

El entorno de programación elegido fue el Visual C++ 6 de Microsoft, usando además las librerías gráficas OpenGL y GLUT pues son una herramienta poderosa ampliamente usadas en trabajos de animación y programación de videojuegos<sup>[21][22]</sup>. Con el



uso de éstas librerías se dispone de figuras geométricas predefinidas y la posibilidad de definir fuentes de iluminación, propiedades ópticas de reflexión y brillo en la superficie de las figuras, facilitando así la programación y dando una mejor presentación a las gráficas.

La interfaz del programa es mediante un menú contextual en el botón derecho del mouse y el uso de las teclas F1 a F12 del teclado, con la elección de una de las opciones se calculan rotaciones alrededor de los ejes  $x$ ,  $y$  ó  $z$  para observar desde diferentes perspectivas, se realiza traslaciones de las posiciones atómicas del cristal, se aumenta el número de átomos, se despliegan o esconden los enlaces y hay opción a dibujar un marco de referencia. La Figura 3-1 muestra una captura del programa.



**Figura 3-1.** Captura del programa *Cristal de Zincblenda*.

El programa tiene algoritmos que dan la posibilidad de añadir o quitar planos atómicos de capas inferiores, permitiendo tener una visión más clara de cuáles átomos pertenecen a la superficie y cuales a las capas inferiores y mediante la tecla F4 se pueden

guardar en un archivo de texto las coordenadas de los átomos de la superficie y capas inferiores que aparecen acompañando a los átomos en la pantalla.

Los algoritmos están basados en el álgebra lineal, mismos que se presentan a continuación.

### 3.1.1.2 Cálculos en el Programa Cristal de Zinblenda

<sup>[23]</sup>Un vector en el espacio 3-dimensional se representa mediante la triada ordenada de números  $\vec{v}'(v_x, v_y, v_z)$ , donde la  $t$  significa la transpuesta, esto es, intercambiar el vector columna por el vector renglón.

Las transformaciones lineales de reflexión, traslación, rotación y multiplicación por una escalar aplicadas a un vector  $\vec{v}'(v_x, v_y, v_z)$  son operaciones en el espacio con las cuales se pueden manipular puntos, o conjunto de puntos que representan vectores de posición en un cristal por ejemplo. Aplicando diferentes transformaciones y con el uso del producto interno y producto vectorial es posible estudiar diferentes planos y direcciones en un cristal.

La operación de multiplicar un vector por un escalar contrae o expande al vector en una cantidad  $|k|$

$$k \vec{v}'(v_x, v_y, v_z) = \vec{v}'(kv_x, kv_y, kv_z) \quad \text{Ec. 3-1}$$

tal y como se había visto en el capítulo 1.

Mientras que la transformación lineal de traslación desplaza al vector de su posición original:

$$T(\vec{t})\vec{v} = \vec{v}'(v_x, v_y, v_z) + \vec{t}'(-t_x, -t_y, -t_z) = \vec{v}'(v_x - t_x, v_y - t_y, v_z - t_z) \quad \text{Ec. 3-2}$$

La rotación de un vector  $\vec{v}'(v_x, v_y, v_z)$  por un ángulo  $\theta$  alrededor de los ejes  $x$ ,  $y$  ó  $z$  está dada mediante las matrices de transformación  $\vec{v}' = R_x(\theta)\vec{v}$ ,  $\vec{v}' = R_y(\theta)\vec{v}$  y  $\vec{v}' = R_z(\theta)\vec{v}$ , donde:

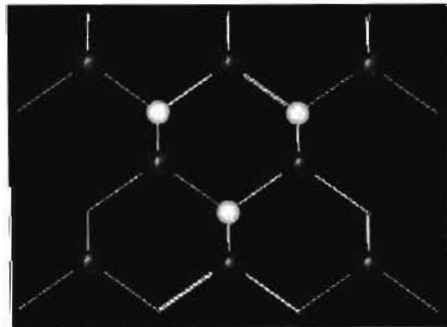
$$R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 3-3}$$

$$R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 3-4}$$

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{Ec. 3-5}$$

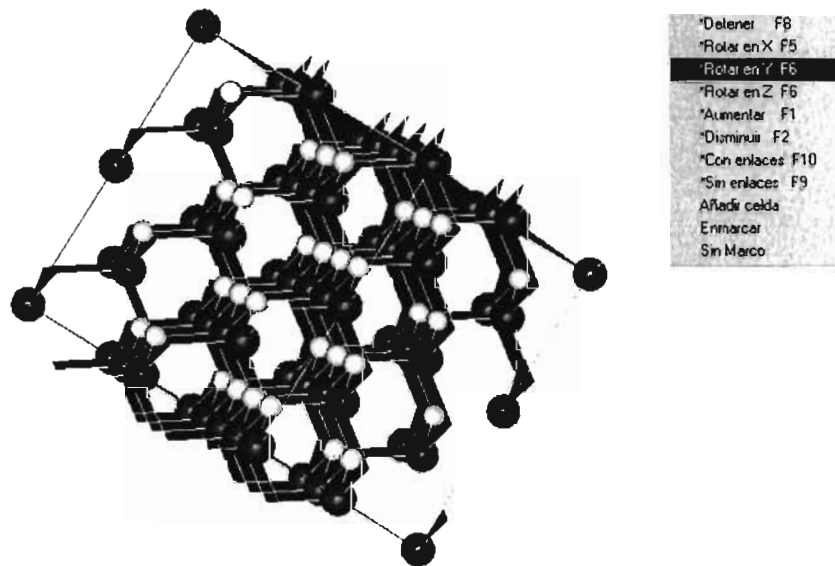
Éstas matrices tienen la propiedad de ser ortogonales. Además hay que tomar en consideración el orden en el cual se aplican pues no conmutan, por lo que se obtiene un resultado diferente al aplicar una rotación alrededor del eje  $y$  seguida de una rotación alrededor del eje  $z$  que en el orden inverso.

Habiendo estudiado las formas de transformar un vector podemos usar estos resultados para rotar, trasladar, expandir o contraer la estructura de un cristal en el programa de computadora. Primeramente se trasladan los vectores base de la zincblenda para formar un cristal de dimension  $n \times m$  celdas. Mediante la suma o resta de vectores se definen las posiciones inicial y final de los enlaces entre átomos, tomando en consideración la posición de cada átomo y si se trata de un átomo tipo A o tipo B, ya que la orientación de los enlaces "cambia" para cada tipo. Esto se observa en la figura 3.2.



**Figura 3-2.** Obtención de los enlaces para cada tipo de átomo.

Con ayuda de las matrices de rotación, es posible rotar alrededor de cualquiera de los tres ejes coordenados  $x, y$  o  $z$  al cristal para tener una mejor perspectiva. Las operaciones de rotación deben ser aplicadas a cada una de las coordenadas de los átomos que forman el cristal y a las coordenadas de sus enlaces. La Figura 3-3 muestra una captura del programa donde se puede ver cómo mediante las operaciones antes mencionadas se obtiene un cristal de tamaño  $n \times m$  y su rotación, así como los enlaces para cada tipo de átomo.



**Figura 3-3.** *Traslación y rotación de los vectores de posiciones atómicas. Suma y resta de vectores para representar enlaces en el cristal de tamaño  $n \times m$ .*

Es posible contraer o expandir las distancias interatómicas en el cristal para ver con mayor detalle su estructura, esto se logra mediante la multiplicación de una constante a todos y cada uno de los vectores de posiciones que forman la red.

Lo anterior permitió dar a la interface del usuario opciones para añadir o quitar celdas, mostrar u ocultar enlaces, expandir o contraer, rotar alrededor de los ejes coordenados mediante un menú contextual en el botón derecho del ratón o usando las teclas F1 hasta F12. Más capacidades fueron añadidas al programa, que serán descritas a continuación.

El principal uso del programa es para estudiar los diferentes cortes de planos cristalinos y ver su superficie. El algoritmo empleado para ese objetivo consistió primeramente en hacer un corte del plano en el “bulto” del cristal y finalmente aplicar una transformación tal que permitiera tener una vista aérea del plano en cuestión, esto es normal a sus superficie.

En un a primera aproximación el usuario podría hacer las rotaciones necesarias para tener una vista frontal o aérea de la superficie estudiada, pero esto resultaba bastante complicado, pues como se mencionó anteriormente, el orden en el cual se aplican las rotaciones es de importancia, además de que no se podía lograr una perspectiva exactamente normal al plano, interfiriendo con el estudio de la geometría atómica de la superficie. Entonces fue necesario hacer uso de una matriz de transformación que nos diera de manera directa una vista frontal de la superficie. Recordando que las matrices de rotación no conmutan, entonces debe hacerse una combinación de rotaciones y traslaciones para lograr que dado un vector normal al plano, transformarlo en un vector paralelo al eje  $z$  por ejemplo. Con la ecuación del plano y la transformación anterior resulta el algoritmo principal del programa, con lo cual se pueden estudiar planos cristalinos.

[24]La ecuación de un plano que intercepta los ejes coordenados en  $\frac{a_1}{h}$ ,  $\frac{a_1}{k}$  y  $\frac{a_1}{l}$ , está dada por la ecuación

$$(\vec{x} - \vec{u}) \cdot \vec{d} = 0 \tag{Ec. 3-6}$$

Donde  $\vec{u}$  es un vector en el plano y  $\vec{d}$  es un vector normal. Para el caso de un cristal con simetría cúbica, el vector de dirección  $[hkl]$  es normal al plano  $(hkl)$ .

La distancia entre planos está dada por:

$$d_{hkl} = \frac{a_1}{h} \cdot \frac{(hb_1 + kb_2 + lb_3)}{|H_{hkl}|} = \frac{1}{|H_{hkl}|} \tag{Ec 3-7}$$

donde  $H_{hkl} = hb_1 + kb_2 + lb_3$  es un vector de la red recíproca y  $a_1$  el parámetro de red. Es así que para hacer un corte en el cristal del plano de  $(hkl)$  se debe cumplir la condición de que donde son las coordenadas de los átomos. Esta condición va hacer un corte en el cristal para mostrar sólo los átomos que estén en la superficie del plano, pero aún es

necesario hacer rotaciones al cristal para tener una vista frontal de este plano en la pantalla. Por lo que es necesario realizar una serie de transformaciones y rotaciones en el espacio para con lo cual se obtiene la matriz de rotación alrededor de un eje arbitrario  $\vec{n}$

$$R(\hat{n}, \theta) = \begin{pmatrix} an_1^2 + c & an_1n_2 - sn_3 & an_1n_3 + sn_2 \\ an_1n_2 + sn_3 & an_2^2 + c & an_2n_3 - sn_1 \\ an_1n_3 - sn_2 & an_2n_3 + sn_1 & an_3^2 + c \end{pmatrix} \quad \text{Ec 3-8}$$

$$\text{con} \quad a = 1 - \cos(\theta) \quad s = \sin(\theta) \quad c = \cos(\theta)$$

y  $n_1, n_2, n_3$  las coordenadas del vector  $\vec{n} = n_1\hat{e}_1 + n_2\hat{e}_2 + n_3\hat{e}_3$  tal que  $|\vec{n}| = 1$

La forma final de la matriz que usa el programa se calcula de la siguiente manera: para rotar al plano  $(hkl)$  y tener una vista frontal de éste, es decir, hacer que el vector normal a su superficie  $[hkl]$  sea paralelo al eje z que es normal a la pantalla, se calcula el eje alrededor del cual se va a rotar el plano, el cual se obtiene con el producto cruz  $[hkl] \times \hat{k}$  normalizado, donde  $\hat{k}$  es el vector unitario en el eje z.

$$\hat{n} = \frac{[hkl] \times \hat{k}}{|[hkl] \times \hat{k}|} \quad \text{es el vector eje de rotación}$$

Sustituyendo en la matriz de la ecuación 3-8 y aplicado a cualquier punto  $(x, y, z)$  del plano obtenemos:

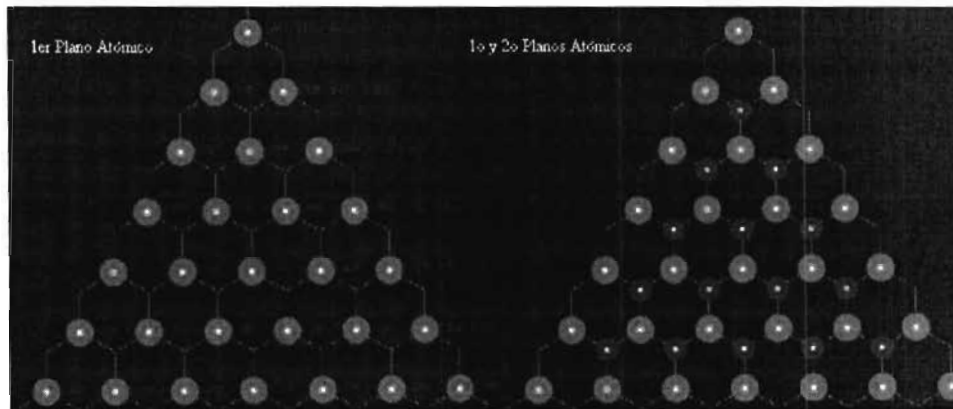
$$\begin{aligned} x' &= (an_1^2 + c)x + an_1n_2y + sn_2z \\ y' &= an_1n_2x + (an_2^2 + c)y - sn_1z \\ z' &= -sn_2x + sn_1y + cz \end{aligned} \quad \text{Ec 3-9}$$

donde

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} & r' &= \sqrt{h^2 + k^2} \\ c &= \frac{l}{r}, & a &= 1 - c, & s &= \sin(\cos^{-1}(\frac{l}{r})) \\ n_1 &= \frac{k}{r'} & n_2 &= -\frac{h}{r'} \end{aligned} \quad \text{Ec 3-10}$$

y las  $h, k, l$  son los índices de Miller del plano.

Con la ecuación 3-9 el programa calcula las nuevas coordenadas y puede desplegar el plano cristalográfico en el plano de la pantalla. También se le agregaron otras capacidades al algoritmo principal, como el poder ir recorriendo las capas atómicas inferiores para ver exactamente la posición de los átomos en las primeras capas vecinas y si tienen o no participación con enlaces libres en la superficie terminada en bulto, por ejemplo. La Figura 3-4 muestra las dos capas de átomos por debajo de la superficie (111). Las teclas F11 y F12 del teclado cumplen la función de ir quitando o añadiendo planos o mediante una opción del menú contextual mostrar todos los átomos del bulto, esto es la representación completa del corte del cristal.



**Figura 3-4.** *Secuencia de planos atómicos para la superficie (111).*

También se añadió la capacidad de desplegar las coordenadas de las posiciones atómicas con el fin de determinar direcciones de interés, distancia entre átomos y la celda unitaria, como se muestra en la figura 3-4.

### 3.1.1.3 Aplicación al plano (631)

Para tratar de entender lo que puede pasar durante un crecimiento epitaxial en MBE es necesario tomar en consideración los enlaces libres, terrazas, canales y en general la morfología de la superficie, así como la polaridad o no polaridad de la misma. El programa descrito anteriormente se utilizó para estudiar el plano con dirección (631) en el GaAs. En la Figura 3-5 se muestra una vista aérea del plano (631) en donde además se indican algunas de las direcciones que se encuentran sobre el plano. De la Figura 3-5 se observa que la superficie (631) tiene cara A y cara B, donde la A denota al Galio y la B al Arsénico para el caso del GaAs. Esta diferenciación está perfectamente representada en la superficie

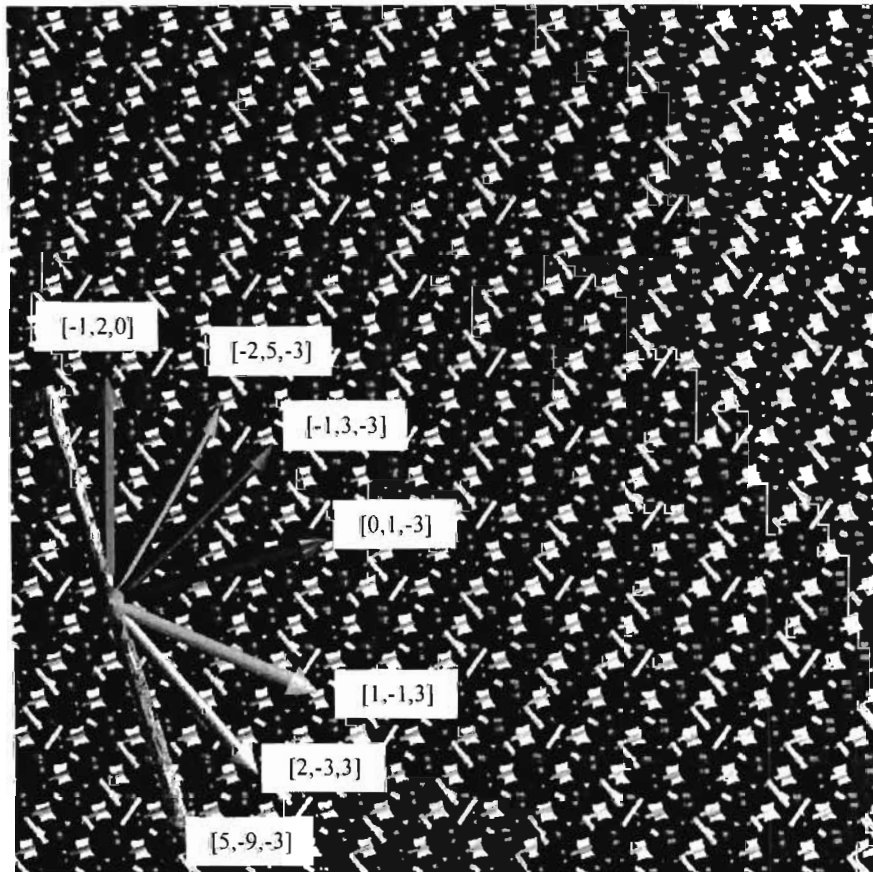


Figura 3-5. Superficie (631), terminación en bulo.



GaAs(111) donde una de las caras del cristal tiene únicamente átomos de Galio, GaAs(111)A y la otra únicamente de Arsénico, GaAs(111)B. Las diferencias en las características de la cara tipo A con respecto a la tipo B, relacionada con la diferente carga electrónica resultante de los átomos de un tipo o del otro, da lugar a significativos cambios en los ataques químicos y el crecimiento sobre las caras. [25] El llamado ataque químico selectivo actúa preferentemente o con diferentes velocidades de reacción en una dirección que en otra, poniendo de manifiesto lo antes mencionado. Se ha utilizado esta propiedad en la preparación de guías de onda, fabricación de microestructuras (MEM's)[26], etc.

Para obtener una visión completa del plano (631) es necesario considerar todos aquellos átomos que, en ausencia de reconstrucción, proporcionarían enlaces libres. Así además de los átomos localizados hasta arriba (*topmost atoms*), consideraremos los átomos que se encuentran ligeramente debajo de los anteriores y que ofrecerían enlaces libres. Un esquema del plano es dado en la Figura 3-6. En la Figura 3-6 podemos identificar la malla unitaria o red espacial dada por los vectores **a** y **b** englobando los átomos de una especie. De aquí en adelante nos referiremos a las esferas rojas como átomos Tipo A. Analizando la superficie de GaAs encontramos los vectores de la red espacial:

$$\mathbf{a} = 5.653(-1,2,0) \text{ y } \mathbf{b} = 5.653/2(0,1,-3)$$

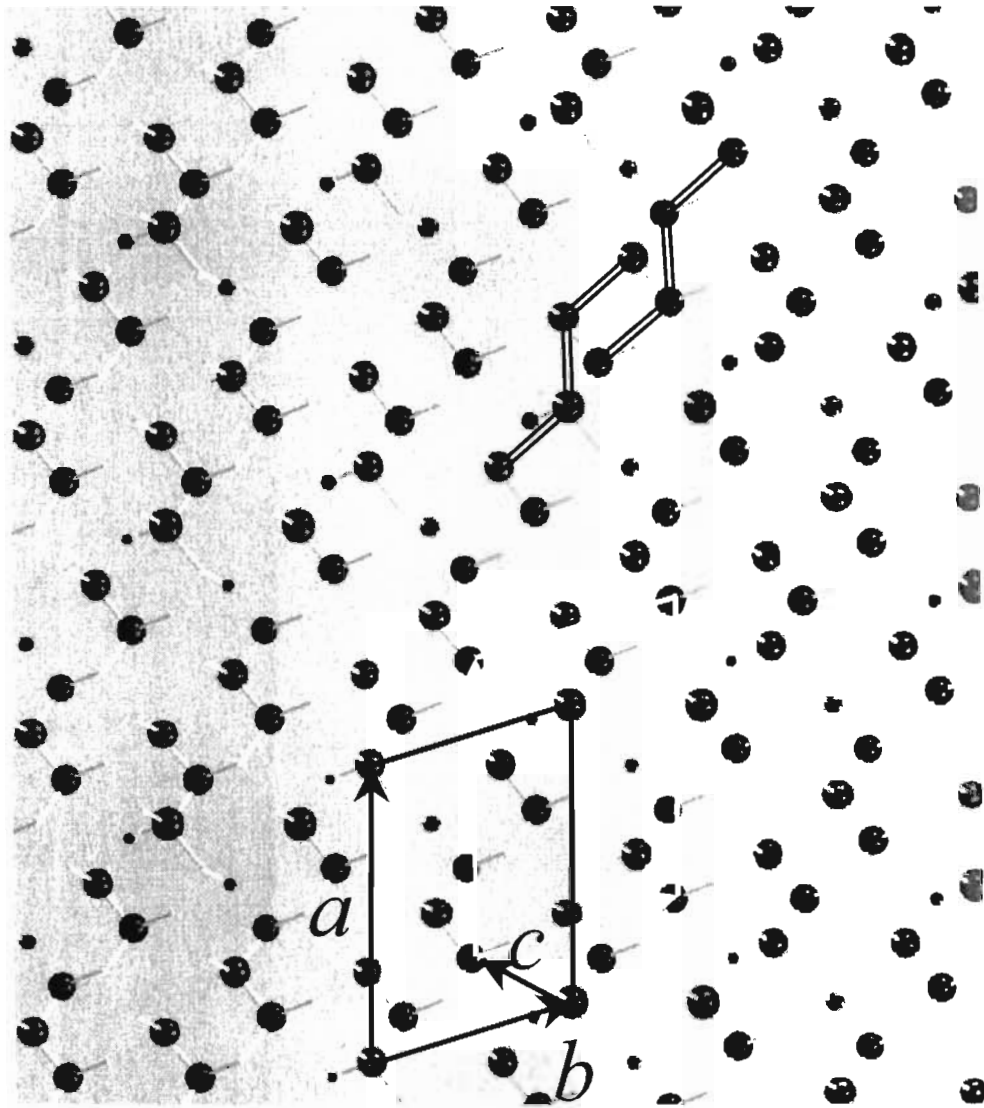
Además, podemos identificar otro vector **c** relacionado con la base de la estructura cristalina:  $\mathbf{c} = 5.653/4(-1,1,3)$ .

Un acercamiento de la celda unitaria del plano (631) se muestra en la Figura 3-7, en donde se aprecia la naturaleza polar de la superficie. En el plano (631) los átomos tipo A tienen un enlace libre a lo largo de la dirección [111]. Este enlace forma un ángulo  $\alpha$  con el vector normal a la superficie dado por:

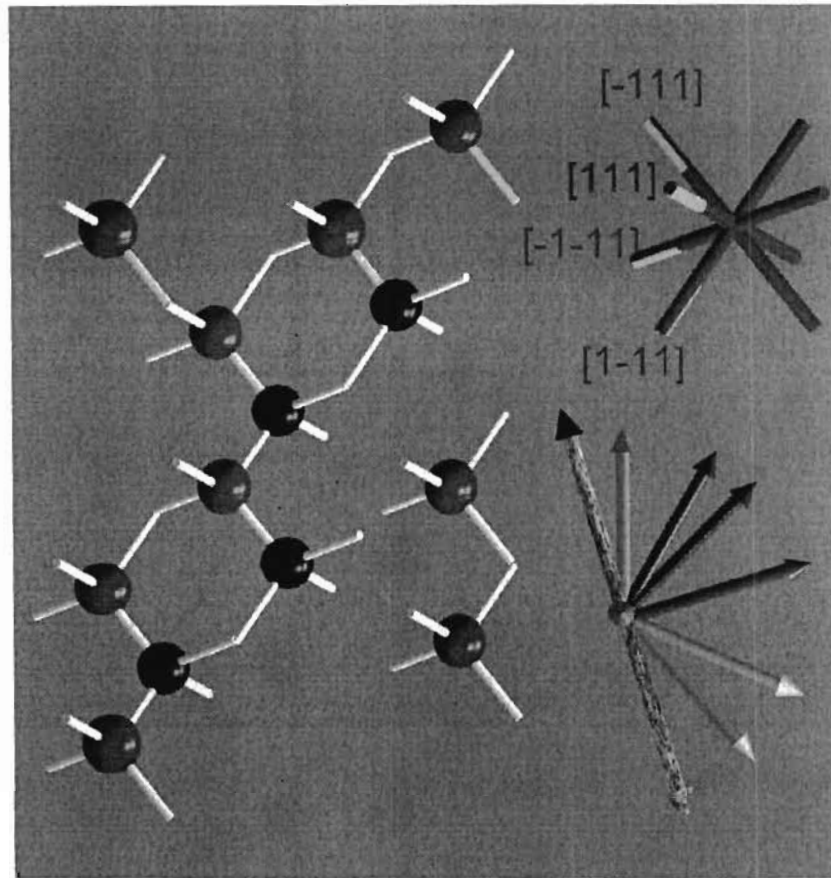
$$\alpha = \cos^{-1} \frac{[111] \cdot [631]}{\| [111] \| \| [631] \|} = 31.65^\circ$$

Por lo que el ángulo del enlace con al plano (631) es igual a  $58.35^\circ$ . Finalmente la proyección de éste enlace en el plano (631) está dirigido aproximadamente a lo largo de la dirección  $[\bar{1}1\bar{3}]$ .

Otro enlace libre de los átomos tipo A se encuentra prácticamente horizontal dirigido a lo largo de la dirección  $[1-1-1]$  cuyo ángulo  $\beta$  con el vector  $(631)$  es de  $80.19^\circ$  y con el plano es de  $9.80^\circ$ .



**Figura 3-6.** Plano  $(631)$ . Podemos identificar átomos que se encuentran cercanos a la superficie, pero no todos están en el mismo plano o altura.



**Figura 3-7.** Celda unitaria del plano (631) vista desde arriba. Se indican las direcciones  $\{111\}$  para identificar los enlaces libres. El conjunto de flechas de la parte derecha inferior indica los vectores que sobre el plano (631) se encuentran: Gris [5-9-3], Naranja [2-3-3], Azul [1-1-3], Morado [01-3], Vino [-13-3], Verde [-25-3] y verde limón [-120]

Los átomos tipo B ofrecen uno y dos enlaces. Éstos se encuentran a lo largo de las direcciones  $[11-1]$  y  $[-11-1]$ . El ángulo  $\xi$  que guarda el enlace dirigido a lo largo de la dirección  $[11-1]$  con el vector  $[631]$  es de  $47.07^\circ$  por lo que con el plano (631) es de  $42.92^\circ$ . El ángulo  $\psi$  que guarda el enlace dirigido a lo largo de la dirección  $[-11-1]$  con el vector  $[631]$  es de  $70.09^\circ$  por lo que con el plano (631) es de  $19.90^\circ$ .

Como se mencionó anteriormente, no todos los átomos con enlaces libres se encuentran hasta arriba (*topmost atoms*). El diagrama de la Figura 3-8 identifica la profundidad de los átomos respecto al plano GaAs (631). Los átomos de los vértices se toman a altura cero.

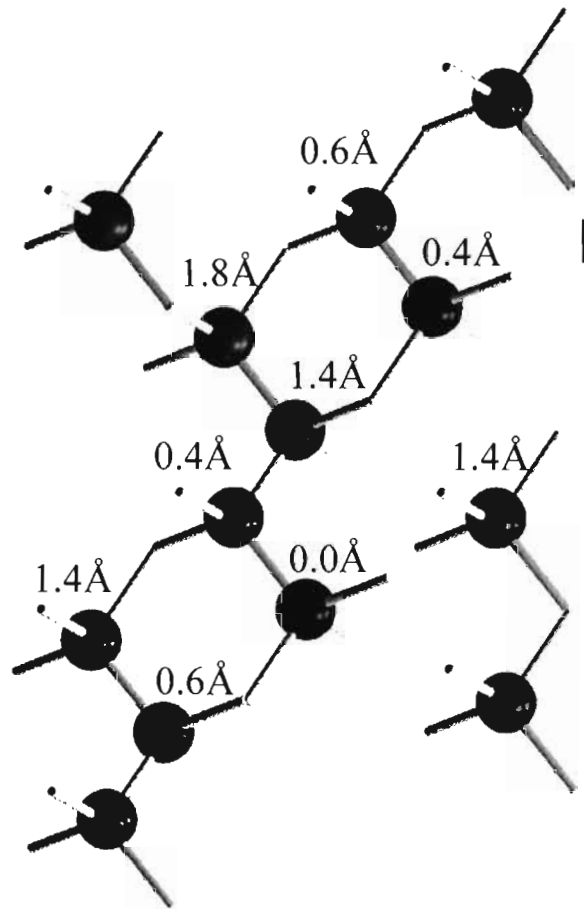


Figura 3-8. Profundidad de los átomos con enlaces libres.

La distancia entre capas atómicas consecutivas es muy corta, se puede esperar que los átomos con enlaces libres en la segunda capa sirvan como centros de nucleación, pues además pueden representar un pozo de potencial para un átomo o molécula que llegue y difunda sobre la superficie.

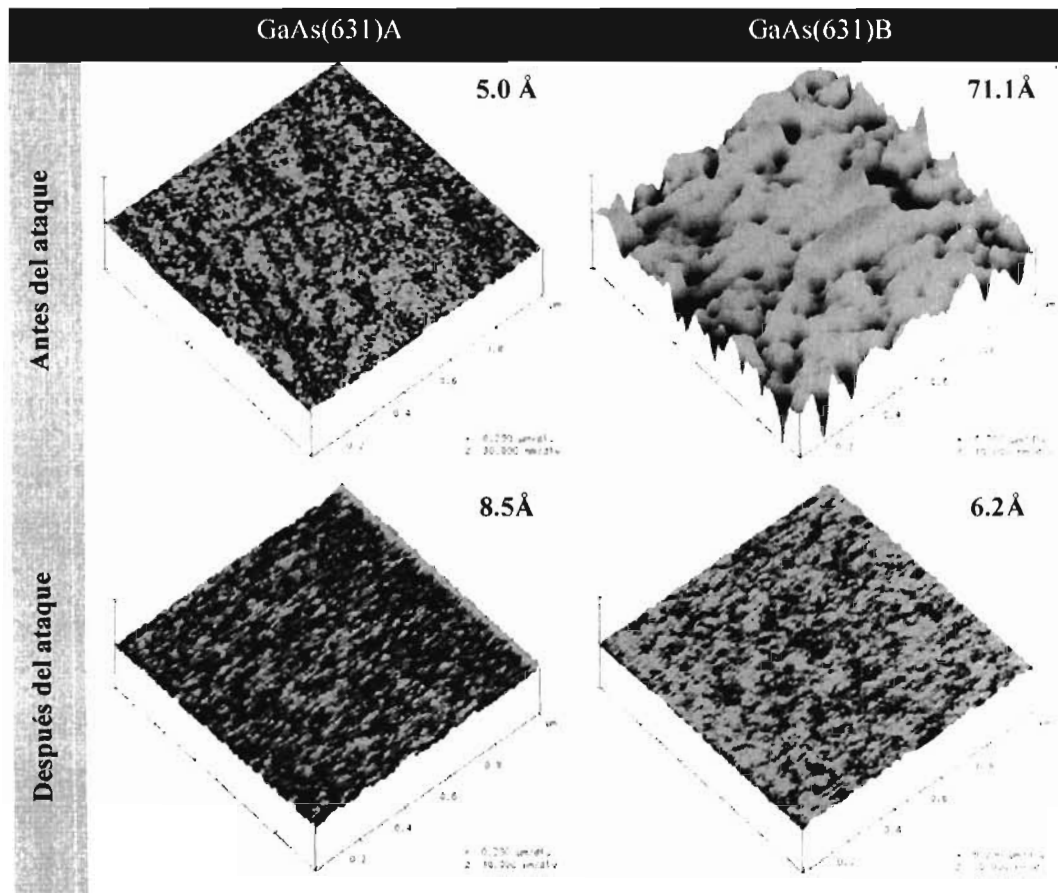
## 3.2. Estudios Experimentales

### 3.2.1 Remoción química de óxidos nativos.

Una vez realizado el estudio teórico del plano (631) de GaAs, analizamos la superficie mediante el microscopio de fuerza atómica. Cabe señalar que a fin de

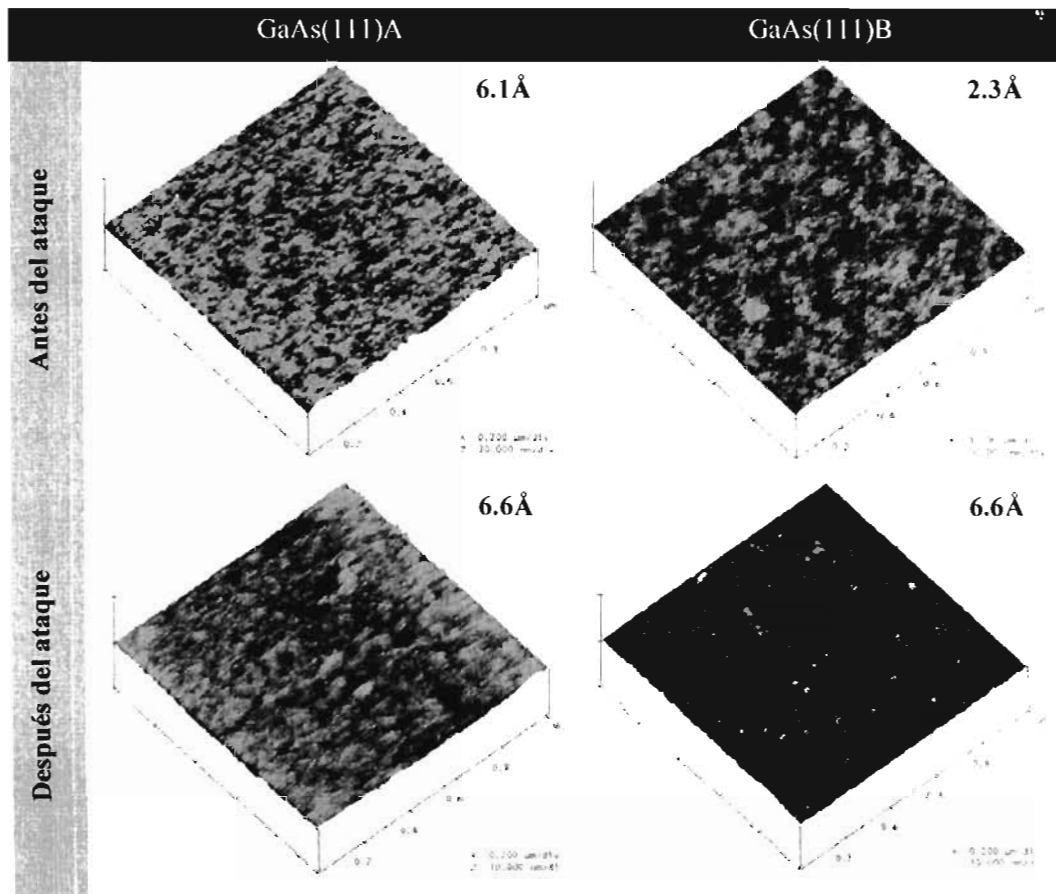
introducirlos al sistema de crecimiento y comenzar la epitaxia, es deseable someter los substratos a un proceso de remoción química de algunas capas superficiales a fin de eliminar las últimas capas oxidadas. El estudio de una preparación adecuada de la superficie del substrato y de las condiciones para un crecimiento óptimo ha sido y continúa siendo una actividad muy importante en el desarrollo exitoso de la epitaxia por haces moleculares. Se ha demostrado que ciertos contaminantes absorbidos por la superficie del substrato durante su manejo previo a la carga son muy difíciles de remover sin que se dañe la superficie. Con tales contaminantes presentes, se verían seriamente afectadas la morfología y las propiedades ópticas y de transporte de las cargas, no siendo posible en algunos de estos casos la epitaxia. Para solucionar estos problemas, los substratos deben de someterse a un riguroso régimen de preparación antes de ser cargados en el sistema de MBE. Los pasos para la preparación del substrato son los siguientes: desengrasado, tratamiento químico, formación de una capa protectora delgada de óxidos y secado. En el desengrasado se utilizó tricloroetileno y metanol y la para el ataque se preparo la solución basada en ácido sulfúrico convencionalmente utilizada en GaAs:5:1:1 de H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>: H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: H<sub>2</sub>O. Con propósitos de comparación se estudiaron paralelamente substratos de GaAs(631)A, GaAs(631)B, GaAs(111)A, GaAs(111)B, GaAs(100).

En la Figura 3-9 se muestran las imágenes de AFM antes y después de atacar las superficies (631). En la esquina superior derecha de cada imagen se anota el valor de la rugosidad media cuadrática de las superficies. Note que inicialmente la cara B muestra una rugosidad muy grande (71 Å). Esto es debido a que el proveedor de los substratos únicamente nos proporcionó cara A pulida. Es interesante notar que después del proceso de atacado, ambas superficies se encuentran en el mismo orden de rugosidad, de donde se sugiere que la solución química utilizada puede resultar adecuada para esta superficie.



**Figura 3-9.** Imágenes de AFM del GaAs(631) antes y después del ataque químico. El área de barrido es de  $1\mu\text{m}^2$ , mientras que la escala vertical es de  $30\text{nm}$ .

Por otro lado, en la Figura 3-10 se muestran las superficies A y B de GaAs(111). Mientras que la cara A parece poco sensible al ataque químico, la cara B modifica ligeramente su morfología después del ataque. Esto es ampliamente documentado en la literatura. El hecho de que la superficie termine mayoritariamente en átomos de valencia mayor (como el As), propicia mayor interacción con la solución química y puede afectar sensiblemente la morfología. El caso contrario a las superficies polares, es la superficie GaAs (100), cuyas imágenes antes y después del tratamiento químico se muestran en la Figura 3-11. Notemos que antes y después del ataque la superficie GaAs(100) muestra el mismo nivel de rugosidad.



**Figura 3-10.** Imágenes de AFM del GaAs(111) antes y después del ataque químico. El área de barrido es de  $1\mu\text{m}^2$ , mientras que la escala vertical es de 30nm.

Una vez realizado el análisis anterior concluimos que estamos listos para proceder con la epitaxia, dado que como se evidenció los ataques químicos mantuvieron en el mismo orden de rugosidad en las superficies tipo A. Además, en el caso del GaAs(631)B observamos que la solución química aplanó efectivamente la superficie.

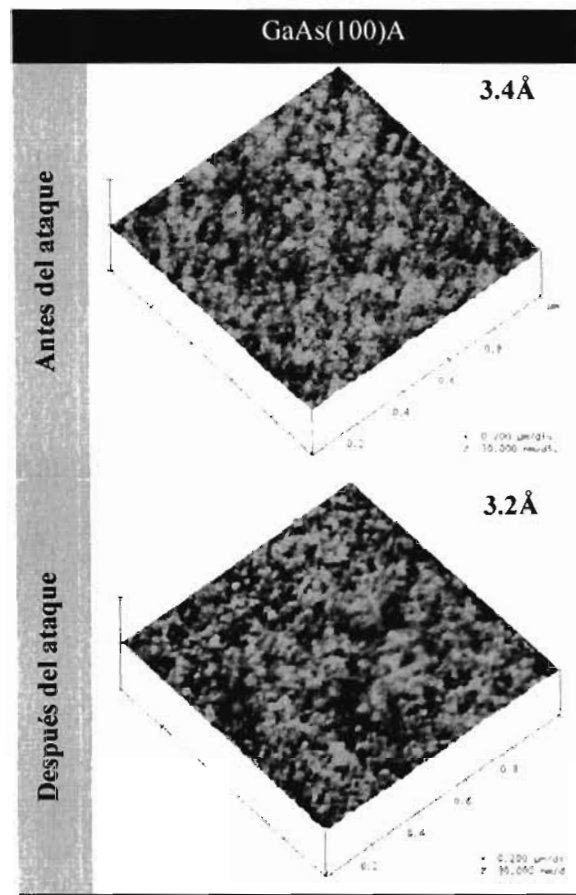


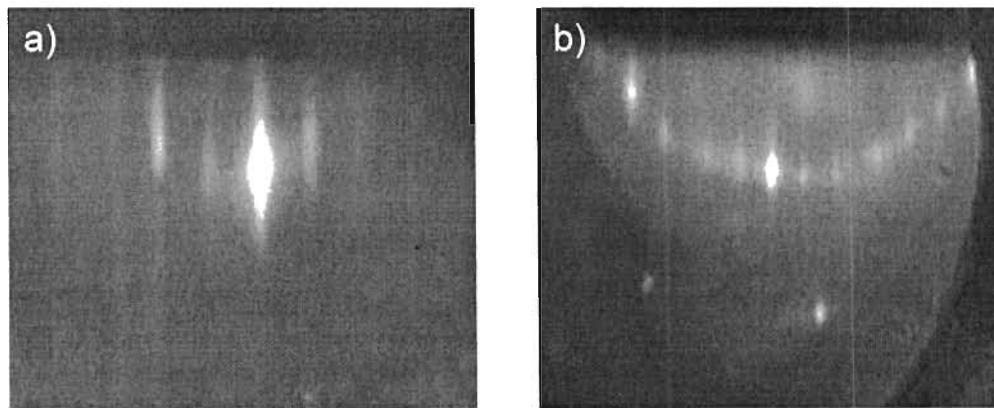
Figura 3-11. Imágenes de AFM del GaAs(100) antes y después del ataque químico. El área de barrido es de  $1\mu\text{m}^2$ , mientras que la escala vertical es de 30nm.

### 3.2.2 Desorción térmica de Óxidos

Para proceder con la epitaxia, es necesario remover térmicamente los óxidos frescos resultantes del paso anterior. Estos óxidos se evaporan al elevar el GaAs a temperaturas aproximadas de 600C. Si no existe control sobre las temperaturas del GaAs o flujo de As durante este proceso, normalmente se obtienen superficies bastante rugosas, las cuales empañan la correcta interpretación de los resultados. Así, es recomendable estudiar inicialmente el proceso de desorción de óxidos antes de iniciar el crecimiento. Durante la rampa de temperatura, fijamos nuestra atención en el patrón RHEED a lo largo de dos



direcciones:  $[-2,1,0]$  y  $[-1,3,-3]$ . Al inicio, la pantalla RHEED mostraba un patrón nebuloso sin rastro alguno de líneas, típico de una superficie amorfa o cubierta de óxidos. En la Figura 3-12 se observan los patrones RHEED observados al final del proceso de desorción térmica de los óxidos. Observamos patrones lineales y brillantes, lo cual sugiere superficies atómicamente planas y limpias. A lo largo de la dirección  $[-1, 2,0]$  observamos barras a medio orden, lo cual sugiere una reconstrucción  $2\times$ . Por otro lado, al dirigir el haz de electrones en la dirección  $[-1, 3,-3]$  el patrón presenta simetría  $6\times$ . Cabe señalar que a lo largo de las demás direcciones se observaron patrones con líneas discontinuas típico de superficies altamente escalonadas o de altos índices. Además, fue posible observar gran cantidad de líneas de Kikuchi, lo cual representa un excelente arreglo cristalino en las ultimas capas. Lo anterior muestra la elevada complejidad de la superficie (631).



**Figura 3-12.** Patrones RHEED observados a lo largo de las direcciones a)  $[-2,1,0]$  y b)  $[-1,3,-3]$  al concluir el proceso de desorción.

La planaridad predicha por RHEED es comprobada por las imágenes de AFM tomadas una vez que fueron removidas las muestras del sistema de MBE. La Figura 3-13 muestra la superficie del GaAs(631) una vez que se ha removido del sistema de MBE al concluir el proceso de desorción. Notemos que la superficie además de ser plana, no presenta la formación de agujeros o montañas, lo cual es deseable para propósitos del crecimiento. Así pues, estamos listos para hincar el crecimiento sobre esta superficie.

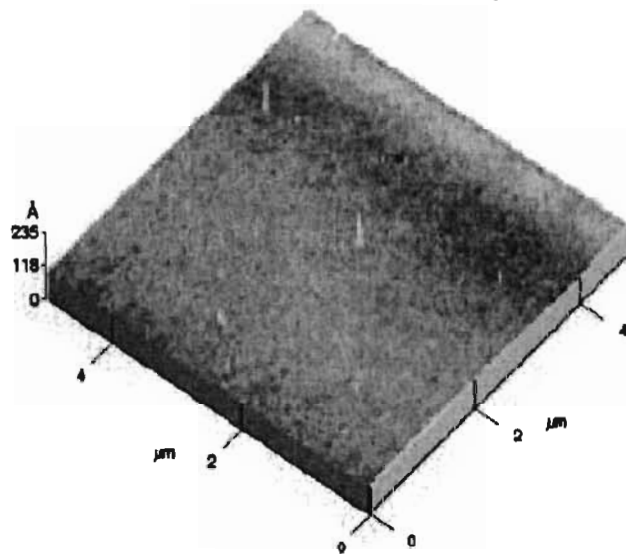


Figura 3-13. Imagen de AFM de GaAs(631) una vez concluido el proceso de desorción.

### 3.2.3 Homoepitaxia de GaAs(631)

#### 3.2.3.1 Primer Crecimiento

Para los crecimientos se utilizó un sistema vertical Riber 21 mostrado en la Figura 3-14. El adjetivo vertical viene de la disposición de sus celdas, las cuales están prácticamente verticales y cuyo flujo molecular es de abajo hacia arriba. En el primer crecimiento, el cual podemos denominar de sondeo, la desorción ocurrió a  $600^{\circ}\text{C}$  bajo flujo de As. Posteriormente se bajó la temperatura a  $590^{\circ}\text{C}$ , temperatura a la cual se depositaron  $2000 \text{ \AA}$  de GaAs. En la Figura 3-15 se presentan las oscilaciones RHEED observadas en las etapas iniciales de la deposición de GaAs, cuya periodo de oscilación coincide con la razón de crecimiento nominal. Vale la pena hacer notar que la aparición de oscilaciones RHEED lo cual sugiere que los parámetros de crecimiento tal como la temperatura y la razón de flujos As/Ga se encuentran muy cerca de los parámetros óptimos de crecimiento. Además durante la homoepitaxia en planos de altos índices no es frecuente observar oscilaciones. Las oscilaciones indican un crecimiento capa por capa lo cual puede ser muy cuestionable al tratarse de superficies muy escalonadas. Los modelos del plano

(631) precisamente mostraron una superficie rica en escalones. Sobre superficies escalonadas, el material pierde la libertad de difundirse libremente en la dirección transversal a los escalones. Las moléculas preferencialmente se nuclean justo bajo el escalón propiciando crecimiento lateral mas no capa por capa. Por lo tanto, al observar esta evidencia experimental podemos esperar de antemano una dirección preferencial de difusión superficial de los átomos de GaAs, esto deberá reflejarse en la morfología superficial.



**Figura 3-14.** Sistema vertical Riber 21 utilizado en este trabajo.

En la Figura 3-16 se muestran imágenes de AFM tomadas al final del crecimiento. Podemos observar estructuras nanopiramidales alargadas en uno de sus vértices con una densidad de aproximadamente  $5.5 \times 10^8 \text{ cm}^{-2}$ . Entonces, tal como se mostró en RHEED existe efectivamente una dirección preferencial de difusión superficial. Analizando con cuidado la dirección de barrido, concluimos que la dirección de alargamiento es la  $[-2,5,-3]$ .

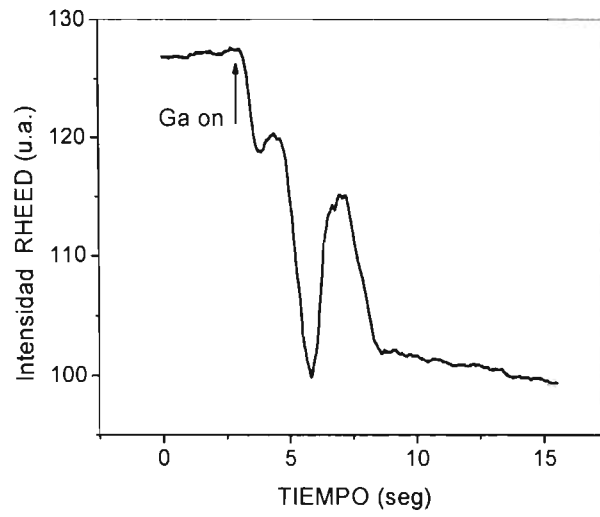


Figura 3-15. Oscilaciones en intensidad del haz especular del cañón RHEED.

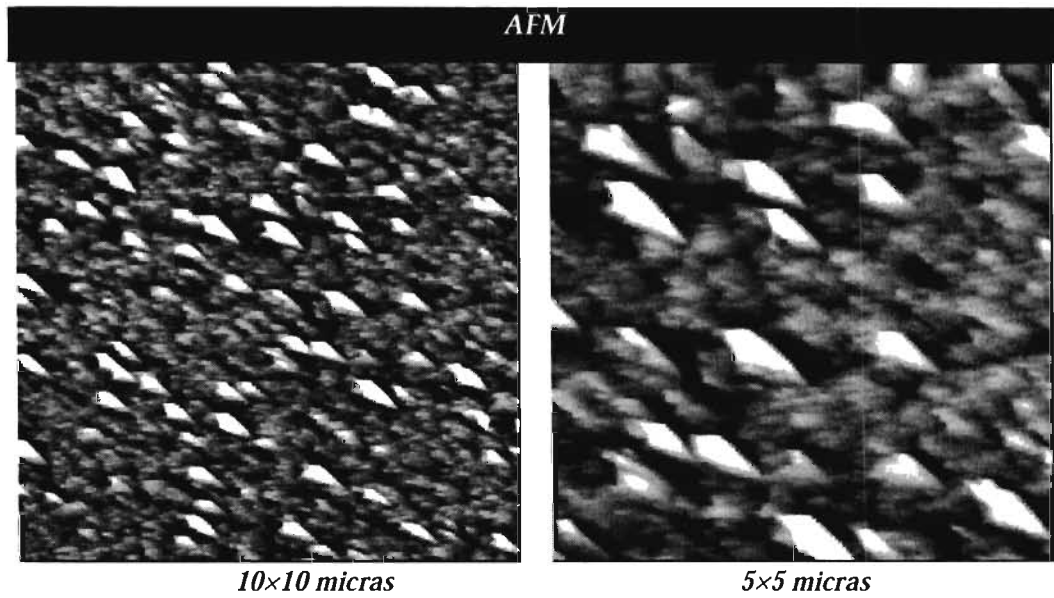
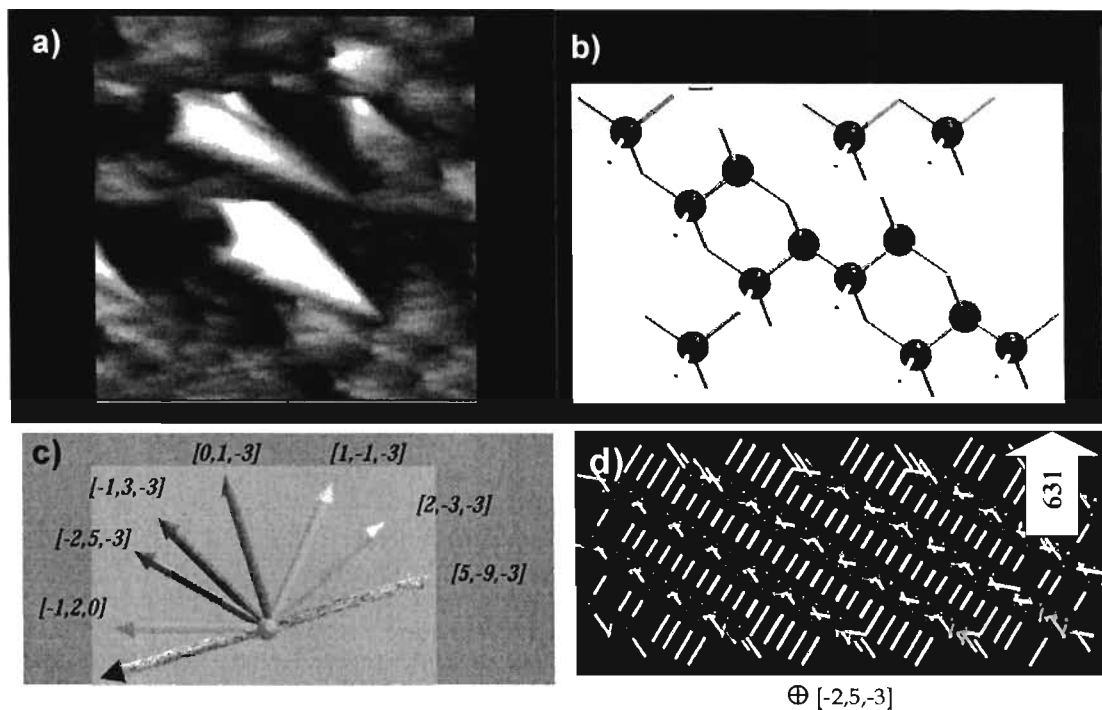


Figura 3-16. Morfología superficial de GaAs/GaAs(631). La escala vertical va de 0 a 70nm.

Por otro lado, en la Figura 3-17(a) se muestra un acercamiento a dos de las nanopirámides. Es interesante notar que el crecimiento de GaAs aparentemente ha copiado la estructura de la celda unitaria. Observemos la concordancia que existe entre la forma de la base de la pirámide y la malla unitaria del plano (631), Figura 3-17(b). Por otro lado, analizando la sección transversal al plano (631) a lo largo de la dirección  $[-2,5,-3]$ , Figura 3-17, se encuentran filas de átomos o canales lo cual sugiere que a lo largo de ésta dirección los átomos podrían moverse más libremente, en completo acuerdo con lo observado por AFM.



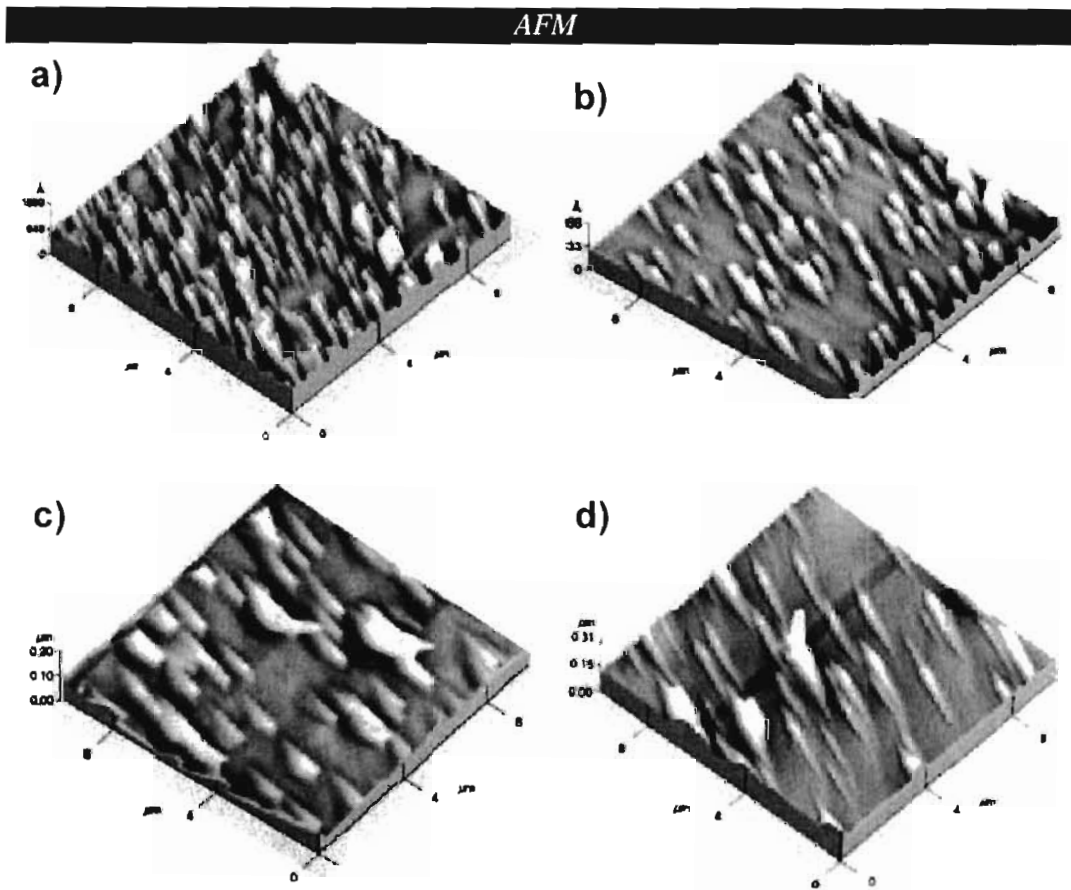
**Figura 3-17.** a) Acercamiento a la imagen de AFM en torno a una pirámide. b) Malla unitaria mostrando una geometría a una escala mucho mayor, pero muy similar a la base de la pirámide. c) Diagrama de vectores sobre el plano (631) de los incisos (a) y (b). d) Vista transversal al plano (631) a lo largo del vector  $[-2,5,-3]$ . Note la presencia de canales.

### 3.2.3.2 Nucleación en función de la temperatura

Uno de los parámetros más importantes de los cuales depende la longitud de difusión durante el depósito de materiales es la temperatura de crecimiento. Así, con el propósito de verificar la existencia de una dirección preferencial de movimiento de los

átomos en miras a la obtención de hilos cuánticos, se realizó una serie de crecimientos en los cuales se varió la temperatura del sustrato de 490 a 576°C. Se mantuvo constante para todas las muestras la relación  $As_4/Ga=20$  y el tiempo de depósito de 30min, lo cual resulta en aproximadamente 3600 Å.

En la Figura 3-18 se muestran las imágenes obtenidas por AFM de esta serie de crecimientos. En ellas puede apreciarse la formación de las nanoestructuras descritas anteriormente y cómo la forma de las mismas varía con la temperatura de crecimiento.



**Figura 3-18.** Imágenes obtenidas por AFM de las muestras crecidas a a) 490, b) 510, c) 540 y d) 576°C. El área de barrido es de  $10\mu m^2$ .

La altura y longitud promedio de las nanoestructuras a lo largo de la dirección [-2,5,-3] se muestra en la Figura 3-19. Observemos que el aumento de su longitud tiene dependencia exponencial con la temperatura, mientras que el cambio en su altura posee dependencia lineal. Por lo tanto el principal efecto que tiene el aumentar la temperatura es un alargamiento de las nanoestructuras a lo largo de la dirección [-2,5,-3]. De hecho el ancho de la estructuras varía muy poco (de 400 a 500 nm).

A manera de conclusión, observamos que la temperatura modifica significativamente la forma de las pirámides dado que propicia mayor difusión superficial a lo largo de la dirección [-2,5,-3]. Consideramos que variando otros parámetros de crecimiento es posible alongar aún más las islas permitiendo la síntesis de geometrías muy semejantes a los hilos cuánticos.

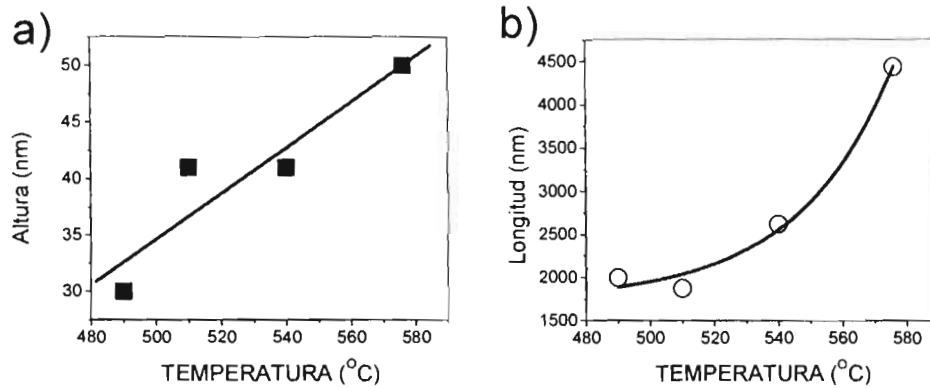


Figura 3-19. Dependencia de la a) altura y b) longitud de las nanoestructuras piramidales en función de la temperatura de crecimiento.

## REFERENCIAS

- [21] <http://www.opengl.org>
- [22] <http://www.opengl.org/resources/libraries/glut.html>
- [23] Anthony J. Pettofrezzo, "Matrices and Transformations", Ed Dover, 1988
- [24] Donald E. Sands, "Vectors and Tensors in Cristallography", Ed. Dover, 1995
- [25] Sangwal, Keshra, "Etching of crystals: theory, experiments and applications" North-Holland, 1978
- [26] "Modelling MEMS and NEMS",



# Capítulo 4

---

## CONCLUSIONES

Se realizaron los primeros estudios sobre GaAs(631). Desde la simulación del plano, hasta la homoepitaxia. Dentro de las conclusiones más relevantes resultantes de este trabajo de investigación, podemos resaltar las siguientes:

- Los estudios teóricos del plano permitieron obtener la estructura atómica de la superficie, malla unitaria, enlaces libres y topología de la celda unitaria. Mediante las vistas transversales del plano encontramos que existen canales orientados a lo largo de la dirección  $[-2,5,-3]$ .
- Los substratos de GaAs(631) se sometieron a tratamientos químicos a fin de remover los óxidos nativos de la superficie. Encontramos que la solución propuesta suaviza efectivamente la superficie. El orden de rugosidad del GaAs(631) después de los ataques sugiere superficies con polares de acuerdo a la comparación con las superficies (100) y (111).
- Se analizó la homoepitaxia de GaAs(631) en donde se observan estructuras nanométricas piramidales. Éstas pirámides son alargadas en uno de sus vértices a lo largo de la orientación  $[-2,5,-3]$ , mostrando concordancia con la distribución de átomos en las simulaciones teóricas de la superficie.
- En los experimentos en función de la temperatura se observa un alargamiento de las nanoestructuras a lo largo de la dirección  $[-2,5,-3]$  debido al aumento de la longitud de difusión superficial de las moléculas con la temperatura.
- Este estudio abre la posibilidad de sintetizar Nanoalambres autoorganizados.