

Anisotropía óptica de semiconductores III-V

W. Luis Mochán y Rubén G. Barrera. Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

RESUMEN

Se calcula el espectro de anisotropía óptica de la cara (110) de GaAs tomando en cuenta el efecto de campo local superficial. El modelo empleado consiste en una red de entidades polarizables. Usando una red fcc se obtiene para la cara (110) un resultado mucho mayor al experimental, mientras que para la cara (001) no se obtiene anisotropía alguna. Esto contrasta con los resultados obtenidos para Si, los cuales reproducen los resultados experimentales. Los cálculos mejoran notablemente al introducir una segunda red fcc con una polarizabilidad adecuada, para reproducir la estructura de zincblenda, y al tomar en cuenta la reconstrucción de la superficie.

ABSTRACT

The optical anisotropy spectrum of (110) GaAs is calculated taking into account the surface local field effect. The model employed consists of a lattice of polarizable entities. Using an fcc lattice we obtain a much larger result for the (110) face than observed experimentally, while we do not obtain any anisotropy for the (100) face. This contrast with the results for Si, which agree quite well with experiment. The calculation improves

considerably upon introduction of a second fcc lattice with an adequate polarizability to attain the zincblenda structure, and by taking into account the surface reconstruction.

1. INTRODUCCIÓN

Tradicionalmente, las espectroscopías ópticas han sido consideradas poco adecuadas para el estudio experimental de la física de superficies. El centro de atención de esta última es la estructura geométrica y electrónica de una región que no se extiende más allá de unos cuantos Angstroms de la frontera de algún sólido, mientras que la radiación electromagnética (cerca al visible) tiene distancias de penetración y de escape muy superiores a los cientos de Angstroms. Es por ello que la luz reflejada por un sólido lleva más información sobre la estructura de su interior que de su superficie. Por otro lado, su gran longitud de onda impide obtener información sobre la geometría empleando el fenómeno de difracción.

A pesar de los inconvenientes anteriores, las espectroscopías ópticas ofrecen un gran atractivo. Este reside en la existencia de materiales transparentes, lo cual permite estudiar las interfaces sólido-gas, sólido-líquido y sólido-sólido, inaccesibles a otras espectroscopías tales como el bombardeo electrónico. El estudio óptico de interfaces in situ requiere: (i) minimizar aquella parte de la señal proveniente del interior, como en los estudios elipsométricos cerca del ángulo crítico, (ii) observar fenómenos puramente superficiales, como la excitación de plasmones-polaritones de superficie o generación de segundo armónico en sistemas con simetría frente a inversiones, o bien, (iii) suprimir la señal proveniente del interior modulando la superficie y observando únicamente la parte modulada de la respuesta, como en la electro-reflectancia de metales y la reflectancia diferencial de superficies rugosas.

Muy recientemente se ha desarrollado una espectroscopía correspondiente a las dos últimas clases de técnicas mencionadas arriba. Esta consiste en la observación de la anisotropía en la reflectancia de un cristal con simetría cúbica. La respuesta óptica de un material a un campo de longitud de onda larga está caracterizada por un tensor de rango 2: su función dieléctrica. Los únicos tensores compatibles con la simetría cúbica del cristal son los múltiplos del tensor identidad. De allí que el interior de un cristal cúbico sea isotrópico en lo que a sus propiedades ópticas concierne. De haber una anisotropía, estaría originada en la reducción de la simetría debido a la presencia de la interface. Por lo tanto, de una medición de la anisotropía se puede obtener información sobre la superficie. Dicha anisotropía se puede medir rotando al cristal alrededor de la normal a su superficie y observando aquella parte de la reflectancia que oscila con el doble de la frecuencia de giro.

Una fuente de anisotropías superficiales es la estructura electrónica superficial. Diversos cristales tienen estados localizados en ciertas caras cristalinas. Sus reglas de selección pueden diferir de las del bulto, de forma que la absorción de luz debida a excitación de electrones de valencia a estados de superficie vacíos, o desde estados de superficie llenos a la banda de conducción, sólo sea permitida para ciertas direcciones de polarización. De esta forma, los estados de superficie se pueden manifestar como una anisotropía en la reflectancia a frecuencias menores a las de la brecha electrónica [1].

Sin embargo, en un trabajo anterior [2] se predijo teóricamente que aún ignorando el cambio en la estructura electrónica, habría una anisotropía considerable originada en el cambio del efecto de campo local cerca de la superficie. Dicho efecto consiste en la interacción entre distintas regiones de un cristal mediada por las fluctuaciones espaciales del campo electromagnético, las cuales son inducidas por la estructura atómica de la materia. Como el entorno de un átomo en la superficie difiere del de uno en el interior, el campo local que lo polariza también es distinto del campo isotrópico del bulto.

El efecto de campo local superficial puede originar anisotropías ópticas aún a frecuencias mayores que la de la brecha prohibida. Dichas anisotropías fueron observadas [3] en la cara (110) de Ge, y explicadas cuantitativamente utilizando un modelo de entidades polarizables puntuales [4]. Este modelo se ha extendido al estudio de capas adsorbidas [5] y se ha mostrado que la dependencia del campo local de la posición es tan grande que de un espectro de anisotropías se puede deducir el sitio de adsorción con una resolución subatómica.

Recientemente se ha medido el espectro de anisotropías de distintas caras de GaAs [6, 7], por lo cual en este trabajo se aplicará la teoría del campo local superficial a dichos cristales.

II. TEORÍA Y RESULTADOS

Iniciamos nuestro cálculo dividiendo al cristal en tetrahedros, cada uno con un átomo en el centro unido covalentemente a un átomo en cada vértice. Las estructuras de diamante y de zincblenda se pueden visualizar como una red fcc de dichas unidades. En el interior del cristal cada tetrahedro se puede modelar por una entidad puntual con una polarizabilidad isotrópica Γ por unidad de volumen relacionada con la función dieléctrica macroscópica ϵ a través de la relación de Clausius-Mossoti:

$$\Gamma = 3(\epsilon - 1) / [4\pi(\epsilon - 1)] \quad (1)$$

Para calcular la contribución dipolar al efecto de campo local superficial, ignoramos los cambios en la estructura electrónica cerca de la super-

experimental en GaAs (110). La otra contribución es el efecto electroóptico que aparece en muestras dopadas debido al campo eléctrico intenso que presentan en su superficie [9]. Del valor del parámetro ajustable se puede obtener la polarizabilidad de cada una de las dos submallas que conforman la red cristalina del GaAs. También estudiamos los efectos de la reconstrucción superficial variando la posición del primer plano de As. Se observó que esta produce cambios en la forma de línea en ciertas regiones del espectro.

En conclusión, mostramos que el efecto de campo local superficial es una contribución importante al espectro de anisotropías ópticas de semiconductores cúbicos, que el espectro es altamente sensible al estado de la superficie y a la distribución de la polarizabilidad entre los distintos sitios del cristal. El modelo empleado es extremadamente simple y recurre a varias aproximaciones que no hemos pretendido justificar desde el punto de vista microscópico. En particular se debe calcular la polarizabilidad de los sitios aniónicos y catiónicos y su dependencia en la frecuencia y en la distancia a la superficie. También se debe calcular la anisotropía de la cara (100) de GaAs y verificar si esta puede ser ajustada usando el mismo valor de Γ_2 que empleamos para la cara (110). Esto será el objeto de un trabajo posterior.

IV. AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a S. E. Acosta-Ortiz y A. Lastras-Martínez por haber discutido sus resultados con nosotros antes de su publicación, y a J. Récamier por sus múltiples sugerencias.

Este trabajo fue realizado con el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (México) bajo el contrato PCEXCNA-0440428.

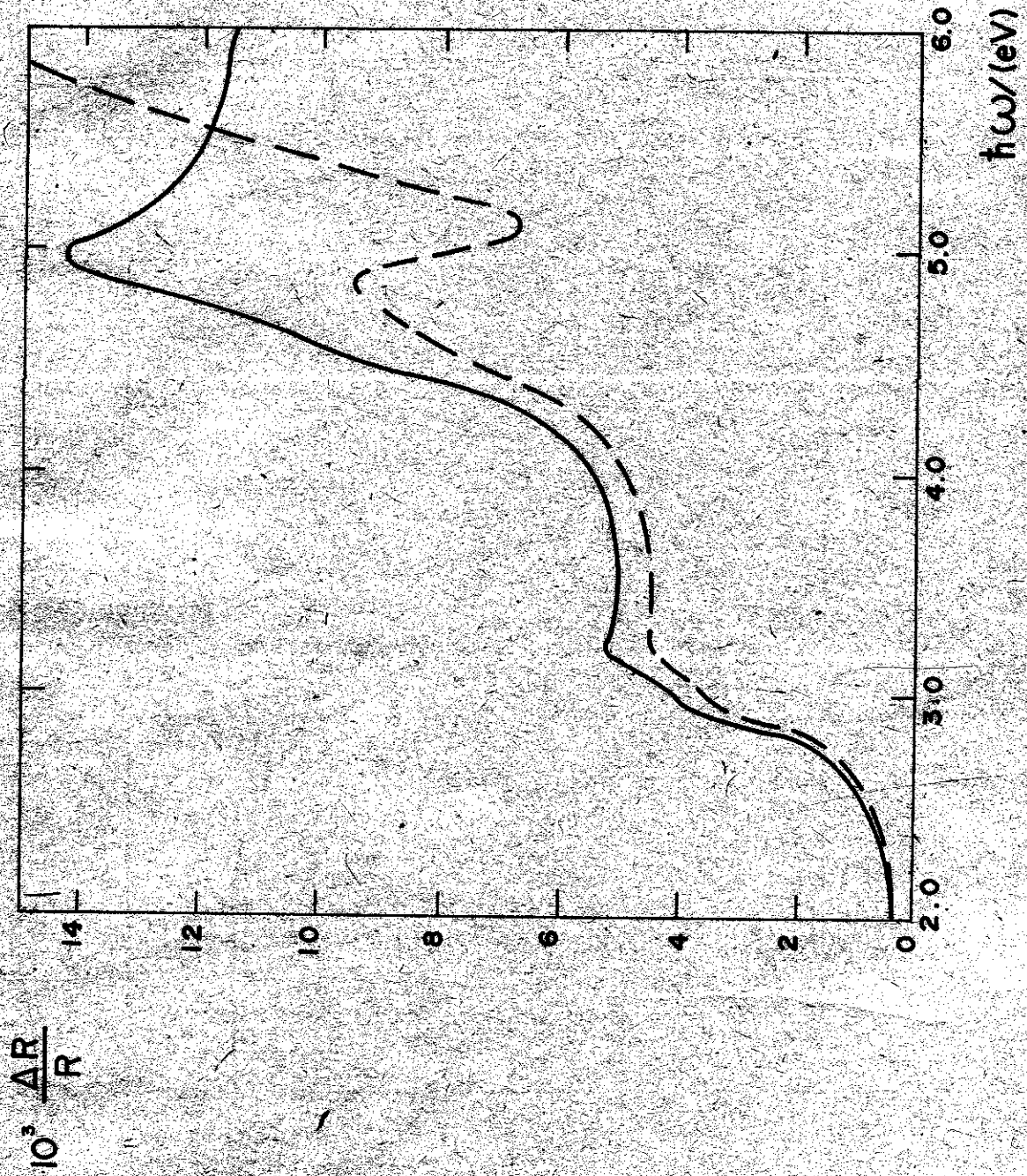


Figura 1. Espectro teórico (línea continua) y experimental (línea discontinua) de anisotropía óptica del Si (110).

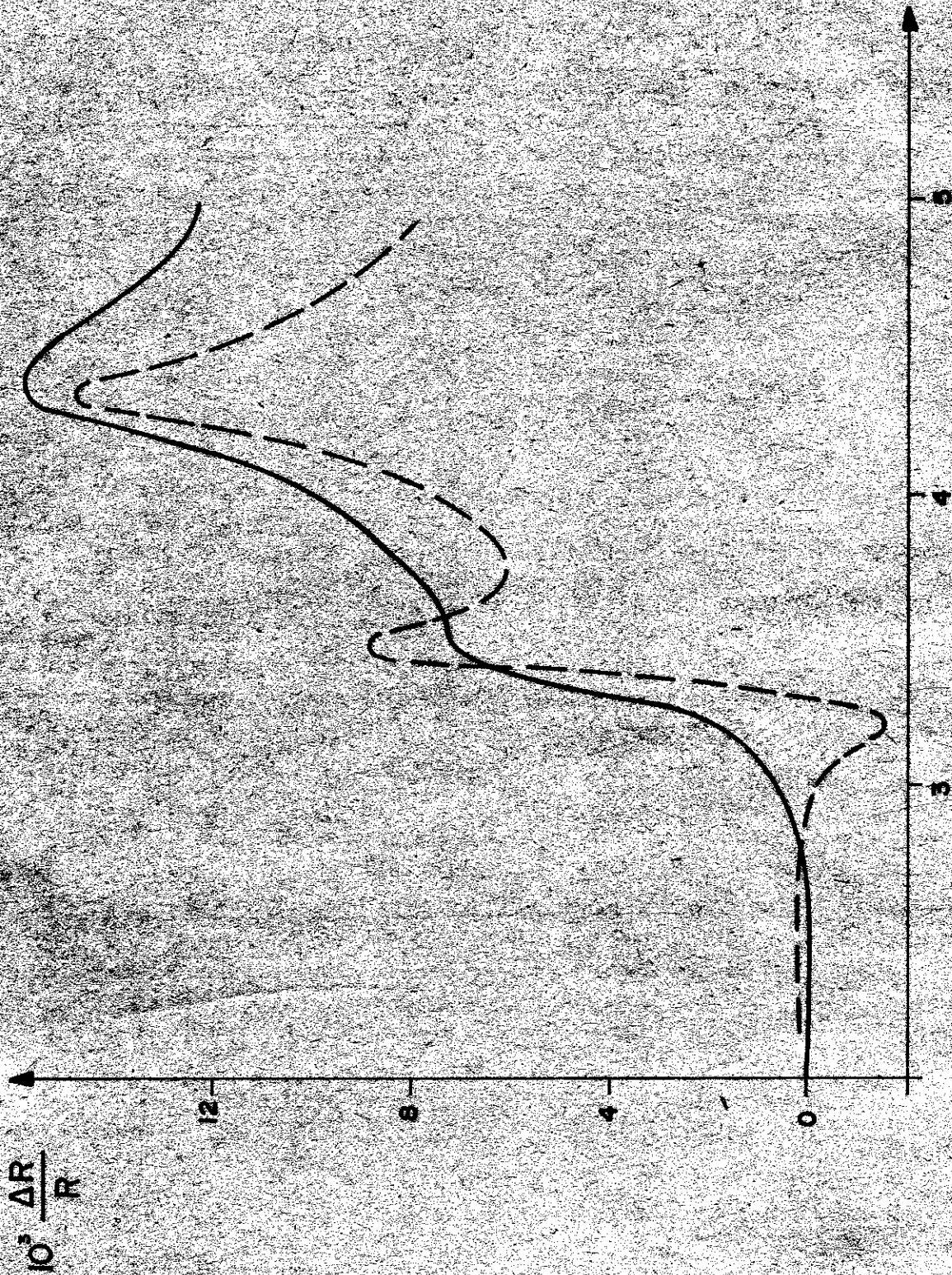


Figura 2. Espectro de anisotropía óptica calculado para GaAs (110) sin línea continua y con (línea discontinua) reconstrucción superficial, usando un modelo de red fcc.

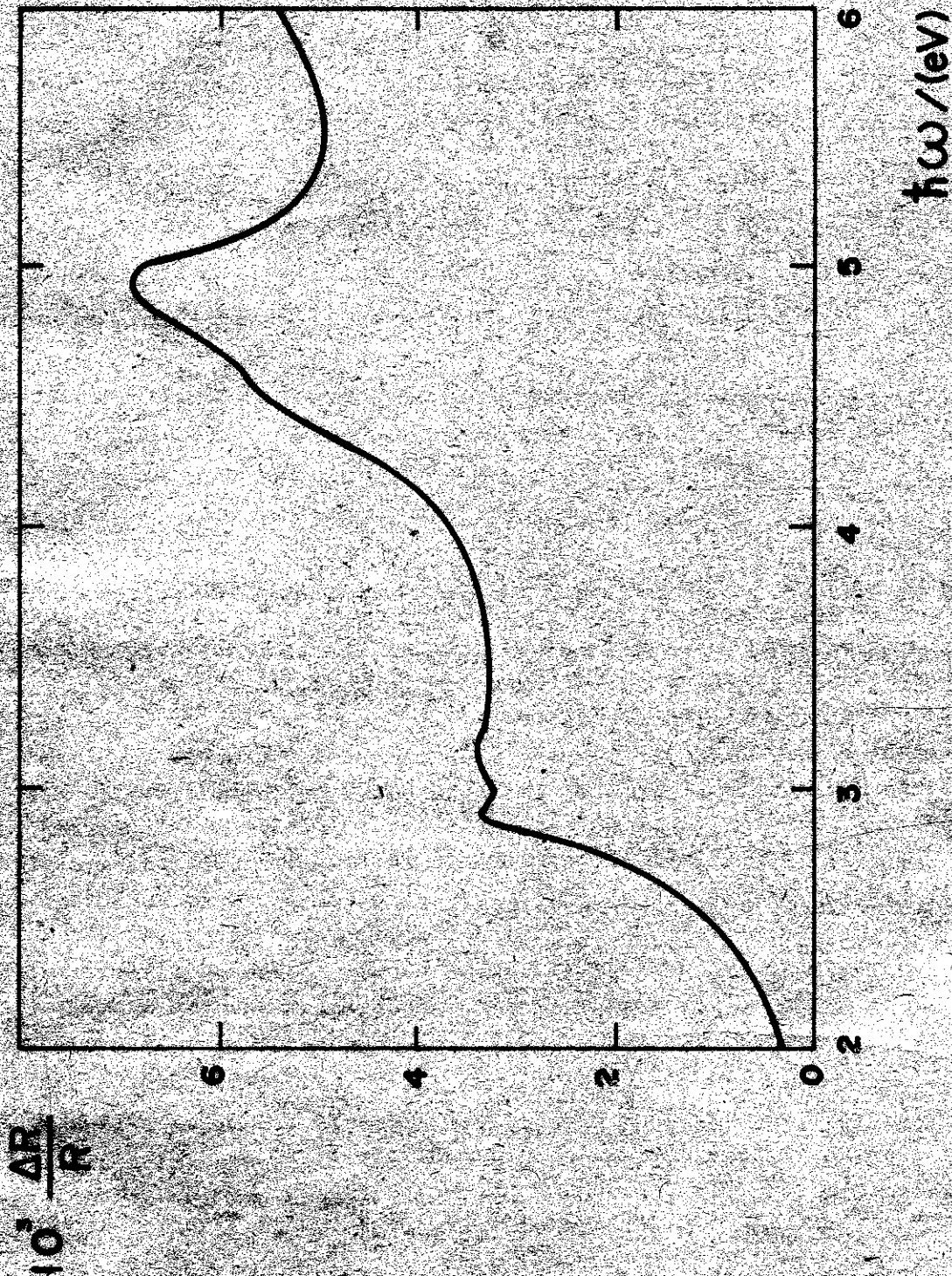


Figura 3. Espectro de anisotropía óptica calculado para GaAs (110) usando un modelo de dos redes fcc, una de ellas con polarizabilidad $\Gamma_2 = 0.03$.

BIBLIOGRAFÍA

1. Chiaradia, P., G. Chiarotti, S. Nannarone y P. Sassaroli
Solid State Commun. 26, 813 (1978); P. Chiaradia, A. Cricenti,
S. Selci y G. Chiarotti; Phys. Rev. Lett. 52, 1145 (1984);
A. Tadjeddine, D. M. Kolb y R. Kötz, Surf. Sci. 101, 277 (1980);
D. M. Kolb, W. Boeck, Kai-Ming Ho y S. H. Liu, Phys. Rev. Lett. 47,
1921 (1981); R. Del Sole y A. Selloni, Phys. Rev. B 30, 883 (1984);
R. del Sole, Solid State Commun. 50, 825 (1984).
2. Mochán, W. Luis y Rubén G. Barrera
J. de Phys. (Paris) Colloq. 45, C5-207 (1984).
3. Aspnes, D. E. y A. A. Studna
Phys. Rev. Lett. 54, 1956 (1985).
4. Mochán, W. Luis y Rubén G. Barrera
Phys. Rev. Lett. 55, 1192 (1985).
5. _____
Phys. Rev. Lett. 56, 2221 (1986).
6. Aspnes, D. E. y A. A. Studna
Reflectance-difference spectroscopy of (110) GaSb and InP, por publicarse.
7. Acosta Ortiz, S. E. y A. Lastras-Martínez
Solid State Commun. (en prensa).
8. Nijboer, B. R. A. y F. W. DeWette
Physica (Utrecht) 23, 309 (1957); 24, 422 (1958); F. E. DeWette y
G. E. Schacher, Phys. Rev. 137, A78 (1965).
9. Acosta-Ortiz, S. E. y A. Lastras-Martínez
En preparación.