



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ



Facultad de Ciencias

Síntesis de hilos cuánticos y estudio
teórico por COMSOL de la formación
del cristal de Wigner

Tesis

Para obtener el grado de Maestro en
Ciencias Aplicadas

Presenta:

Ing. Elihu Hazel Sánchez Martínez

Director de tesis: Dr. Esteban Cruz Hernández

DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD DE LA TESIS

Yo, Elihu Hazel Sánchez Martínez, estudiante del Posgrado en Ciencias Aplicadas de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, como autor de la tesis “Síntesis de hilos cuánticos y estudio teórico por COMSOL de la formación del cristal de Wigner.”, declaro que la tesis es una obra original, inédita, auténtica, personal, que se han citado las fuentes correspondientes y que en su ejecución se respetaron las disposiciones legales vigentes que protegen los derechos de autor y de propiedad intelectual e industrial. Las ideas, doctrinas, resultados y conclusiones a los que he llegado son de mi absoluta responsabilidad.

Resumen

Esta tesis presenta un estudio experimental sobre la síntesis de una heteroestructura de hilos cuánticos de GaAs entre barreras de $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$, utilizando un sistema de epitaxia de haces moleculares y la auto-organización generada por el uso de sustratos de alto índice de GaAs (631). En paralelo, se realizó un estudio teórico de la interacción de muchos electrones dentro de los hilos teniendo en cuenta las especificaciones de las muestras crecidas. Para ello, se resolvió la ecuación de Schrödinger considerando el potencial de Yukawa mediante el método de elemento finito utilizando el software COMSOL Multiphysics. El objetivo de este estudio es la fabricación de hilos cuánticos con las características necesarias para explorar fenómenos físicos tales como el transporte electrónico, la formación de un cristal de Wigner y proponer sus posibles aplicaciones.

El contenido de la tesis está dividido en 5 capítulos. En el primer capítulo, para clarificar la motivación y objetivos de esta tesis, se da una breve descripción del estado del arte del tema de hilos cuánticos, resaltando su importancia y sus potenciales aplicaciones tecnológicas. En el capítulo 2 se presentan antecedentes sobre diversos tópicos utilizados en el desarrollo de este trabajo, tales como fundamentos teóricos sobre semiconductores, del crecimiento epitaxial sobre sustratos de alto índice, del cristal de Wigner y la descripción del modelo de potencial efectivo de Yukawa para tratar el problema de muchos cuerpos. El capítulo 3 está dedicado a describir las técnicas experimentales de crecimiento y caracterización utilizadas: sistema de epitaxia por haces moleculares para la síntesis de los hilos cuánticos, microscopía de fuerza atómica para el análisis morfológico de la superficie de las muestras, análisis por fotoluminiscencia y fotorreflectancia. En el capítulo 4 se describen los pormenores sobre el diseño de la heteroestructura de hilos de GaAs/AlGaAs con las condiciones adecuadas para realizar eventuales experimentos, las condiciones de crecimiento y se describe también la interfaz física diseñada en COMSOL Multiphysics que fue utilizada para resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger-Yukawa. En el capítulo 5 se presentan y discuten los resultados obtenidos tanto del estudio experimental como del estudio teórico y, finalmente, se describe el trabajo a futuro de esta tesis.

Abstract

This thesis presents an experimental study about the synthesis of a GaAs quantum wires heterostructure between $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$ barriers, using a molecular beam epitaxy system and the self-organization generated by the use of high GaAs index substrates. (631). In parallel, a theoretical study of the interaction of many electrons within the wires was carried out taking into account the specifications of the grown samples. For this, the Schrödinger equation was solved considering the Yukawa potential utilizing the finite element method using the COMSOL Multiphysics software. The objective of this study is the manufacture of quantum wires with the necessary characteristics to explore physical phenomena such as electronic transport, the formation of a Wigner crystal and propose their possible applications.

The content of the thesis is divided into 5 chapters. In the first chapter, to clarify the motivation and objectives of this thesis, a brief description of the state of the art of the subject of quantum wires is given, highlighting its importance and its potential technological applications. Chapter 2 presents background information on various topics used in the development of this work, such as theoretical foundations on semiconductors, epitaxial growth on high index substrates, the Wigner crystal, and the description of Yukawa's effective potential model to treat the problem of many bodies. Chapter 3 is dedicated to describing the experimental growth and characterization techniques used: molecular beam epitaxy system for the synthesis of quantum wires, atomic force microscopy for the morphological analysis of the surface of the samples, analysis by photoluminescence, and photoreflectance. Chapter 4 describes the details about the design of the GaAs / AlGaAs heterostructure of wires with the appropriate conditions to carry out eventual experiments, the growth conditions, and also describes the physical interface designed in COMSOL Multiphysics that was used to solve numerically the Schrödinger-Yukawa equation. In chapter 5 the results obtained from both the experimental study and the theoretical study are presented and discussed and, finally, the future work of this thesis is described.

Agradecimientos

Quiero agradecer especialmente al Dr. Esteban Cruz Hernández por su dedicación, confianza, consejos y por su excelente asesoría brindada para el desarrollo de este trabajo.

A mis sinodales: el Dr. Miguel Ángel Vidal Borbolla, el Dr. Hiram Joazet Ojeda Galván, el Dr. Máximo López López y al Dr. José Adrián Martínez González por la revisión de la tesis.

Al Dr. Edgar López Luna y al Dr. Irving Eduardo Cortes Mestizo por su ayuda y por las facilidades otorgadas en el laboratorio de espectroscopia.

A la Dra. Reyna Méndez Camacho por sus consejos en la parte teórica del trabajo.

A CONACyT por la beca otorgada para realizar mis estudios.

Al Departamento de Física del CINVESTAV por la ayuda brindada para el desarrollo de esta tesis.

A mis padres y hermanos que siempre me mostraron su apoyo incondicional.

A mis amigos Carlos, Robert, Sergio, Enrique, Valentina y Perea por los consejos y por la convivencia que volvía más amena la estancia en CIACyT.

Índice

Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Aplicaciones tecnológicas de hilos cuánticos	1
1.2 Fabricación de hilos cuánticos	16
1.3 Compuestos semiconductores III-V	19
1.4 Objetivo del trabajo de tesis	22
Capítulo 2. Fundamentos teóricos	26
2.1. Materiales semiconductores	26
2.2. Crecimiento epitaxial	29
2.3. Auto-organización	33
2.4. Confinamiento cuántico	37
2.5. Cristalización de Wigner	39
2.6. COMSOL Multiphysics (método de elemento finito)	40
2.7. Antecedentes	41
2.7.1 Substrato GaAs (631) – Nanoestructuras 1D	41
2.7.2 Modelo de potencial efectivo de Yukawa	42
Capítulo 3. Técnicas experimentales	49
3.1. Sistema MBE	49
3.2. Microscopía de fuerza atómica	53
3.3. Fotoluminiscencia	56
3.4 Fotorreflectancia	58
Capítulo 4.- Condiciones experimentales y Diseño de la interfaz física	63
4.1. Diseño propuesto de la heteroestructura	63
4.2. Condiciones experimentales	66
4.3. Proceso del crecimiento	66
4.4. Interfaz física Schrödinger-Yukawa	69
Capítulo 5.- Resultados y Discusión	74
5.1. Diagrama de bandas de la heteroestructura delta dopada	75
5.2. Microscopía de fuerza atómica	78
5.2.1. ACF-2D	80

5.3. Fotoluminiscencia	83
5.4. Fotorreflectancia	91
5.5. Aproximación teórica de la interacción electrónica	94
<i>Conclusiones</i>	<i>98</i>
<i>Trabajo Futuro</i>	<i>99</i>
6. ANEXO	104
6.1. Determinación de velocidades de crecimiento	104
6.2. Desorción de óxidos	105

Capítulo 1. Introducción

Desde hace unas décadas, el desarrollo tecnológico se ha acelerado y ha sido clave en la mejora de la calidad de vida del ser humano. El área tecnológica de los materiales, que abarca desde pequeños componentes electrónicos hasta aspas de un aerogenerador, juega un rol muy importante en este acelerado avance, lo que conlleva un dinámico campo de investigación que busca ya sea para modificar propiedades de estos materiales o mejorar alguna cualidad de estos. Algunos ejemplos incluyen continuar con el proceso de miniaturización de circuitos eléctricos, fabricar materiales más resistentes, aumentar la eficiencia de celdas fotovoltaicas, entre otros muchos. Más recientemente, se han investigado y aplicado materiales semiconductores los cuales son de gran importancia en la ciencia y la tecnología por los nuevos fenómenos físicos que presentan y por sus aplicaciones en diferentes tipos de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. En años recientes, la mayoría de los avances científicos relacionados con este tipo de materiales han sido logrados en el área de la nanotecnología.

La nanotecnología es una rama de la ciencia que se encarga del estudio de la materia, pero a una escala nanométrica ya que a esta escala se manifiestan propiedades diferentes a las que se observan a escalas usuales. Una definición común es la siguiente:

La nanotecnología se dedica al estudio, diseño, síntesis, manipulación y aplicación de materiales que tienen al menos una de sus dimensiones dentro del intervalo de 1 a 100 nanómetros (nm). “Nano” es un prefijo griego que significa “enano” y nanómetro es una unidad de longitud equivalente a la millonésima parte de un milímetro (10^{-9} metros), por lo tanto, el anteponer el prefijo nano a varios términos significa que estamos tratando con una escala muy diminuta [1].

Una parte fundamental relacionada con esta rama de la ciencia es la investigación de nanoestructuras semiconductoras que presentan confinamiento cuántico, este confinamiento puede ser en una dimensión (pozo cuántico), en dos dimensiones (hilo cuántico) o en tres dimensiones (punto cuántico). A partir del primer trabajo realizado por L. Esaki y R. Tsu en 1970, en torno al estudio del confinamiento cuántico en materiales semiconductores [2], se generó un incremento en el interés científico por este tipo de nanoestructuras. En el capítulo 2 abordaremos con más detalle estos fundamentos físicos. A continuación, se describen algunos trabajos clave relacionados con la síntesis de hilos cuánticos y de su potencial tecnológico.

1.1 Aplicaciones tecnológicas de hilos cuánticos

Los hilos cuánticos semiconductores han sido objeto de numerosos estudios tanto teóricos como experimentales debido a su potencial aplicación en nuevas tecnologías debido a los efectos cuánticos que presentan. En específico, estas nanoestructuras tienen potenciales aplicaciones en el área de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos [3], por ejemplo, en transistores de

efecto de campo (FET) de alta movilidad [4, 5] (donde el hilo cuántico actúa como el canal de unión entre la fuente y el drenador), láseres semiconductores de bajo umbral [6] y diodos p-n [7]. Otra aplicación de gran interés es la implementación de compuertas lógicas cuánticas para computación cuántica a partir de los cúbits cuya diferencia principal con los bits es que los cúbits pueden tener los dos estados simultáneos 0 y 1 al mismo tiempo, esto debido a la superposición cuántica [8, 9]. También el conmutador electrónico es una potencial aplicación para hilos cuánticos de unión-Y, la fabricación de este conmutador se ha realizado a partir de litografía de haz de electrones sobre heteroestructuras GaAs/AlGaAs [10]. A continuación, se presentan extractos de algunos trabajos representativos relacionados con las aplicaciones tecnológicas de hilos cuánticos [11, 12].

1.1.1. Transistores de efecto de campo reconfigurables

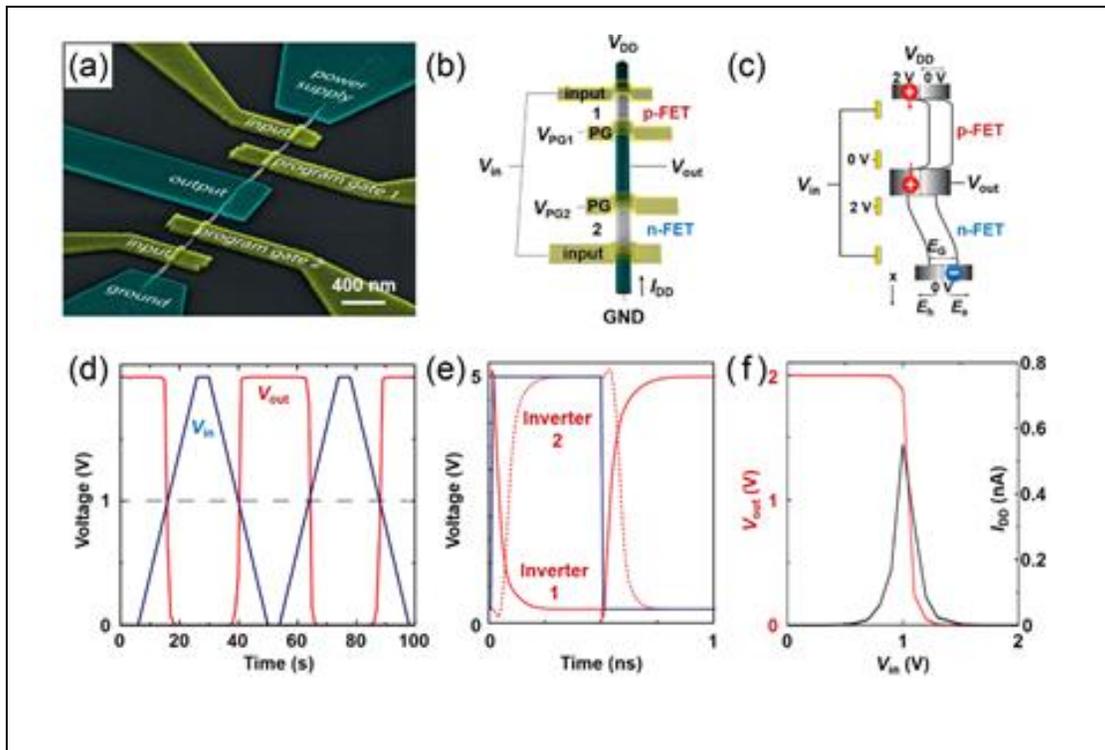


Figura 1.1. FET de nanohilo reconfigurable. (a) Imagen SEM de un inversor integrado con dos FET reconfigurables en un solo nanohilo. (b) Esquema del circuito del inversor complementario. (c) Diagrama de bandas esquemático del inversor complementario. (d) Características de salida dependientes del tiempo del inversor complementario. (e) Respuesta transitoria simulada del inversor. (f) Transferencia característica del inversor [11].

1.1.2. Fotodetectores

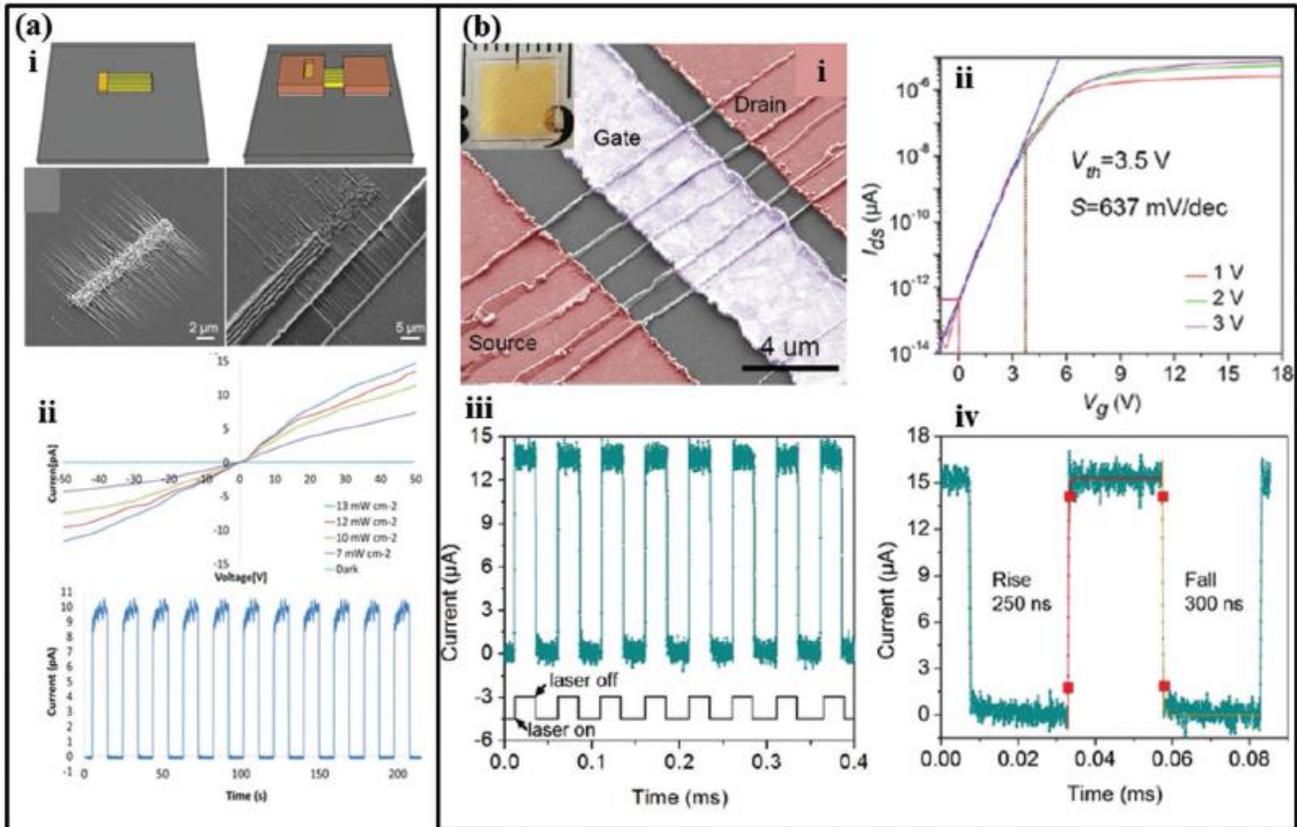
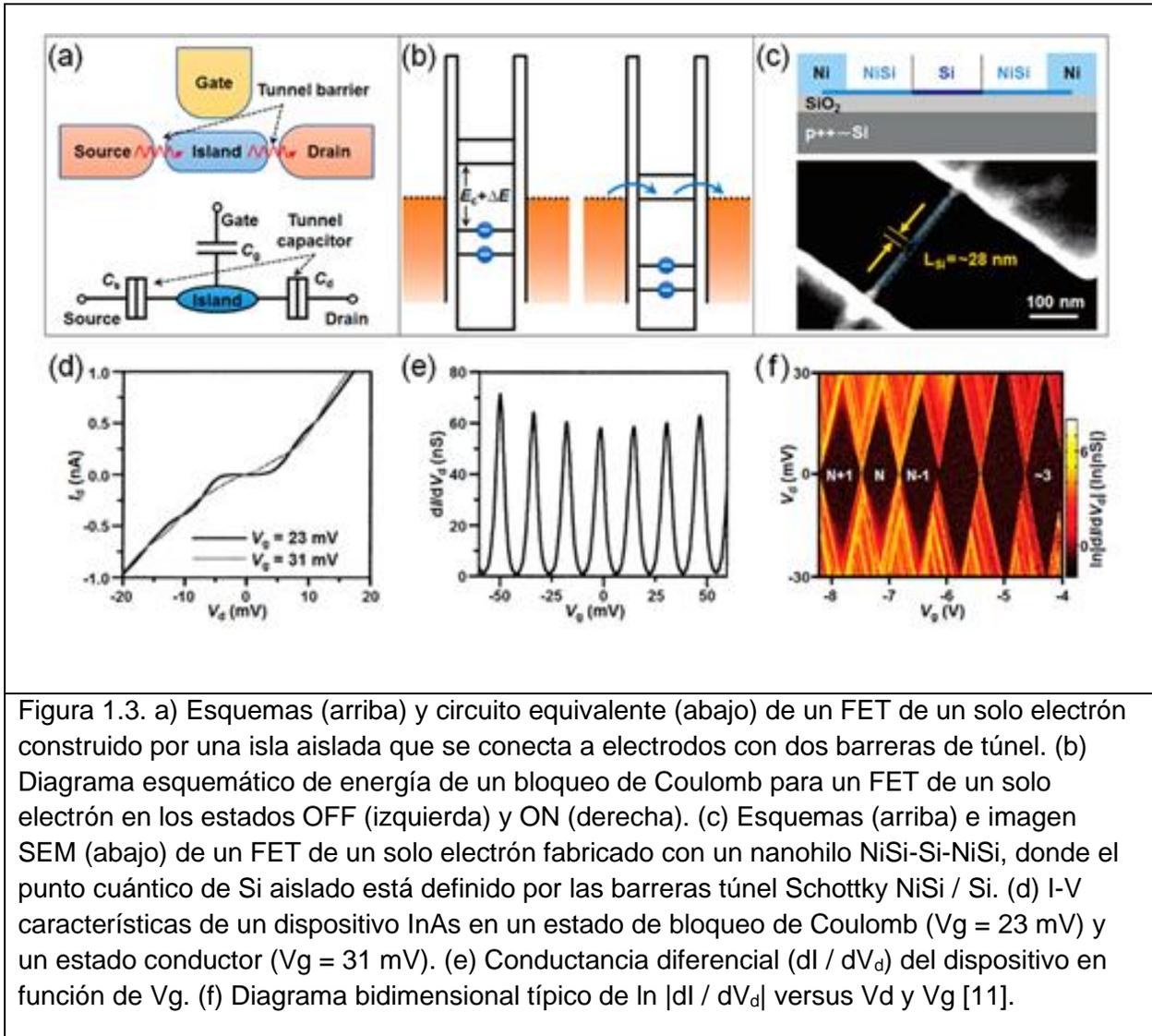


Figura 1.2. Fotodetectores contruidos sobre NWs horizontales autoalineados de ZnSe y CdS. a) Una ilustración esquemática del crecimiento epitaxial en el plano de NWs de ZnSe en sustrato de zafiro, así como la configuración del dispositivo fotodetector. Las características I-V medidas bajo diferentes intensidades de iluminación de 405 nm y condiciones de oscuridad se muestran a continuación, junto con el comportamiento de respuesta dinámica bajo iluminación modulada. b) SEM del dispositivo tri-gate FET fabricado sobre nanoparedes o NWs de CdS, así como la propiedad de transferencia y la respuesta de fotocorriente bajo una iluminación láser modulada de 405 nm [12].

1.1.3. FET de nanohilo de un solo electrón



1.1.4. Diodos de nanohilos cruzados

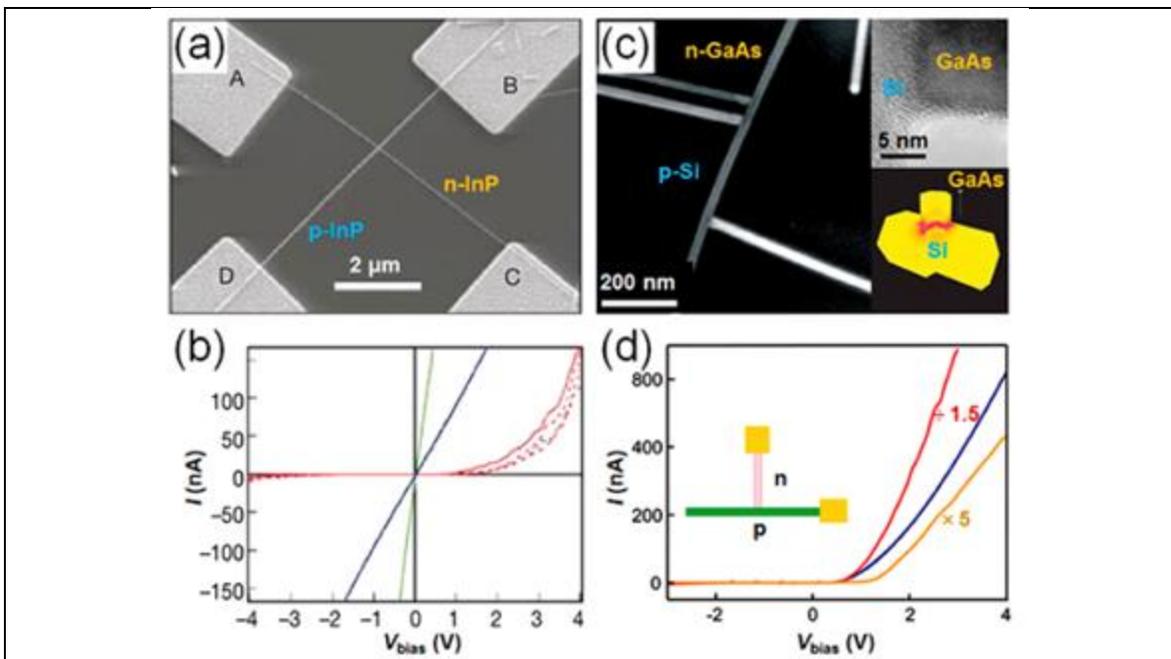


Figura 1.4. Diodos de nanohilos p-n cruzados. (a) Imagen SEM de una unión típica de nanohilos cruzados de p-InP y n-InP. (b) I-V características de la unión p-n correspondiente, donde las curvas azul, verde y roja corresponden al comportamiento de un nanohilo tipo p individual, un nanohilo tipo n individual y una unión p-n, respectivamente. (c) SEM, HRTEM e imágenes simuladas de la unión ramificada Si / GaAs. (d) Comportamientos I-V de uniones p-n con uniones ramificadas p-Si / n-GaAs (rojo), p-Si / n-Ge (azul) y p-Si / n-CdSe (naranja) [11].

1.1.5. i. FET de nanohilos cruzados

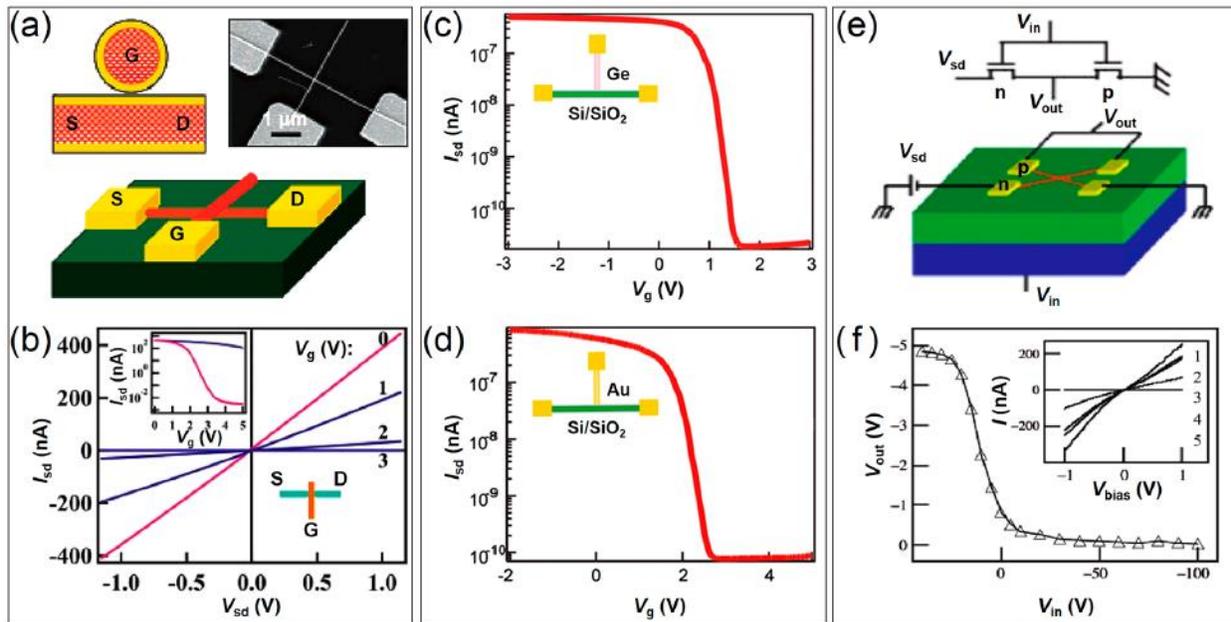
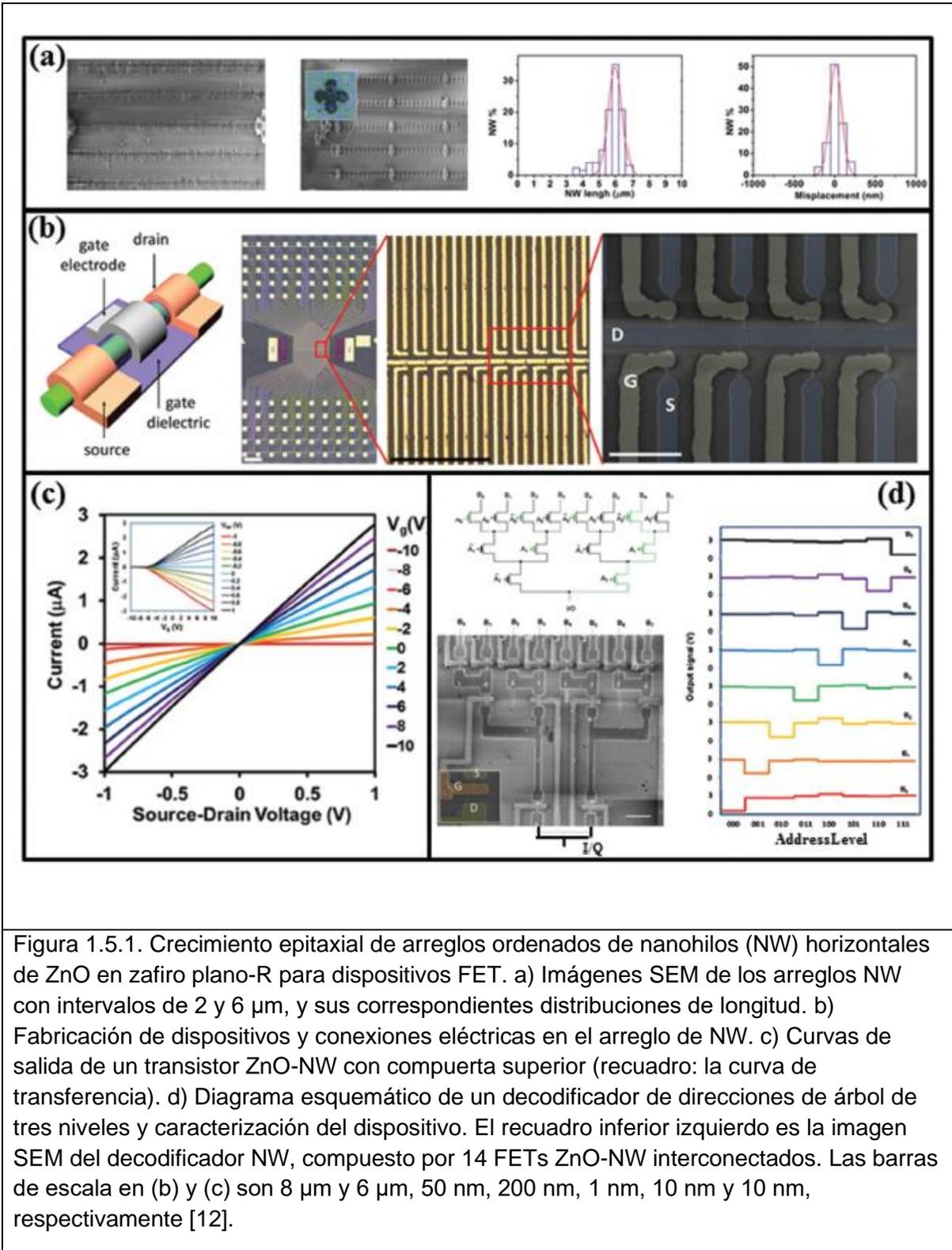
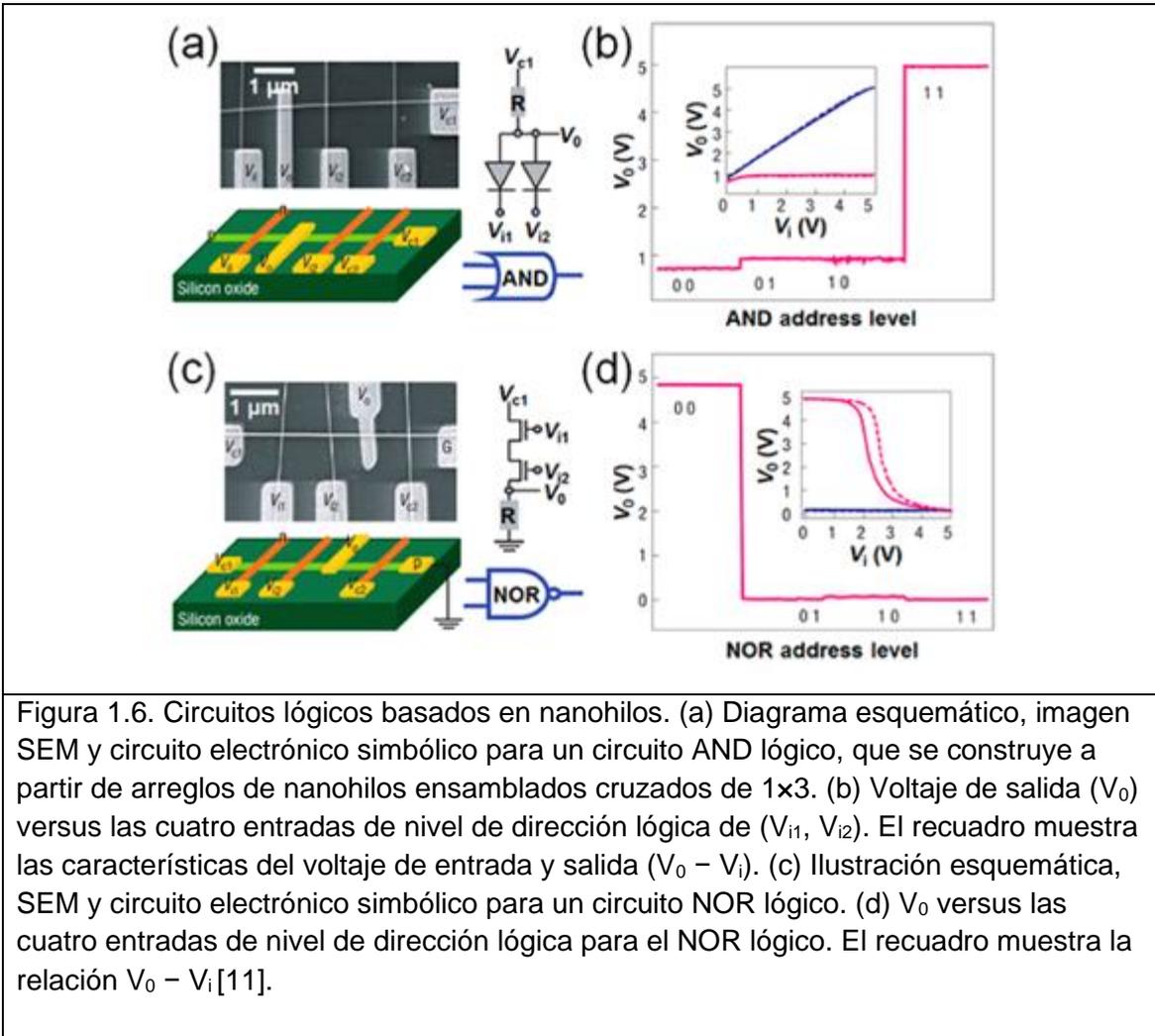


Figura 1.5. FET de nanohilos cruzados. (a) Ilustración esquemática e imágenes SEM de un FET de nanohilos cruzado, con una capa de óxido alrededor de los nanohilos. (b) Comportamientos I-V dependientes de la compuerta del FET de nanohilos cruzado. (c,d) Propiedades (I- V_g) de transferencia dependientes de la compuerta y las imágenes HRTEM correspondientes de FET a nanoescala codificadas con uniones ramificadas (c) p-Si/SiO₂/Ge y (d) p-Si/SiO₂/Au. (e) Representación estándar e ilustración esquemática de un inversor complementario formado a partir de FET de nanohilos cruzados de tipo n y tipo p. (f) Curva V_{out} vs V_{in} para el inversor complementario. El recuadro son las curvas I-V dependientes de la compuerta del FET tipo p en el inversor [11].

ii. FET de nanohilos autoalineados de ZnO



1.1.6. Circuitos lógicos basados en nanohilos



1.1.7. Interruptores de memoria de barra transversal de nanohilos

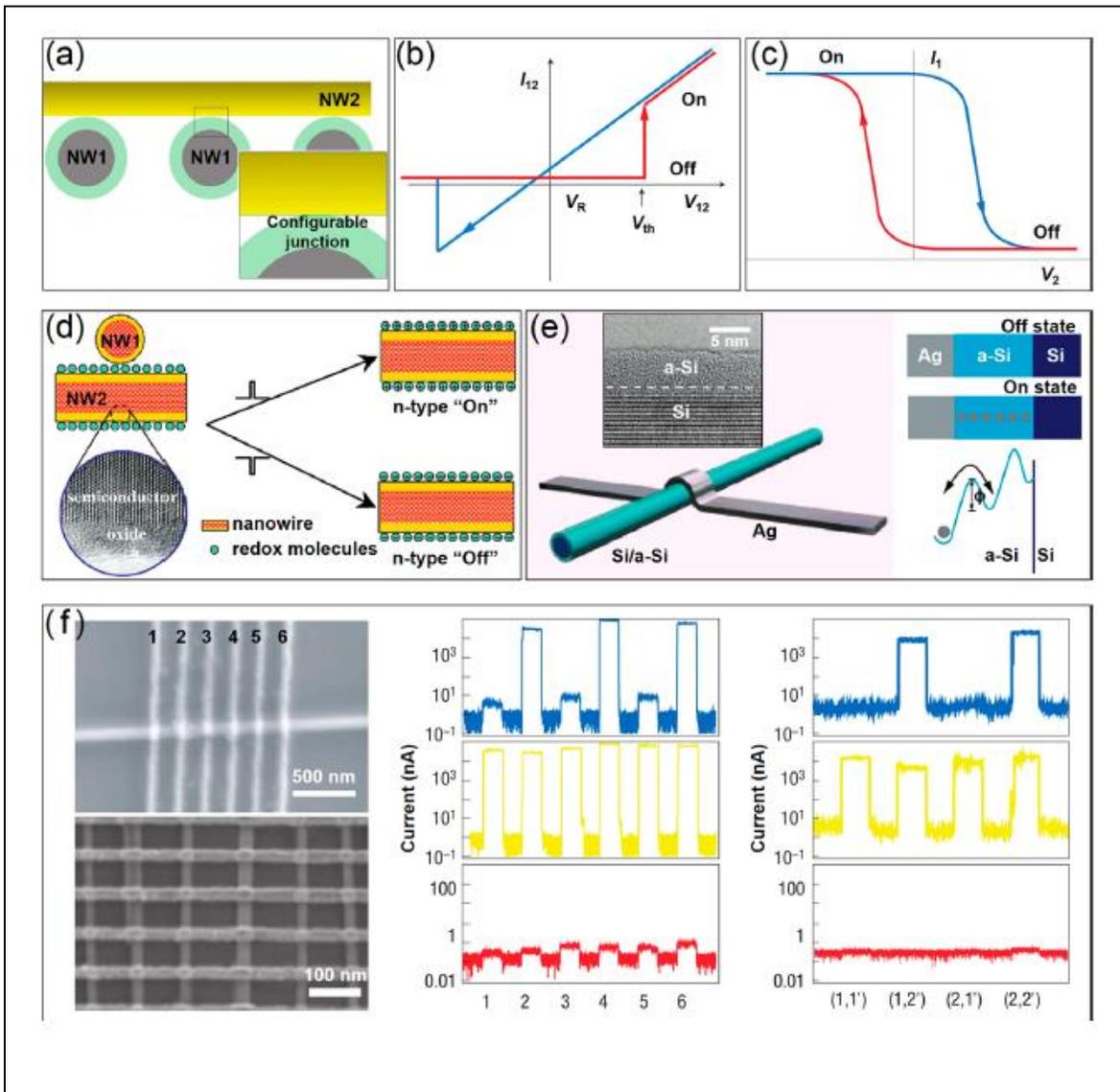


Figura 1.7. (a) Ilustración esquemática de la memoria de barra transversal de nanohilos, donde el bit de memoria proviene de una unión biestable configurable entre dos nanohilos cruzados. (b) Curva $I - V$ esquemática de una unión configurable, que puede simularse como una resistencia histerética de dos terminales. (c) Histéresis esquemática de la corriente FET dependiente de la compuerta (I_1) en una barra transversal basada en FET, donde el nanohilo de control aplica el voltaje de puerta cambiado (V_2). (d) Ilustración esquemática del dispositivo no volátil de barra transversal activada por moléculas, donde la unión biestable configurable está formada por moléculas activas redox en la superficie de óxido de los nanohilos. (e) Ilustración esquemática de un interruptor de memoria formado en el punto de cruce de un nanohilo de metal-Ag y un nanohilo de núcleo/capa de silicio/silicio amorfo (Si/a-Si), donde las islas de Ag en la capa a-Si forman el filamento conductor para el estado "encendido". (f) Paneles izquierdos: imágenes SEM de memoria de barra transversal de 1×6 y

memoria de barra transversal de alta densidad, que se fabrican con nanocables cruzados de Ag y Si / a-Si. Paneles derechos: estados de memoria de puntos cruzados que se pueden escribir y leer de forma controlable desde un arreglo representativo de 1 x 6 y un arreglo de 2 x 2 [11].

1.1.8. i. Nanoprocesador basado en nanohilos

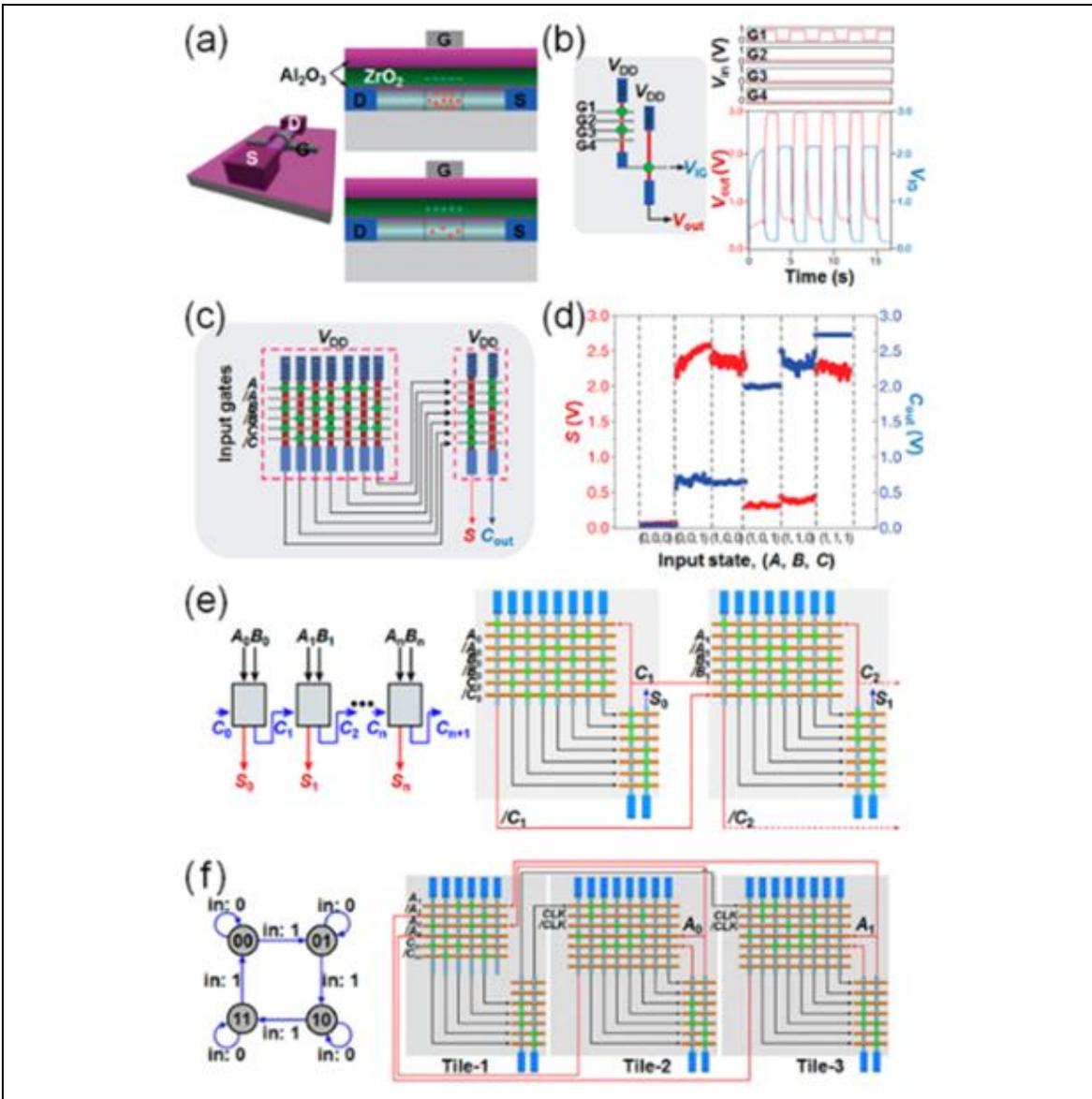


Figura 1.8. (a) Ilustración esquemática del transistor de nanohilos programable no volátil, donde la concentración de carga en el transistor de nanohilos puede controlarse mediante los estados de captura de carga en la capa de ZrO₂. (b) Caracterización de un dispositivo multigate con transistores acoplados de nanohilos - nanohilos. (c) Diseño de circuito de un sumador completo de un bit con PNNTA (por sus siglas en inglés; arreglos de transistores de nanohilos programables y no volátiles). (d) Niveles de voltaje

de salida (S , C_{out}) del sumador completo con seis estados de entrada típicos. (e) Panel izquierdo: esquema de un sumador completo de n bits construido a partir de sumadores completos en serie de 1 bit. Panel derecho: diseño de circuito específico para un sumador completo de 2 bits con dos placas. (f) Panel izquierdo: diagrama lógico de la máquina de estados finitos (FSM). Panel derecho: ilustración esquemática del circuito de tres placas del nanoFSM [11].

ii. Nanoprocador de nanohilos Si/Ge

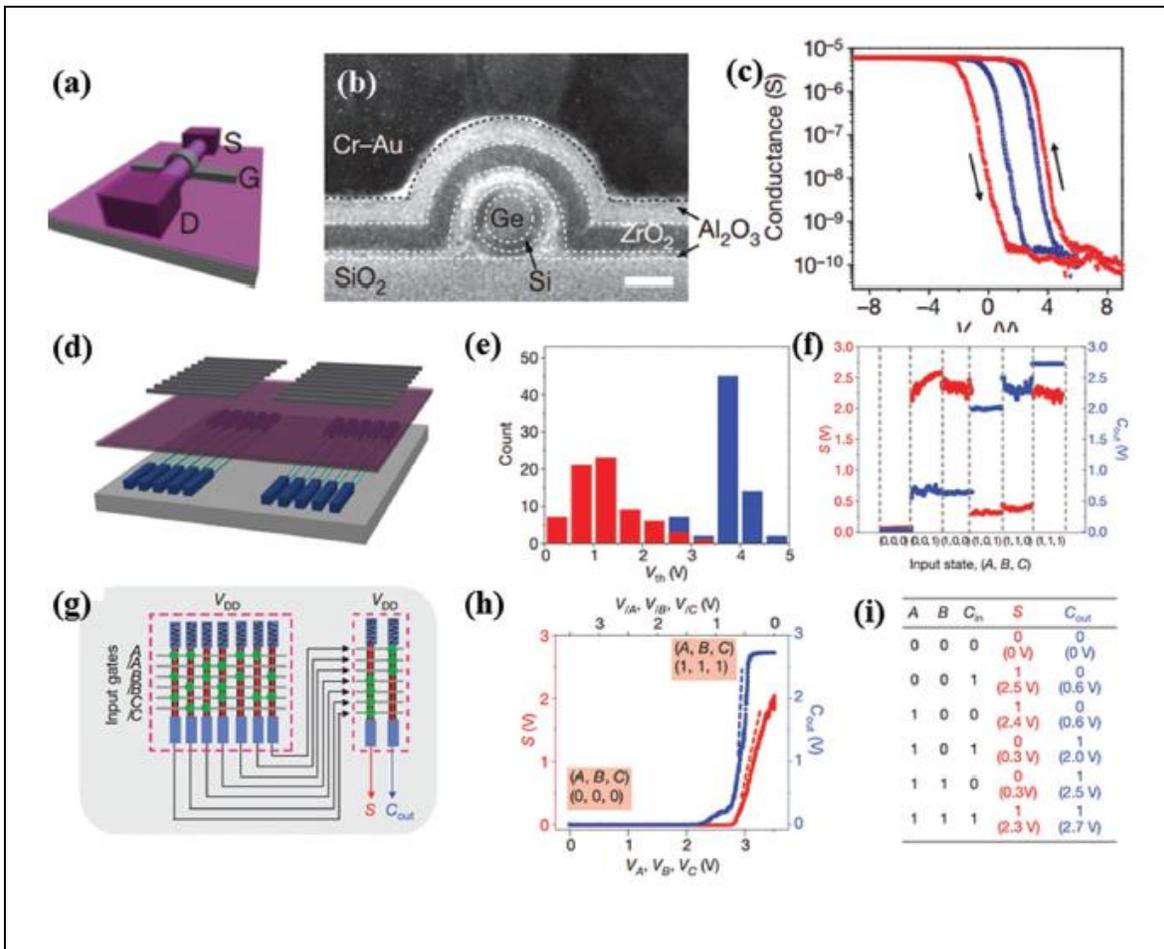


Figura 1.8.1. Nanoprocadores construidos sobre los nanohilos (NW) núcleo-capa de Si/Ge en el plano. a) Esquemáticamente la configuración del dispositivo NW FET, b) con una imagen TEM de sección transversal. c) Propiedades de transferencia y memoria del dispositivo FET bajo diferentes condiciones de programación. d) La disposición de placas de dos bloques de los arreglos NW, donde las líneas cian representan los NW Ge/Si con electrodos azules, violeta para capas dieléctricas y gris para las compuertas metálicas. e) La distribución de la V_{th} de 70 NW FET nodos en el bloque 1 en la primera placa. f) Niveles de voltaje de salida para seis estados de entrada típicos. g) Diseño de circuito para implementar un sumador completo de un bit.

h) Función de transferencia de voltaje para S (rojo) y C out (azul) para estados de entrada de (0, 0, 0) a (1, 1, 1). i) Tabla de verdad de sumador lógico para los seis estados de entrada [12].

1.1.9. Transistores híbridos de alta frecuencia 1D/2D

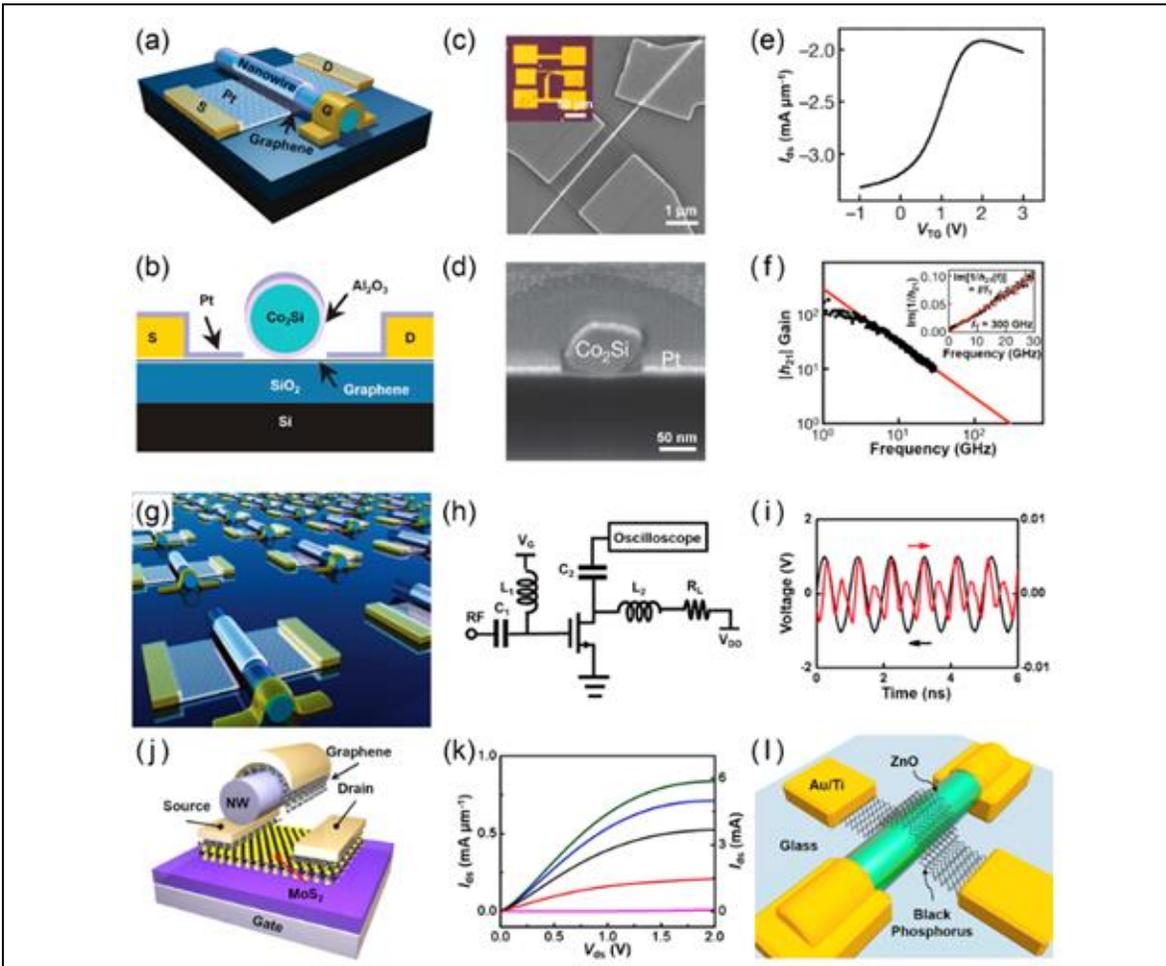


Figura 1.9. Transistores híbridos 1D / 2D de alto rendimiento. (a, b) Ilustración esquemática de un transistor de grafeno con una compuerta de nanohilos autoalineados. (c) Imagen SEM de un transistor de grafeno de alta velocidad con compuerta de nanohilo. El recuadro muestra una fotografía de microscopio óptico de todo el diseño del dispositivo. (d) Imagen SEM de sección transversal de un transistor típico con compuerta de nanohilo. (e) Características de transferencia del transistor con compuerta de nanohilo en $V_{ds} = -1$ V. (f) Ganancia de corriente de pequeña señal $|h_{21}|$ frente a la frecuencia de un transistor de grafeno con compuerta de nanohilo con una frecuencia de corte intrínseca de 300 GHz. El recuadro muestra la extracción de f_T mediante el método de Gummel. (g) Ilustración esquemática de un arreglo de transistores de grafeno con compuerta de nanohilo. (h) Diagrama de circuito de un duplicador de radiofrecuencia basado en transistor de grafeno. (i) Señales

experimentales de entrada (negro) y salida (rojo) del duplicador, que muestran la frecuencia de entrada de 1.05 GHz y la frecuencia de salida de 2.10 GHz. (j) Ilustración esquemática del transistor MoS_2 de canal ultracorto, donde el canal se forma al despegar el nanohilo. (k) Características de salida para un transistor MoS_2 de 80 nm a varios voltajes de compuerta a temperatura ambiente. (l) Ilustración esquemática del dispositivo de heterounión de fósforo negro-ZnO sobre sustrato de vidrio [11].

1.1.10. Circuitos de sensores de imagen integrados

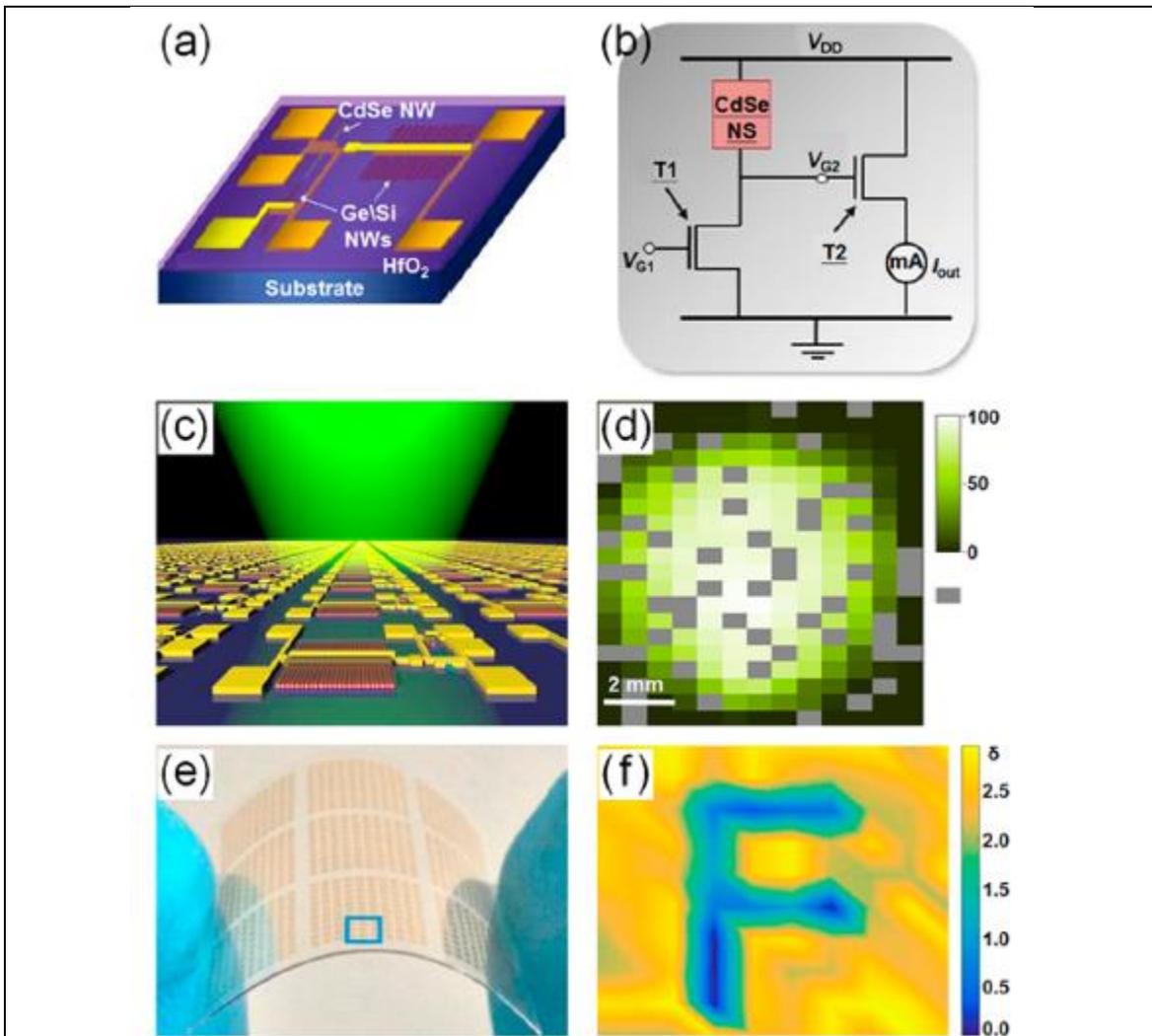


Figura 1.10. Circuitos integrados de sensores de imagen. (a) Ilustración esquemática de circuito del sensor óptico ordenado basado en arreglos de nanohilos de Ge/Si y CdSe. (b) Diagrama de circuito del fotosensor. (c) Imagen en perspectiva del conjunto de circuitos con la función de formación de imágenes. (d) Respuesta de salida del conjunto de circuitos a un punto de luz. (e) Imagen óptica de arreglos de fotosensores flexibles

fabricadas sobre un sustrato de plástico. (f) Imágenes de salida de los arreglos de fotosensores flexibles para detectar la letra "F" [11].

1.1.11. Piel artificial basada en nanohilos

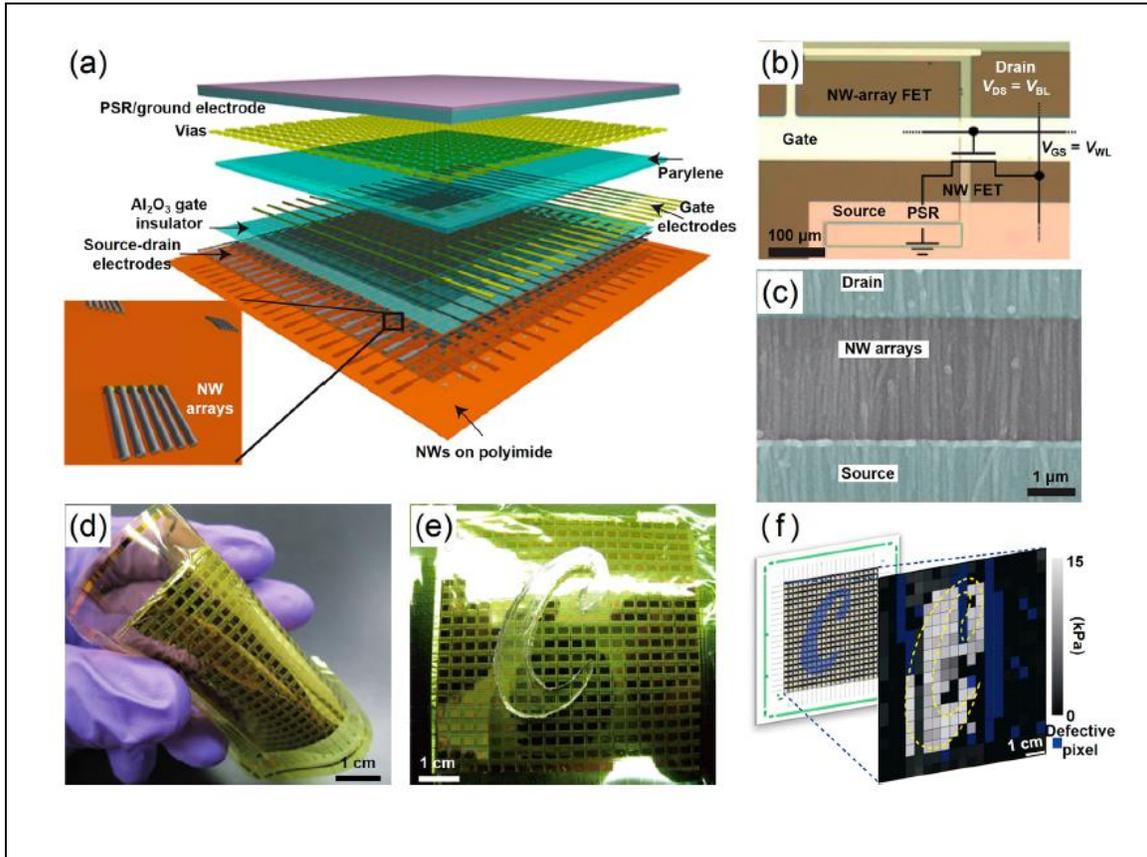


Figura 1.11. Dispositivos de macroescala basados en nanohilos para piel artificial. (a) Ilustración esquemática de la piel artificial a base de nanohilos con capas pasivas y activas. (b) Imagen de microscopio óptico y estructura de circuito de un píxel sensor en el arreglo. (c) Imagen SEM de un FET basado en un arreglo de nanohilos. (d) Fotografía de una piel artificial fabricada bajo flexión. (e) Fotografía de una piel artificial fabricada para detectar la presión, con un molde PDMS en forma de "C" aplicado en la parte superior. (f) Perfil de intensidad bidimensional correspondiente de la presión conformada, que se obtiene del mapeo experimental de las señales de píxeles [11].

Además, para estos tipos de sistemas 1D se presentan efectos únicos, interesantes para el ámbito científico, tales como la fuerte correlación de Coulomb [13], la supresión de la dispersión de electrones [4, 14], cristalización Wigner de electrones [15] y comportamiento líquido de Tomonaga-Luttinger. Este último es un modelo teórico que emerge como la descripción adecuada del sistema en el que en lugar de cuasipartículas fermiónicas, las excitaciones elementales son bosones. Esto es, a diferencia de los sistemas de dimensiones superiores, en una dimensión las propiedades de baja energía de los sistemas de electrones en interacción no están descritas por la teoría de líquidos de Fermi [3], es decir, el modelo Tomonaga-Luttinger trata las interacciones entre electrones de tal manera que puedan modelarse como una interacción bosónica.

En este trabajo estaremos particularmente interesados en la cristalización de Wigner, la cual recientemente ha sido observada utilizando la configuración mostrada en la figura 1.12 [16].

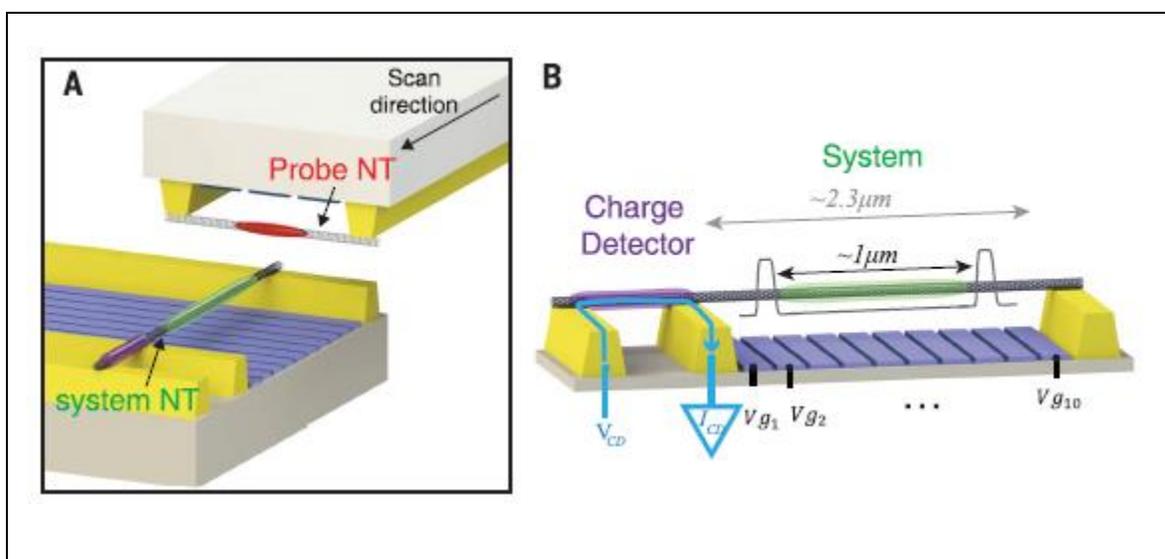
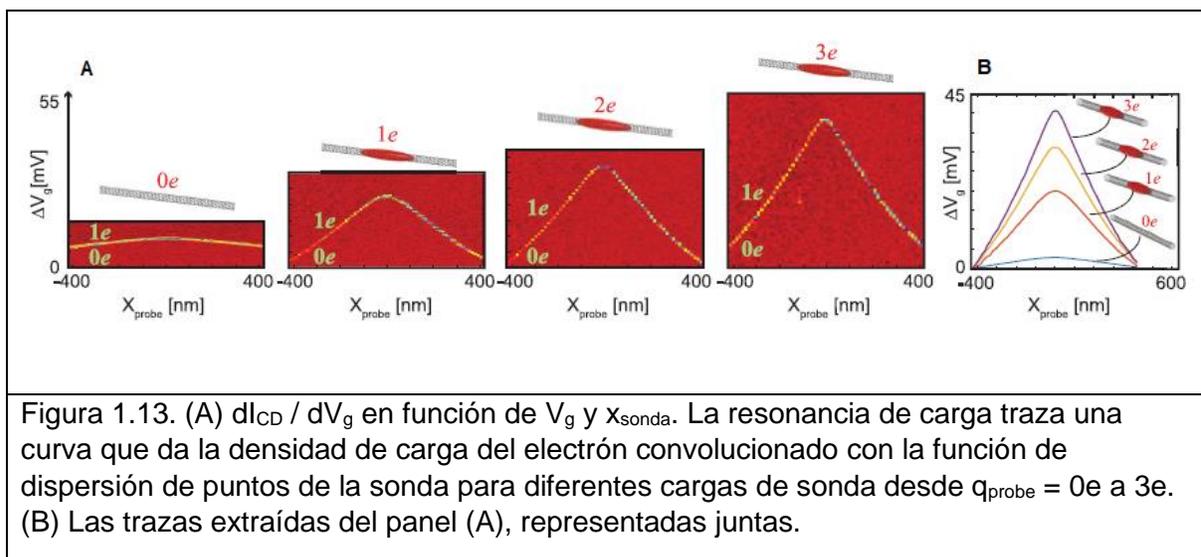


Figura 1.12. Plataforma experimental para obtener imágenes de electrones que interactúan fuertemente. (A) Configuración de la sonda de escaneo que consta de dos dispositivos de nanotubos de carbono (NT): un dispositivo -sistema NT- (parte inferior) que aloja los electrones que se van a fotografiar (elipse verde) y un dispositivo de sonda-NT (superior) que contiene los electrones de sondeo (rojo). En el experimento, la sonda NT se escanea a lo largo del sistema NT (flecha negra). (B) El sistema NT está conectado a contactos (amarillo) y está suspendido por encima de 10 compuertas (azul) que se utilizan para crear un pozo de potencial (mostrado esquemáticamente en gris) que confina unos pocos electrones a la parte media del NT suspendido (verde), lejos de los contactos. La adición de estos electrones se detecta usando un detector de carga, un punto cuántico separado formado en un segmento lateral del mismo NT (violeta). El detector está polarizado por un voltaje, V_{CD} , aplicado a un contacto externo, lo que lleva a una corriente, I_{CD} , que fluye solo entre los contactos del detector de carga (flecha azul), de manera que no pasa corriente a través de la parte principal del sistema NT.

en donde se pudo observar la distribución electrónica presentada en la figura 1.13 [16].



Que, como se explicará más adelante, concuerda bien con los resultados obtenidos por nuestro modelo

1.2 Fabricación de hilos cuánticos

En cuanto al tema sobre la síntesis de los hilos cuánticos semiconductores (QWRs), siempre se busca tener una calidad estructural lo suficientemente alta como para permitir la investigación de sus propiedades; lo cual a veces se torna una tarea complicada, por consiguiente, esto ha provocado que a lo largo de los años se hayan desarrollado varias técnicas para su fabricación. Estas técnicas pueden ser de arriba hacia abajo (*Top-down*) o de abajo hacia arriba (*Bottom-up*). Primero, el enfoque de arriba hacia abajo, que se basa en tener un material de partida en bulto de alta calidad, desde donde es posible grabar selectivamente el material y dar forma a la estructura. Uno de los primeros estudios experimentales utilizando este enfoque para la fabricación de QWR fue mediante litografía, grabado químico y finalmente un proceso de regeneración o post-crecimiento [17]. Sin embargo, esta técnica tiene sus desventajas tales como daños en las superficies inducidos por el grabado químico y por la técnica de litografía, que involucra irradiación de haz de iones altamente energéticos, además de dimensiones de QWRs limitadas por la longitud de onda utilizada en la litografía.

Por otro lado, el enfoque de abajo hacia arriba, que se basa en un material de partida que se autoensambla al proporcionarle las condiciones adecuadas tales como, temperatura, velocidad de crecimiento y orientación cristalográfica del sustrato. Mediante esta técnica, es posible crecer y combinar materiales que son difíciles o imposibles de formar cuando se inicia en bulto. Sin embargo, un desafío clave es ensamblar las nanoestructuras con el tamaño, la forma y la calidad cristalina necesarios para la aplicación prevista.

Algunas de las técnicas epitaxiales utilizadas en el tipo de síntesis *Bottom-up* son:

- Síntesis por solución-liquido-sólido (SLS) [18]
- Síntesis por vapor-liquido-sólido (VLS) [19]
- Epitaxia en fase de vapor organometálico (MOVPE, por sus siglas en inglés) [20]
- Deposición de vapor químico (CVD, por sus siglas en inglés) [21]
- Epitaxia de haces moleculares (MBE) [22]

La siguiente figura 1.14 muestra el amplio panorama de técnicas que existen para la síntesis de hilos cuánticos, para más información puede consultar la referencia [11].

	material	synthetic methods
group IV	Si	chemical vapor deposition (CVD), ¹⁵⁴⁻¹⁵⁸ plasma-enhanced CVD, ¹⁵⁹⁻¹⁶³ molecular beam epitaxy (MBE), ¹⁶⁴⁻¹⁶⁶ laser ablation, ¹⁶⁷⁻¹⁶⁹ supercritical fluid, ^{170,171} electrodeposition, ¹⁷² and wet chemical etching. ¹⁷³⁻¹⁷⁸
	Ge	CVD, ^{185,179-185} MBE, ^{186,187} solution synthesis with SLS, ¹⁸⁸⁻¹⁹¹ supercritical fluid, ¹⁹²⁻¹⁹⁶ and electrodeposition. ^{197,198}
	Si _x Ge _{1-x}	CVD ¹⁹⁹⁻²⁰³ and laser ablation. ²⁰⁴
	SiC	CVD, ²⁰⁵⁻²¹⁰ vapor-solid reaction, ²¹¹⁻²¹⁵ and intermediate-template growth. ²¹⁶⁻²¹⁹
group III-V binary	GaN	CVD, ²²⁰⁻²²⁵ metal-organic chemical vapor deposition (MOCVD), ²²⁶⁻²²⁸ plasma-assisted MBE, ²²⁹⁻²³³ laser ablation, ²³⁴⁻²³⁶ carbon nanotube confined reaction, ^{237,238} and wet chemical etching. ^{239,240}
	GaP	MOCVD, ²⁴¹⁻²⁴⁴ MBE, ^{245,246} chemical beam epitaxy, ²⁴⁷ laser ablation, ²⁰⁴ and solution synthesis with SLS. ^{248,249}
	GaAs	CVD, ^{250,251} MOCVD, ^{244,252-254} MBE, ^{129,255-257} laser ablation, ^{204,258} and solution synthesis with SLS. ²⁴⁸
	GaSb	CVD ²⁵¹ and MOCVD ^{244,259}
	InN	CVD, ²⁶⁰⁻²⁶² plasma-assisted MBE, ²⁶³⁻²⁶⁵ and intermediate-template growth. ²⁶⁶
	InP	MOCVD, ^{244,267-269} MBE, ²⁷⁰ laser ablation, ²⁰⁴ chemical vapor transport, ^{271,272} and solution synthesis with SLS. ^{143,248}
group III-V ternary	InAs	MOCVD, ^{244,273-275} MBE, ²⁷⁶⁻²⁷⁹ chemical beam epitaxy, ^{280,281} laser ablation, ²⁰⁴ and solution synthesis with SLS. ²⁴⁸
	InSb	CVD, ²⁸²⁻²⁸⁴ MOCVD, ²⁸⁴ MBE, ^{285,286} chemical beam epitaxy, ²⁸⁷⁻²⁸⁹ and electrodeposition. ²⁹⁰⁻²⁹²
	Al _x Ga _{1-x} N	CVD, ^{293,294} and plasma-assisted MBE. ²⁹⁵⁻²⁹⁹
	Al _x Ga _{1-x} P	MOCVD. ³⁰⁰
	Al _x Ga _{1-x} As	MBE. ^{301,302} and MOCVD. ^{303,304}
	Ga _x In _{1-x} N	plasma-assisted MBE. ^{265,305-307}
	Ga _x In _{1-x} P	MOCVD. ^{308,309} and MBE. ³¹⁰
	Ga _x In _{1-x} As	CVD, ²⁵¹ MOCVD, ³¹¹⁻³¹³ and MBE. ^{314,315}
	GaAs _{1-x} P _x	MBE. ³¹⁶⁻³¹⁸ and laser ablation. ²⁰⁴
	GaAs _{1-x} Sb _x	MBE. ³¹⁹⁻³²²
group II-VI binary	InAs _{1-x} P _x	laser ablation. ²⁰⁴
	InAs _{1-x} Sb _x	MOCVD. ³²³⁻³²⁵ and MBE. ^{326,327}
	ZnS	CVD, ^{328,329} MOCVD, ^{330,331} laser ablation, ^{204,332} hydrothermal, ^{333,334} solvothermal, ^{150,335,336} and electrodeposition. ³³⁷
	ZnSe	MOCVD, ^{338,339} MBE, ^{340,341} and laser ablation. ²⁰⁴
	ZnTe	MOCVD, ³⁴² MBE, ³⁴³ and electrodeposition. ^{344,345}
	CdS	CVD, ³⁴⁶⁻³⁴⁸ MOCVD, ^{349,350} laser ablation, ²⁰⁴ thermal evaporation, ³⁵¹ hydrothermal, ^{352,353} solvothermal, ³⁵⁴⁻³⁵⁶ and electrodeposition. ³⁵⁷⁻³⁶⁰
	CdSe	CVD, ³⁶¹⁻³⁶³ MOCVD, ^{364,365} laser ablation, ²⁰⁴ solvothermal, ^{366,367} and electrodeposition. ³⁶⁸⁻³⁷⁰
	CdTe	CVD, ^{361,371,372} MOCVD, ³⁷³ MBE, ³⁴³ intermediate-template growth, ³⁷⁴ hydrothermal, ^{375,376} solvothermal, ^{366,377} and electrodeposition. ³⁷⁸⁻³⁸⁰
group II-VI ternary	Zn _x Cd _{1-x} S	MOCVD. ³⁸¹
	Zn _x Cd _{1-x} Se	MOCVD. ³⁸² and MBE. ³⁸³
	Cd _x Hg _{1-x} Se	MBE. ³⁸⁴
	Cd _x Hg _{1-x} Te	MBE. ³⁸⁵
	ZnS _{1-x} Se _x	CVD. ³⁸⁶
metal oxide	CdS _{1-x} Se _x	CVD. ³⁸⁷ and laser ablation. ^{204,388}
	ZnO	CVD, ³⁸⁹⁻³⁹² MOCVD, ³⁹³⁻³⁹⁵ MBE, ^{396,397} thermal evaporation, ³⁹⁸⁻⁴⁰⁰ hydrothermal, ⁴⁰¹⁻⁴⁰⁴ solvothermal, ^{405,406} and electrodeposition. ⁴⁰⁷⁻⁴¹⁰
	SnO ₂	CVD, ⁴¹¹⁻⁴¹³ thermal evaporation, ⁴¹⁴ vapor transport, ⁴¹⁵ hydrothermal, ^{416,417} and solvothermal. ^{418,419}
	In ₂ O ₃	CVD, ^{420,421} laser ablation, ^{422,423} thermal evaporation, ^{424,425} carbothermal reduction, ^{426,427} and hydrothermal. ^{428,429}
	Zn ₂ SnO ₄	CVD, ^{430,431} thermal evaporation, ⁴³²⁻⁴³⁴ vapor transport, ^{435,436} hydrothermal, ⁴³⁷ and solvothermal. ⁴³⁸

Figura 1.14. Métodos explorados en la síntesis de NWR semiconductores

Es importante mencionar que, aún cuando muchos de los métodos de fabricación de NWRs está enfocado en hilos perpendiculares a la superficie, en las aplicaciones estos hilos deben ser transferidos a una geometría paralela al substrato o superficie de dispositivo [12]. En la Figura 1.15 se muestra cómo es que las aplicaciones e investigaciones de NWRs paralelos a la superficie (línea amarilla) representan alrededor del 58% del total de publicaciones recientes.

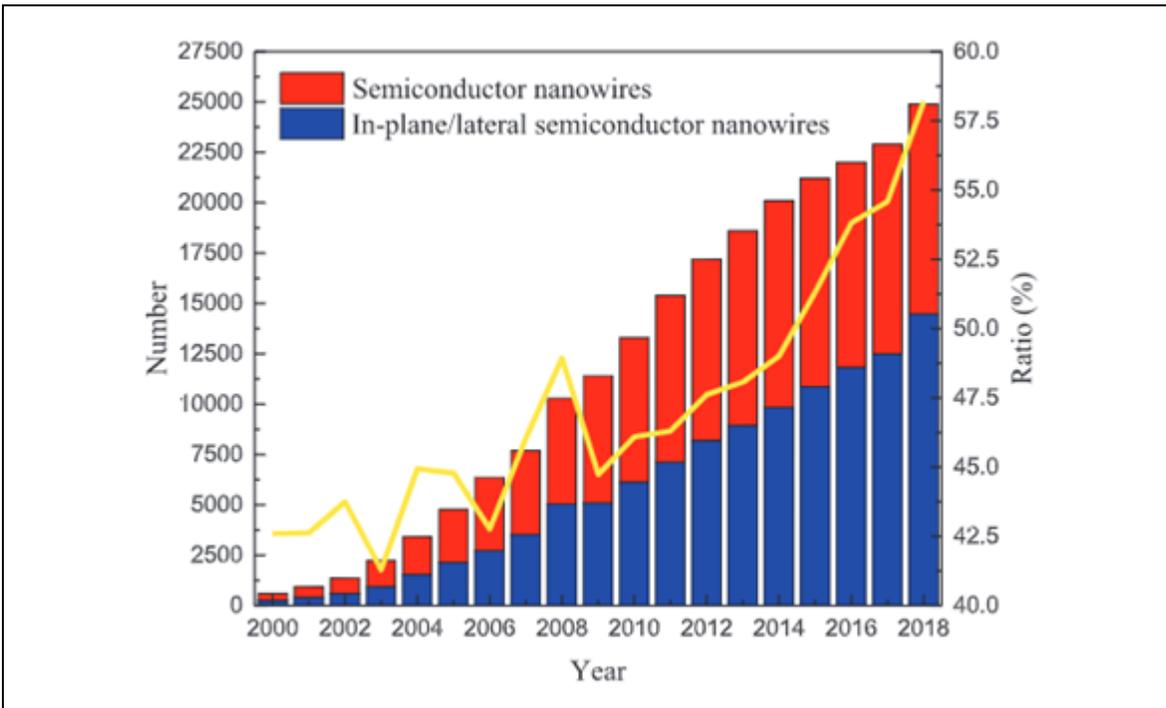


Figura 1.15. Evolución de los trabajos de investigación publicados que se buscaron con las palabras clave de "semiconductores o nanohilos semiconductores" con (azul) o sin (rojo) las restricciones adjetivas de "en plano o plano u horizontal" en Google Scholar, mientras que la parte de los artículos, el crecimiento o la integración de nanohilos semiconductores dedicada a la disposición plana, se visualiza como la línea amarilla.

Partiendo de una disposición perpendicular, existen varias estrategias para transferirlos a su geometría plana, tal como se muestra en la figura 1.16 [12].

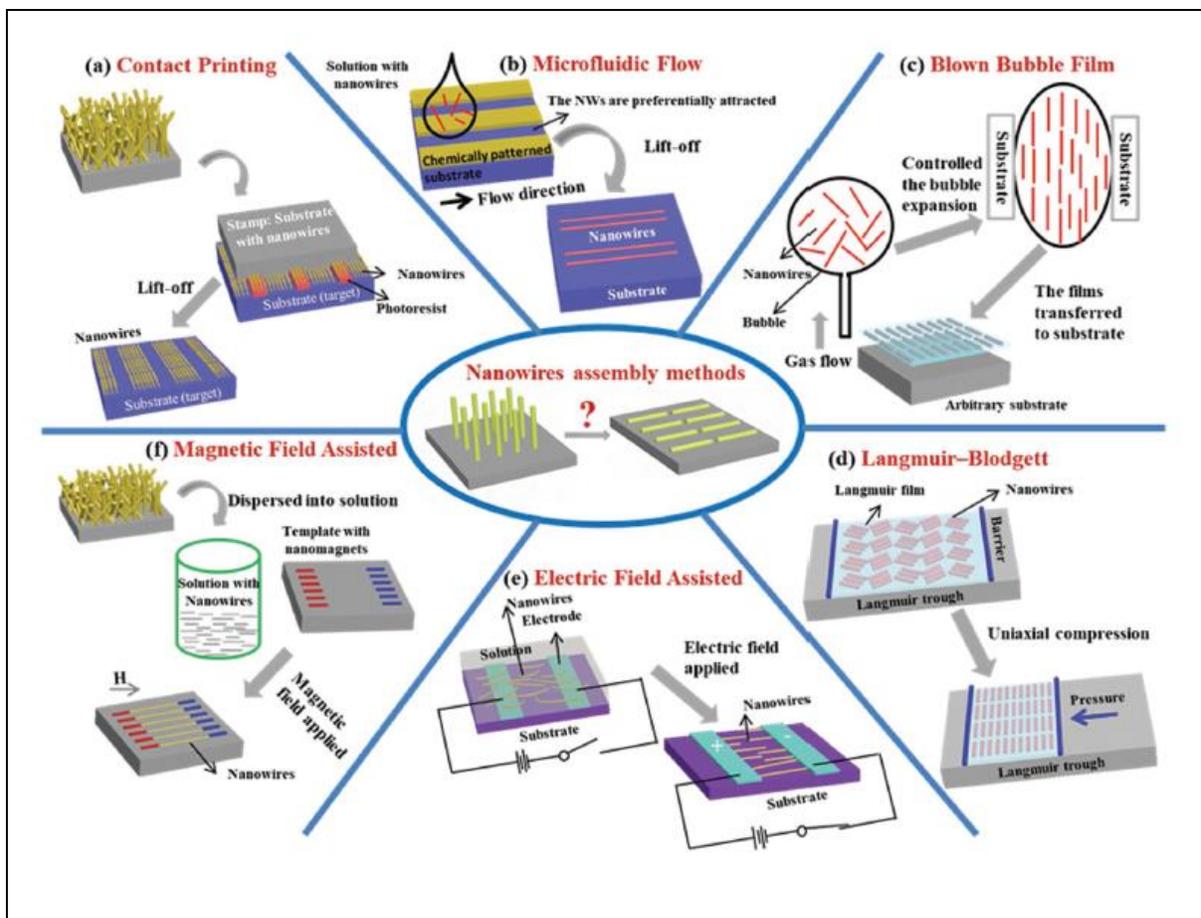


Figura 1.16. Varios enfoques de síntesis y luego ensamblaje para transferir NW en superficies planas de sustrato. a) NW alineados por impresión de contacto. b) NWs paralelos posicionados por flujo de microfluidos con la ayuda de microcanales prediseñados. c) Transferencia de NW paralelos desde la superficie de la burbuja inyectada al sustrato objetivo. d) Montaje Langmuir-Blodgett de NW. e, f) Disposición de NW polarizados utilizando una guía de campo eléctrico (e) o campo magnético (f).

Sin embargo, como los hilos crecidos mediante la técnica que manejamos es de origen paralela a la superficie, tiene entonces la ventaja inicial de no requerir procesamientos extra para su potencial aplicación.

1.3 Compuestos semiconductores III-V

En esta tesis se presenta un estudio del diseño y crecimiento de hilos cuánticos autoensamblados de compuestos semiconductores III-V, los cuales tienen propiedades muy útiles en la fabricación de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos (véase las figuras 1.17, 1.18 y 1.19) [23].

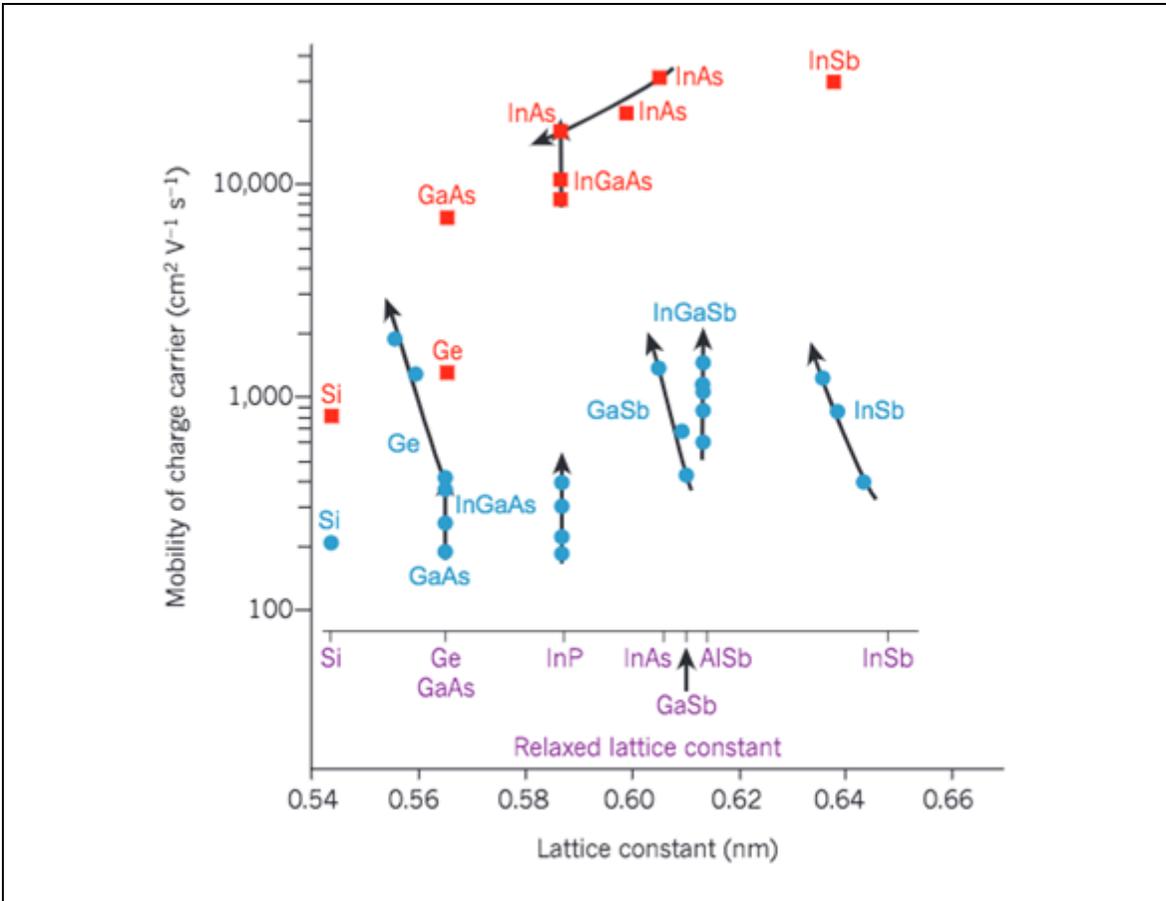


Figura 1.17. Movilidad de electrones y huecos de compuestos semiconductores III-V. La mayor movilidad a temperatura ambiente de los electrones (rojo) y los huecos (azul) en las capas de inversión y los pozos cuánticos se muestra como una función de la constante de red de los semiconductores (longitud lateral de una celda unitaria cúbica de un cristal semiconductor). Las movilidades se informan para cualquier concentración de portadores. Para capas relajadas, sin tensión, la constante de red es la natural, como se muestra en la escala. Para capas pseudomórficas, que están perfectamente deformadas sobre un sustrato con una constante de red diferente, la constante de red es la del sustrato. Como resultado, los puntos marcados con la misma etiqueta pueden aparecer en diferentes ubicaciones en la figura. El impacto de la deformación biaxial se indica mediante una flecha que representa el aumento de la deformación biaxial compresiva. Existe una amplia brecha entre las movilidades de electrones y huecos entre los semiconductores compuestos III-V en cualquier constante de red, y la deformación biaxial compresiva juega un papel importante en reducir esta brecha.

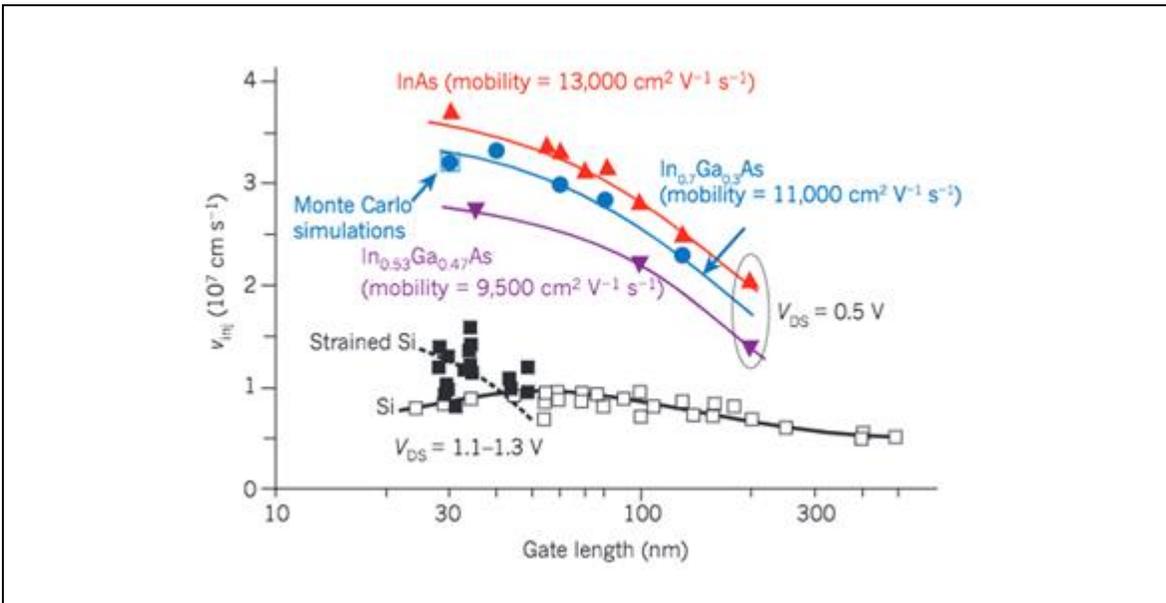


Figura 1.18. Velocidad de inyección de electrones en HEMT III–V. La velocidad de inyección de electrones, v_{inj} , se muestra para InGaAs e InAs HEMT con diferentes composiciones de canal y para MOSFET de silicio en función de la longitud de la compuerta. Los HEMT III–V se miden a un voltaje de drenador-fuente (V_{DS}) de 0.5 V, los MOSFET de silicio a un V_{DS} de 1.1–1.3 V. A pesar de esta discrepancia en el voltaje, la velocidad de inyección de los canales de InGaAs es más del doble que la de los MOSFET de silicio. La tendencia a la saturación de la velocidad de inyección de los canales de InGaAs sugiere que se está produciendo un transporte balístico (libre de colisiones); esto es confirmado por simulaciones balísticas de Monte Carlo que caen justo en el punto experimental.

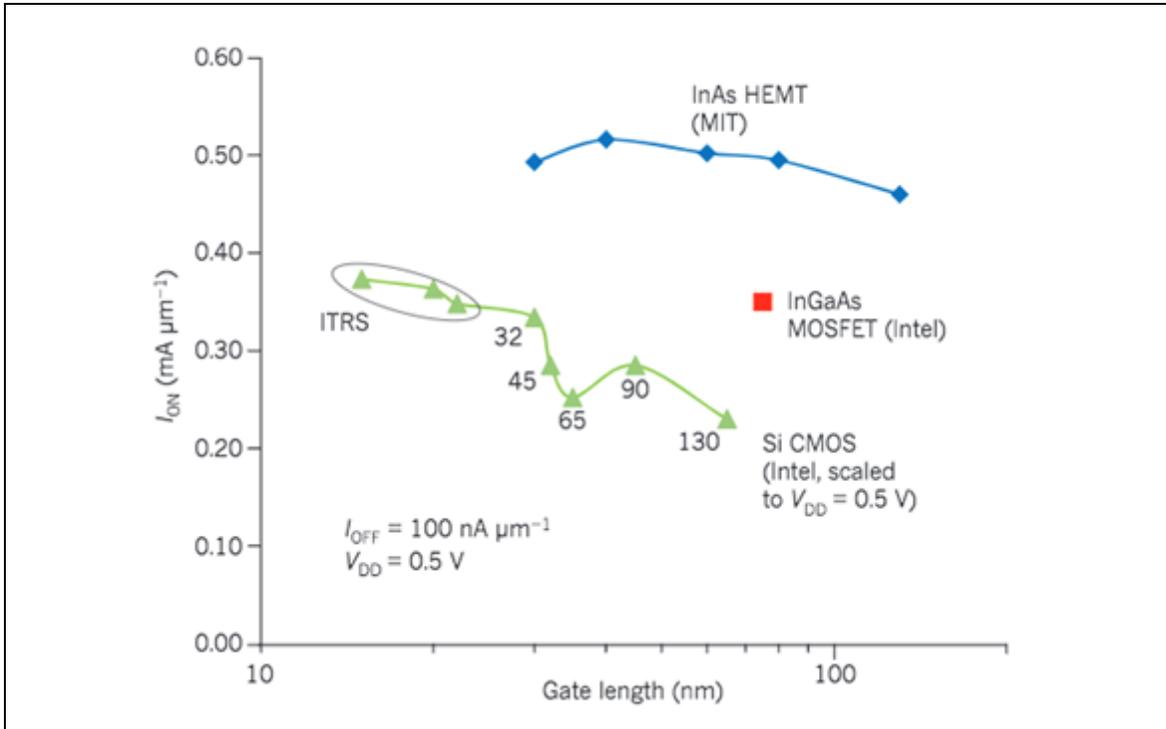


Figura 1.19. Corrientes altas "ON" en III-V HEMT. El gráfico muestra cómo la corriente "activada", I_{ON} , varía con la longitud de la compuerta para HEMTs de InAs y MOSFETs de silicio a 0,5 V para una corriente "desactivada" fija de $100 \text{ nA } \mu\text{m}^{-1}$. Los datos de silicio corresponden a 0,5 V y se obtienen de modelos de datos experimentales publicados a voltajes más altos. Los puntos de datos etiquetados como ITRS representan proyecciones para el escalado futuro de la Hoja de ruta tecnológica internacional para semiconductores. El cuadrado rojo corresponde a un MOSFET de InGaAs; el hecho de que ya supere el rendimiento de los MOSFETs de silicio a 0,5 V es muy alentador.

Así, es claro que el estudio de QWRs es un tema de investigación actual y muy dinámico, el cual promete futuras aplicaciones tecnológicas de gran impacto y el descubrimiento de nuevos fenómenos físicos unidimensionales.

1.4 Objetivo del trabajo de tesis

Diseñar y realizar la síntesis de hilos cuánticos auto-organizados de compuestos III-V, con las características necesarias para realizar estudios experimentales de la interacción electrónica en ellos. Además, implementar una interfaz física en el software comercial COMSOL multiphysics que permita describir la interacción electrónica de muchos electrones en hilos cuánticos con las características particulares de las muestras crecidas, teniendo especial interés en el estudio de la cristalización de Wigner y sus posibles aplicaciones.

Referencias

- [1] M. Bardosova and T. Wagner. (2015). *Nanomaterials and Nanoarchitectures*. Dordrecht, Holanda. Springer Science+Business Media Dordrecht.
- [2] Esaki, L., Tsu, R. (1970). Superlattice and Negative Differential Conductivity in Semiconductors. *IBM Journal of Research and Development*, 14(1).
- [3] X. L. Wang and V. Voliotis. (2006). Epitaxial growth and optical properties of semiconductor quantum wires. *J. Appl. Phys*, 99(121301).
- [4] H. Sakaki. (1980). Scattering Suppression and High-Mobility Effect of Size-Quantized Electrons in Ultrafine Semiconductor Wire Structures. *Jpn. J. Appl. Phys*, 19(12).
- [5] Zhou, Z., Lan, C., Yip, S. *et al.* (2018). Towards high-mobility $\text{In}_{2x}\text{Ga}_{2-2x}\text{O}_3$ nanowire field-effect transistors. *Nano Res.* 11(11).
- [6] Y. Arakawa and H. Sakaki. (1982). Multidimensional quantum well laser and temperature dependence of its threshold current. *Appl. Phys. Lett*, 40 (939).
- [7] Duan, X., Huang, Y., Cui, Y., Wang, J., & Lieber, C. M. (2001). Indium phosphide nanowires as building blocks for nanoscale electronic and optoelectronic devices. *Nature*, 409(6816).
- [8] Sarkar, A., Patwardhan, A., & Bhattacharyya, T. K. (2006). *Implementation of three Qubit Quantum Logic Gates in Ballistic Nanowires*. *IEEE Conference on Nanotechnology*.
- [9] Sergey M. Frolov, *et al.* (2013). Quantum computing based on semiconductor nanowires. *MRS Bulletin*, 38(10)
- [10] Reitzenstein, S., Worschech, L., Hartmann, P., Kamp, M. and Forchel, A. (2002). Capacitive-Coupling-Enhanced Switching Gain in an Electron Y-Branch Switch. *PhysRevLett*. 89(22).
- [11] Chuancheng Jia, Zhaoyang Lin, Yu Huang, and Xiangfeng Duan. (2019). Nanowire Electronics: From Nanoscale to Macroscale. *Chem. Rev.*, 119(15).
- [12] Ying Sun, Taige Dong, Linwei Yu, Jun Xu, and Kunji Chen. (2019). Planar Growth, Integration, and Applications of Semiconducting Nanowires. *Adv. Mater*, 32(27).
- [13] Rossi, F., & Molinari, E. (1996). Linear and nonlinear optical properties of realistic quantum-wire structures: The dominant role of Coulomb correlation. *Physical Review B*, 53(24).
- [14] Timp, G., Behringer, R. E., & Cunningham, J. E. (1990). Suppression of impurity scattering in a one-dimensional wire. *Physical Review B*, 42(14).

- [15] E. Wigner. (1934). On the interaction of electrons in metals. *Phys. Rev.*, 46(11).
- [16] Shapir et al. (2019). Imaging the electronic Wigner crystal in one dimension. *Science* 364(6443).
- [17] Petroff et al. (1982). Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties. *Appl. Phys. Lett.*, 41(7).
- [18] Angang Dong et al. (2008). Colloidal GaAs Quantum Wires: Solution-Liquid-Solid Synthesis and Quantum-Confinement Studies. *J. Am. Chem. Soc.*, 130(18).
- [19] Wacaser et al. (2009). Preferential Interface Nucleation: An Expansion of the VLS Growth Mechanism for Nanowires. *Adv. Mater.*, 21(2).
- [20] Zhukov et al. (2014). Investigations of Local Electronic Transport in InAs Nanowires by Scanning Gate Microscopy at Liquid Helium Temperatures. *JETP Letters*, 100(1).
- [21] M. Lu et al. (2003). Silicon quantum-wires arrays synthesized by chemical vapor deposition and its micro-structural properties. *Chemical Physics Letters*, 374(5).
- [22] Méndez, R., López, M., Méndez, V. H., Valdez, D., Ortega, E., Benitez, A., Ponce, A. y Cruz, E. (2017). Nanowire Y-junction formation during self-faceting on high-index GaAs substrates. *RSC Adv.* 7(29).
- [23] Jesús A. del Alamo. (2011). Nanometre-scale electronics with III–V compound semiconductors. *Nature*, 479(7373).

Capítulo 2. Fundamentos teóricos

En el presente capítulo se describirán fundamentos de diversos tópicos relacionados con el desarrollo en esta tesis, tales como;

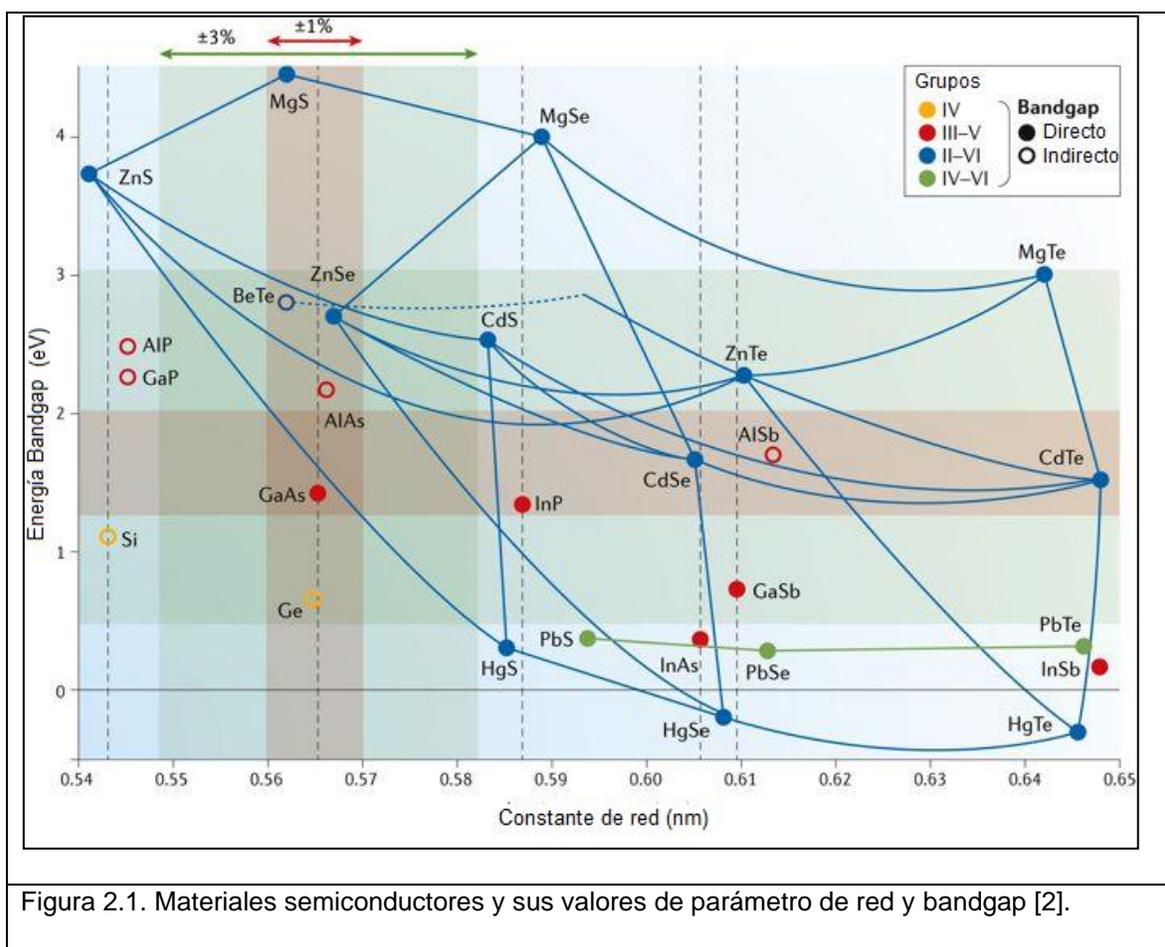
- 2.1. Materiales semiconductores
- 2.2. Crecimiento epitaxial
- 2.3. Auto-organización como medio para la formación de hilos cuánticos
- 2.4. Confinamiento cuántico
- 2.5. Cristalización Wigner
- 2.6. Descripción de COMSOL Multiphysics (método de elemento finito)

En la sección 2.7 se describirán, además, algunos antecedentes específicos directamente relacionados con este trabajo.

2.1. Materiales semiconductores

Los materiales semiconductores, entre los que se encuentran los compuestos III-V, tienen dos propiedades importantes que los vuelven interesantes y que se tienen que considerar al momento de diseñar una heteroestructura, estas son el valor de la energía prohibida o “band gap” (E_g) y el parámetro de red. El band gap es una zona que se encuentra entre las bandas de energía, que no puede ser ocupada por los electrones. La magnitud de este ancho de banda prohibida es la diferencia de energía (del orden de eV) entre la parte superior de la banda de valencia y la parte inferior de la banda de conducción [1]. La constante de red se refiere a una dimensión física de la celda unitaria en una red cristalina, es decir, la longitud a lo largo de cada eje cristalográfico. La importancia del parámetro de red en el diseño de una heteroestructura se debe a que en el crecimiento epitaxial es una medida de la compatibilidad estructural entre diferentes materiales, la combinación de la constante de red es importante para el crecimiento de capas delgadas de materiales sobre otros materiales; cuando las constantes difieren considerablemente, se introducen tensiones en la capa que pueden provocar defectos indeseados.

La figura 2.1 muestra una distribución de varios materiales semiconductores de acuerdo a los parámetros de red y sus anchos de banda prohibida. Las líneas que conectan los puntos que representan los materiales binarios de semiconductores III-V y II-VI indican las aleaciones ternarias.



La información que proporciona la figura 2.1 permite elegir adecuadamente los semiconductores a utilizar dependiendo de las características que se desean obtener. Las cinco líneas verticales negras discontinuas indican sustratos comúnmente utilizados para el crecimiento epitaxial de Si, GaAs, InP, InAs y GaSb.

En el caso particular de esta tesis se utilizaron compuestos III-V (GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) los cuales son ampliamente utilizados juntos, debido a su casi coincidencia del parámetro de red además de que la aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ permite variar el ancho de banda prohibida a partir de que una fracción x de los átomos de galio sea sustituida por aluminio, la variación de la brecha con la proporción de aluminio x , para $x \leq 0.4$, está dada por la expresión:

$$E_g(x) = 1.42 + 1.087x + 0.438x^2 \text{ eV}$$

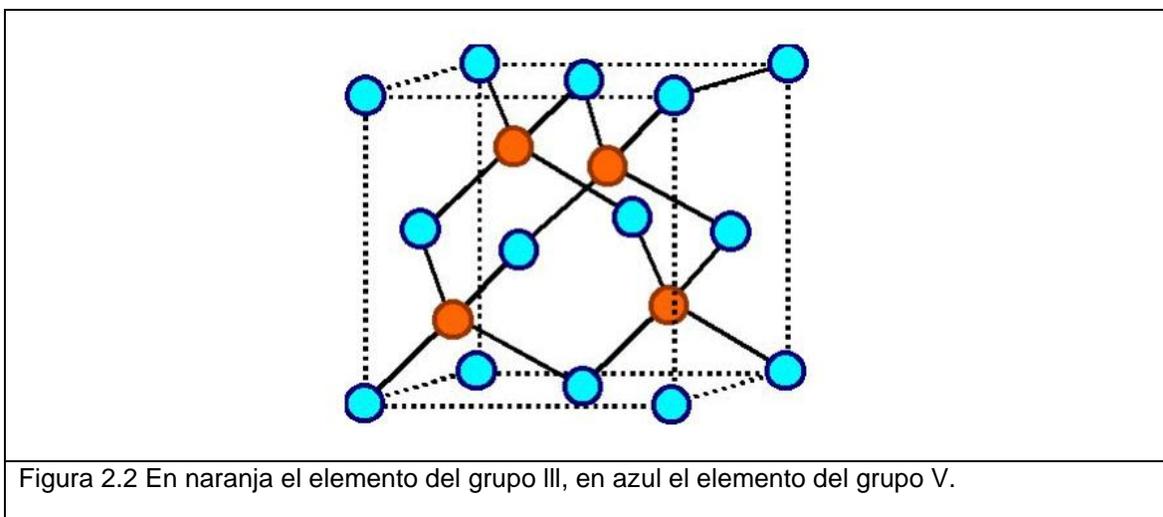
Es importante mencionar que si $x > 0.4$ entonces se tendrá un bandgap indirecto. Toda aleación $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ tiene un bandgap mayor que el compuesto GaAs , permitiendo así mediante una heteroestructura $\text{GaAs}/\text{AlGaAs}$ generar un pozo de potencial para electrones en la banda de conducción o para huecos en la banda de valencia. La tabla 2.1 muestra

algunas propiedades importantes de los compuestos GaAs (bandgap directo), AlAs (bandgap indirecto) y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [3].

Tabla 2.1. Algunas propiedades de los compuestos semiconductores utilizados en este trabajo.

Semiconductor	GaAs	AlAs	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, con $x=0.35$
Constante de red (Å)	5.65	5.66	$5.6533+0.0078x$	5.6560
Estructura cristalina	zincblenda	zincblenda	zincblenda	zincblenda
E_g (eV)	1.42	2.16	$1.42 + 1.087x + 0.438x^2$	1.85

Este tipo de semiconductores binarios conformados por átomos del grupo III y V presentan una estructura cristalina conocida como zincblenda, la cual consiste en dos subredes interpenetradas cúbicas centradas en las caras (ver figura 2.2).



También es importante añadir la siguiente información sobre semiconductores intrínsecos y extrínsecos ya que a nuestra muestra se le añadió un dopado tipo n mediante el uso de zonas ricas en Si bien localizadas, llamadas “delta doping”.

En los semiconductores intrínsecos, a muy bajas temperaturas, la banda de conducción está vacía y la banda de valencia llena por lo que al aumentar la temperatura algunos electrones de valencia pueden ser excitados a la banda de conducción. Es decir, los semiconductores suelen comportarse como conductores o aislantes dependiendo de varios parámetros, como temperatura, E_g , radiación incidente, etc.

Los semiconductores extrínsecos son aquellos semiconductores intrínsecos que se le añaden impurezas. A este proceso se le conoce como impurificación y sirve para tener portadores eléctricos que pueblen la banda de conducción. A las impurezas cuyos átomos entregan electrones se les conoce como donadores y entonces tendremos un semiconductor dopado tipo n con preponderancia a la conducción. En el caso contrario, cuando se añaden impurezas para “arrancar” a los electrones más débilmente vinculados de los átomos del semiconductor y provocar la creación de huecos, se obtiene un semiconductor tipo p. A tales impurezas dopantes se les conoce como aceptores. En la teoría de bandas la impurificación influye de la siguiente manera; si es tipo n, se crea una banda de energía permitida inmediatamente debajo de la banda de conducción, formada por los electrones libres que fácilmente pueden pasar a la banda de conducción. Por otro lado, si el dopaje es tipo p, de igual manera se crea una banda de energía permitida justamente por encima de la banda de valencia. Así mismo, el nivel de Fermi correspondiente a estos materiales cambia: en el semiconductor intrínseco el nivel de Fermi se encuentra en el centro de la banda prohibida y en un semiconductor extrínseco dependiendo del tipo de dopaje estará más cerca de la banda de valencia (tipo p) o de la banda de conducción (tipo n) [4].

2.2. Crecimiento epitaxial

El término epitaxia (del griego “epi”, sobre y taxis, “orden”) se refiere al crecimiento de capas o películas cristalinas sobre un sustrato cristalino, en el que las capas formadas tienen la misma estructura cristalina que el sustrato. Si la película es del mismo material que el sustrato, se denomina homoepitaxia, y si es de un material diferente, heteroepitaxia. Como ya se mencionó, en la heteroepitaxia es importante el parámetro de red, tanto del sustrato como el del material depositado, la diferencia entre estos no debe exceder el 10% para que se produzca el crecimiento epitaxial [5]. El término autoensamble se usa generalmente para la formación espontánea de estructuras epitaxiales tales como QWRs o puntos cuánticos [6].

En el caso de la epitaxia de haces moleculares (MBE), técnica utilizada para el crecimiento de las nanoestructuras presentadas en esta tesis, hay tres zonas donde se presentan diferentes fenómenos físicos, la primera zona es donde se produce la generación de los haces moleculares a partir de la sublimación de la fuente sólida, la siguiente zona es donde ocurre la transferencia vía fase de vapor hacia el área del sustrato el cual es calentado a la temperatura necesaria y aquí en el sustrato es la tercera zona en donde ocurre el proceso de cristalización [7]. En esta tercera zona es donde ocurre el crecimiento epitaxial como consecuencia de un proceso cinético superficial, podemos resumir el crecimiento epitaxial de la siguiente manera (figura 2.3):

- Llegada de los átomos sobre la superficie del sustrato
- Adsorción/desorción de los átomos sobre la superficie

Capítulo 2

- Difusión superficial de los átomos adsorbidos sobre la superficie (son libres de moverse hasta encontrar una posición energética favorable)
- Nucleación
- Crecimiento de la película

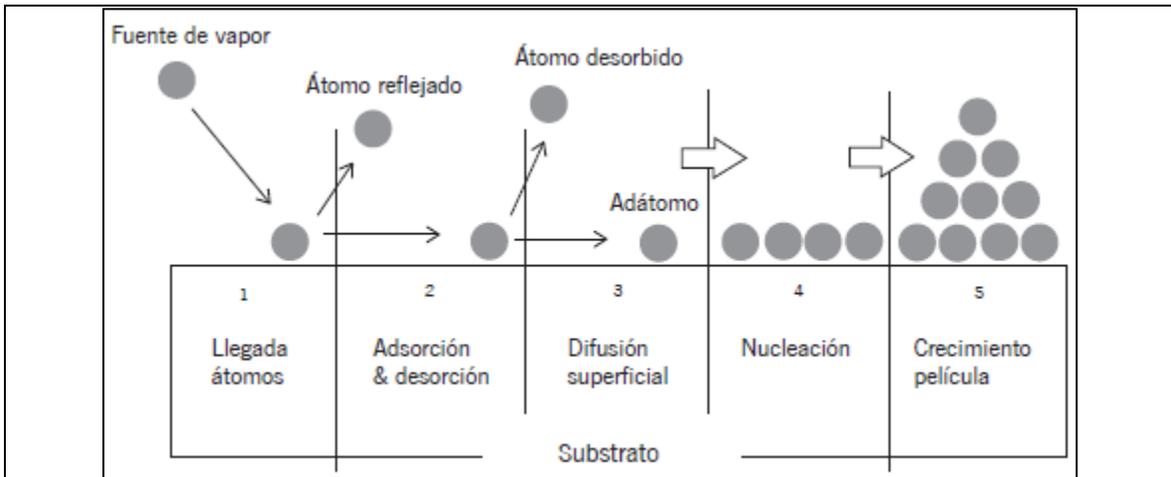


Figura 2.3. Proceso del crecimiento epitaxial [8].

La nucleación es importante en el proceso de crecimiento epitaxial ya que es el paso anterior a la formación de la película o isla, para explicar la nucleación utilizaremos el modelo del cristal de Kossel (figura 2.4).

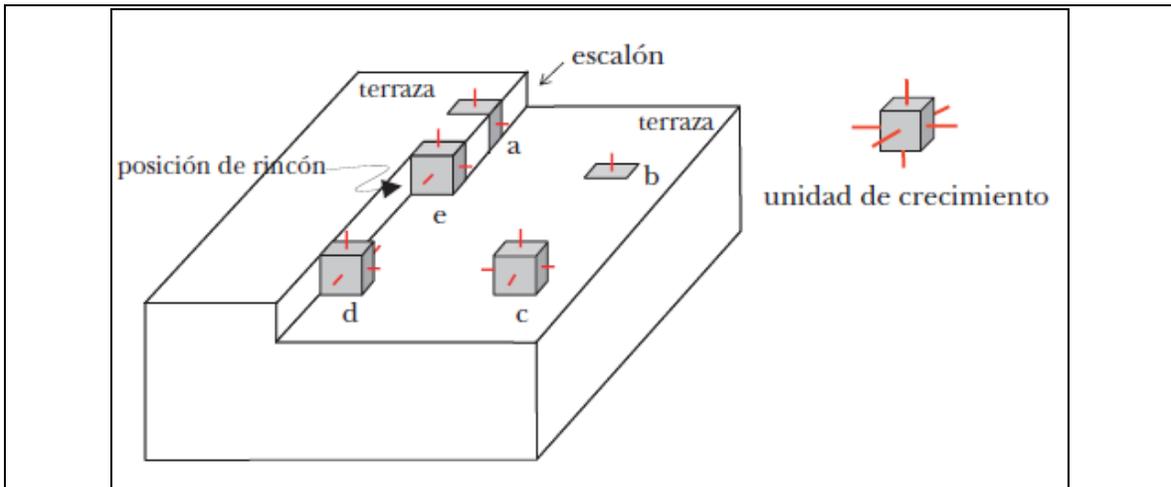


Figura 2.4. Cristal de Kossel, terraza-escalón-rincón [9].

Cada cubo representa una unidad de crecimiento con seis posibles enlaces (líneas rojas), un escalón puede ser definido como el límite entre una región de la superficie y otra región

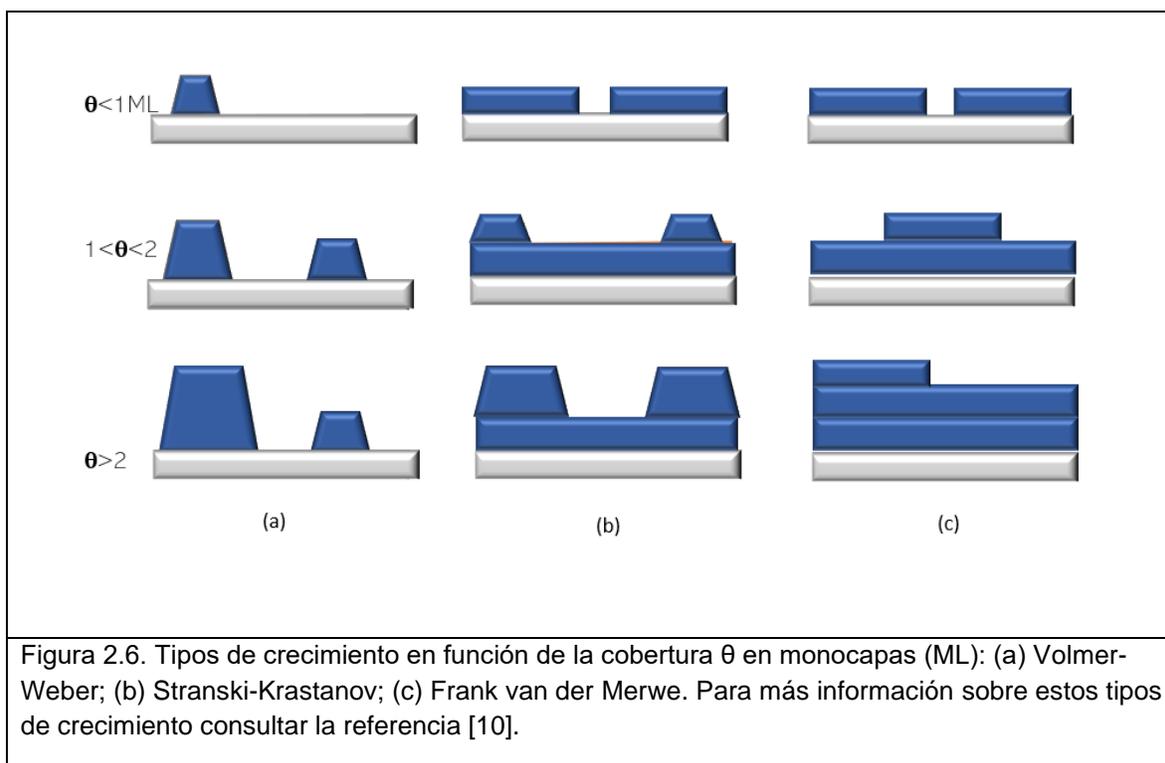
adyacente a la primera cuya altura difiere por una unidad de crecimiento, cada unidad de crecimiento puede ocupar los siguientes sitios en la superficie:

- Adsorbido en un escalón (sitio a)
- Sobre un hueco en la cara del cristal (sitio b)
- Localizado sobre la superficie de la terraza (sitio c)
- Localizado sobre el escalón (sitio d)
- Localizado en el rincón del escalón (sitio e)

Dependiendo del sitio que ocupe la unidad de crecimiento, esta tendrá diferente número de enlaces saturados, por ejemplo, el sitio "a" tiene 4 enlaces saturados de sus 6 correspondientes, el sitio "d" tiene 2 enlaces saturados, por lo tanto, habrá una variación energética superficial en relación a la energía de enlace. Los sitios energéticamente favorables serían el "a" y el "b", ya que tienen más enlaces saturados, sin embargo, estas posiciones no generan el crecimiento cristalino al ser limitadas. Las posiciones "c" y "d" son muy inestables y energéticamente no viables al saturar menos enlaces. El sitio favorable energéticamente es el llamado posición de rincón "e" o posición de cristal medio ya que se mantiene el equilibrio energético al tener 3 de sus 6 enlaces saturados, y a partir de este sitio se puede continuar con el crecimiento [9], este tipo de crecimiento se conoce como propagación de escalones, para esto, es necesario que la longitud de difusión de las especies atómicas sea la requerida para que se incorporen al borde de los escalones y esto se logra con una temperatura del sustrato relativamente alta (500-600°C para GaAs) [5]. La generación de escalones ocurre debido a la nucleación bidimensional sobre la superficie cristalina a altas sobresaturaciones, los bordes de los núcleos bidimensionales son escalones que poseerán posiciones de rincón, así que la formación capa a capa se puede dar ya sea por propagación de escalones o a partir de la coalescencia de varias islas bidimensionales.

2.2.1 Tipos de crecimiento epitaxial

Existen tres modos bien conocidos de crecimiento heteroepitaxial, en la figura 2.5 se muestra un esquema de estos tres modos de crecimiento.



- a) El crecimiento Volmer-Weber (VW) en el que ocurre una formación de islas tridimensionales sobre el sustrato debido a que los átomos depositados están más fuertemente ligados uno de otro que al sustrato [11].
- b) El crecimiento Stranski-Krastanov (SK), el cual es un caso intermedio, capa-mas-isla, en la fase inicial se forma una capa y entre más material se deposite se empiezan a formar islas tridimensionales sobre esta capa [11].
- c) El crecimiento capa por capa o Frank van der Merwe (FvdM), este tipo de crecimiento bidimensional se da debido a que hay una interacción más fuerte de los átomos del material a crecer con el sustrato que entre ellos, hasta que se termina de crecer una capa empieza la formación de la otra [11].

La cobertura “ θ ” es el espesor que la capa epitaxial tendría si fuera uniformemente distribuida sobre el sustrato. Los principales factores que determinan el tipo de crecimiento son: el desajuste del parámetro de red y la energía superficial. En el caso del desajuste o no coincidencia del parámetro de red, si la diferencia del parámetro de red entre el sustrato y la capa epitaxial es menor que 2-3% se está tratando con el denominado régimen pseudomórfico, esta condición favorece el mecanismo de crecimiento capa por capa o FvdM [5]. En el caso del crecimiento SK y VW el desajuste del parámetro de red por encima del 2-3% provoca la deformación elástica de la capa epitaxial acumulándose energía elástica la cual se libera en forma de islas tridimensionales, específicamente en el caso SK, conforme avanza el crecimiento capa por capa hasta que se llega a un determinado espesor

“ θ ” también conocido como espesor crítico y este es excedido entonces ocurrirá la formación de islas 3D [5].

2.3. Auto-organización

El proceso de auto-organización que se produce espontáneamente en el crecimiento epitaxial bajo las condiciones experimentales adecuadas permite obtener QWRs de alta calidad. Se trata de una aproximación *bottom-up* y su principal ventaja es que en esta técnica el sustrato no está expuesto a procesos en los cuales se puedan introducir defectos o contaminantes.

Los mecanismos físicos que gobiernan los fenómenos fundamentales de la auto-organización de nanoestructuras son la cinética y la termodinámica, los cuales desempeñan papeles complementarios en cierta medida. Si un sistema se puede aproximar como cerrado (experimentos donde ocurre el recocido o la interrupción del crecimiento introducida en el proceso de crecimiento) y evolucionando hacia el equilibrio termodinámico, su estado final solo se puede alcanzar en el experimento si la cinética es suficiente, es decir, que la difusividad de los átomos no sea demasiado baja. Por otro lado, la cinética de evolución en un sistema cerrado se dirige hacia su estado de equilibrio determinado por la termodinámica, esto es, hacia el estado que cumple las condiciones del mínimo de energía libre [6]. El teorema dado por Herring [12], dice: si una superficie macroscópica dada de un cristal no coincide en orientación con alguna porción del límite de la forma en equilibrio, siempre existirá una estructura colina y valle que tenga una energía libre menor que una superficie plana, en cambio si la superficie ocurre en la forma en equilibrio, no habrá una estructura colina y valle que pueda ser más estable.

Consideremos una superficie de orientación \hat{n} (orientación pasiva) que es llevada al equilibrio, por lo tanto, esta superficie se dividirá en facetas, el facetamiento ocurre debido a la relajación de la superficie hacia el equilibrio en escalas de longitud determinadas por la movilidad atómica y que producirá la estructura colina-y-valle (véase la figura 2.7).

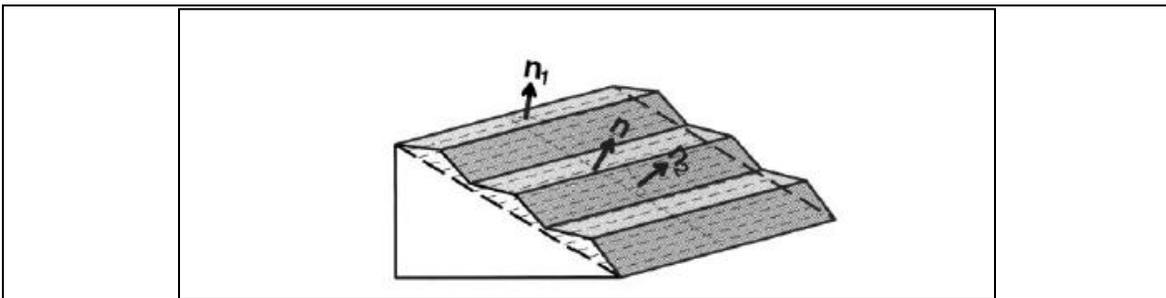


Figura 2.7. Representación de la estructura colina-y-valle con sus vectores normales de orientación tanto de la superficie plana (\hat{n}) como de las caras de las facetas (\hat{n}_i) [13].

El ángulo de la orientación superficial siempre es conservado y las áreas de las facetas son determinadas a partir de ello, esto se puede formular (ecuación 1) de acuerdo con Jeong y Williams [13], como sigue:

(1)

$$\sum_i A_i \hat{n}_i = A \hat{n}$$

Donde el área de la superficie inestable original es A y las normales de las caras correspondientes a las facetas en la forma del cristal en equilibrio son \hat{n}_i y sus áreas son A_i , la energía de la superficie facetada es menor que la energía de la superficie plana a pesar del incremento superficial ($>A$), así que la estructura colina-y-valle debe cumplir la siguiente relación (ecuación 2) [13]:

$$\sum_i \gamma_i A_i < \gamma A \quad (2)$$

Por lo tanto, como ya se mencionó, la estructura colina-y-valle surge a partir de la minimización de la energía superficial en el que ocurre un reordenamiento de los átomos para dar lugar a esta estructura, la energía de esta estructura de acuerdo con Shchukin [6], se puede escribir como la integral superficial sobre las facetas (ecuación 3).

$$\gamma_{sup} = \int \frac{\gamma(\hat{m}|T)}{\hat{m} \cdot \hat{n}} dA \quad (3)$$

El término $\gamma(\hat{m}|T)$ se refiere a la energía libre superficial por unidad de área, \hat{m} es el vector unitario dependiente de la dirección cristalográfica, normal a la superficie facetada en cada punto, y \hat{n} es el vector unitario constante normal a la superficie plana inicialmente. El producto escalar indica que el elemento superficial dA de la faceta es normalizado por unidad de área proyectada de la superficie plana, las superficies laterales fijas del cristal implican que la normal promedio a la superficie superior coincide con la normal a la superficie plana, es decir, (ecuación 4):

$$\frac{1}{A} \int \hat{m} dA = \hat{n} \quad (4)$$

El mínimo de la energía superficial (ec.3) nos dará la orientación de las facetas, así como la fracción de la superficie plana dentro de la cual cada faceta es proyectada [6].

En este punto sabemos los factores que implican la formación de las superficies facetadas pero aún tenemos que describir la periodicidad de estas estructuras.

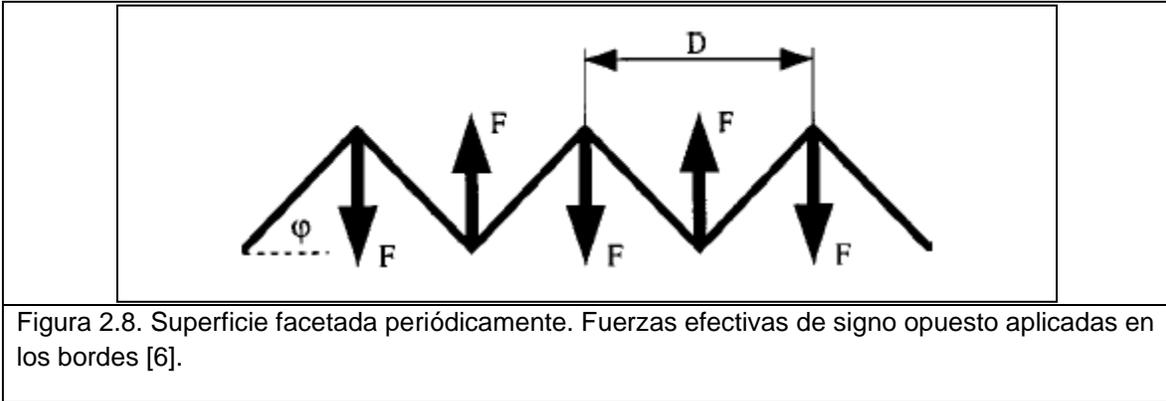
Si una superficie cristalina es inestable y se reorganiza en un sistema de facetas inclinadas, la conservación de la orientación promedio de la normal a la superficie implica la coexistencia de facetas alternas (ver la figura 2.8). En la intersección de las facetas vecinas aparecen bordes puntiagudos o partes estrechas redondeadas de la superficie, estos defectos lineales dan una contribución de corto alcance a la energía libre superficial y una contribución de largo alcance debido a la energía de deformación elástica.

La energía libre por unidad de área proyectada de una superficie facetada con un periodo unidimensional de acuerdo con Marchenko [14], es como se muestra en la ecuación 5, la estructura se muestra en la figura 2.8.

(5)

$$F = E_{\text{sup}} + E_{\text{bordes}} + \Delta E_{\text{elástica}}$$

F es la energía libre total por unidad de área proyectada, E_{sup} es la energía libre de las facetas inclinadas, E_{bordes} es la energía de corto alcance de los bordes y $\Delta E_{\text{elástica}}$ es la energía elástica.



La energía de las facetas inclinadas por unidad de área proyectada solo depende de la orientación de las facetas y no del periodo de la estructura "D". La energía de corto alcance de los bordes por unidad de área proyectada es (ec.6) [6]:

$$E_{\text{bordes}} = \frac{\eta(\varphi)}{D} \equiv \frac{\eta^+(\varphi) + \eta^-(\varphi)}{D} \quad (6)$$

Donde $\eta^+(\varphi)$ es la energía de corto alcance de un borde convexo por unidad de longitud del borde y $\eta^-(\varphi)$ indica la misma energía pero del borde cóncavo.

En el caso de la energía de deformación elástica la cual es cero en la ausencia de deformación conlleva a que en el equilibrio sea negativa lo cual corresponde a la relajación del esfuerzo superficial en los bordes del cristal, esta energía elástica negativa es conocida como energía de relajación elástica. La deformación elástica causante de esta energía se propaga en el cristal a una distancia del orden de "D" y decae a distancias mayores desde la superficie. Dado que el campo de deformación se genera por defectos lineales en la superficie, es decir, por los bordes lineales del cristal, la dependencia de la energía de relajación elástica con el periodo de la superficie facetada se muestra en la figura 2.9, " D_{opt} " se refiere al periodo de facetamiento óptimo [6], se observa claramente que el periodo óptimo ocurre en la máxima minimización de la energía.

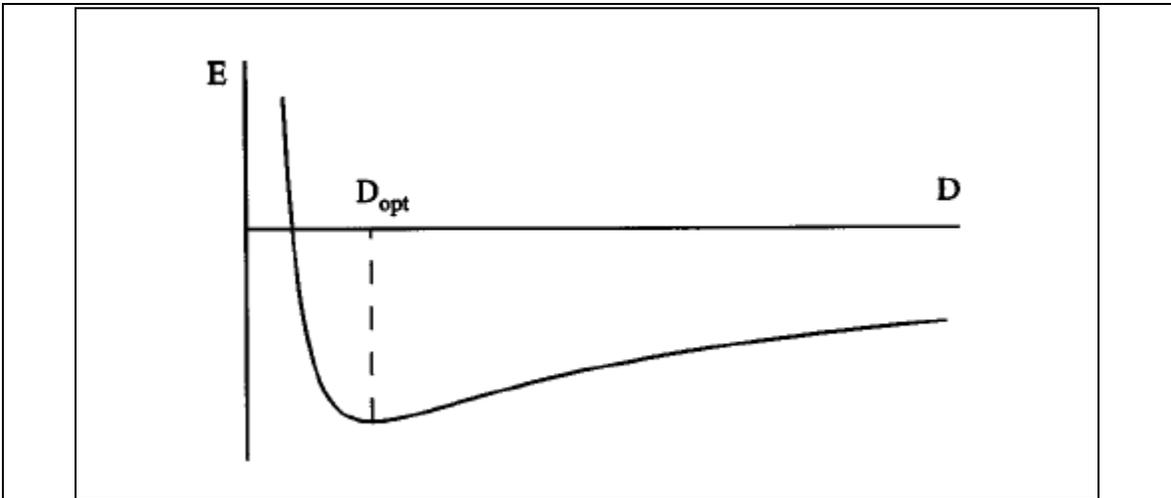


Figura 2.9. Energía de una superficie facetada periódicamente por unidad de área superficial vs el periodo "D" [6].

Para dejar en claro la relación entre facetamiento e hilos recurriremos al trabajo de Nötzel [15], véase la figura 2.10 la cual indica que la formación de los hilos ocurrió a lo largo de la dirección $[\bar{2}33]$ sobre un sustrato de alto índice de GaAs (311), la heteroestructura está compuesta de estructuras multicapa GaAs/AlAs

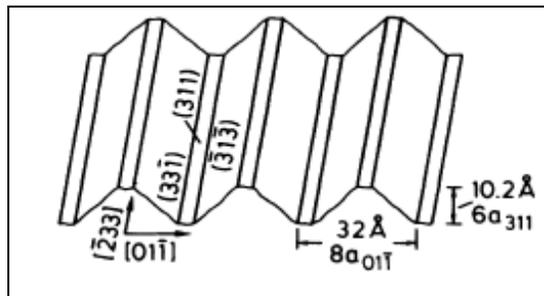


Figura 2.10. La superficie plana con alta energía superficial se dividió en facetas correspondientes a los planos $(\bar{3}1\bar{3})$ y $(33\bar{1})$ con menor energía superficial [15].

El rango de superficies en las cuales ocurre el facetamiento periódico espontaneo no se limita solo a crecimientos heteroepitaxiales, en la referencia [16] se realizó un crecimiento homoepitaxial sobre un sustrato GaAs (631) y se obtuvieron hilos cuánticos bifurcados a partir de una superficie facetada. Tampoco se limita solo a superficies de alto índice, uno

de los casos más estudiados de superficies de bajo índice es el facetamiento en TaC (110) [17]. Es importante señalar que las superficies de alto índice al ser más inestables hay mayor probabilidad de observar el facetamiento [6], además al tener este tipo de superficies un comportamiento anisotrópico la difusión de los átomos en una dimensión favorece a la formación de los hilos cuánticos.

Podemos concluir que la auto-organización ocurre en el quasi-equilibrio y que además es el resultado de un sistema que tiende a minimizar su energía superficial provocando el facetamiento, a partir de la superficie facetada y mediante la difusión unidimensional de los átomos adsorbidos se logra la formación de hilos cuánticos.

2.4. Confinamiento cuántico

El confinamiento cuántico ocurre cuando el movimiento de los portadores (electrones y huecos) está restringido en una o más direcciones por barreras de potencial, una manera de inducirlo es rodeando una nanoestructura con materiales de gap mayor, por ejemplo, se intercala un material como el arseniuro de galio (GaAs) entre dos capas de otro material con una banda prohibida mayor, como el arseniuro de galio-aluminio (AlGaAs), el confinamiento cuántico se logra cuando el tamaño de las nanoestructuras semiconductoras es comparable o menor que la longitud de onda de De Broglie λ (ec.7) de los portadores:

$$\lambda_B = \frac{h}{\sqrt{3m^*K_B T}} \quad (7)$$

En la expresión h es la constante de Planck, k_B es la constante de Boltzmann, T es la temperatura y m^* es la masa efectiva de los portadores. Por ejemplo, para electrones en el caso de GaAs a 300°K y considerando una masa efectiva de $0.067m_0$ se obtiene una longitud de $\approx 24\text{nm}$.

Así que en los puntos cuánticos los portadores están confinados en las tres direcciones, en el hilo cuántico los portadores están confinados en dos direcciones por lo tanto los portadores solo se pueden mover en una dimensión, en el caso del pozo cuántico los portadores son libres de moverse en un plano ya que solo están confinados en una dirección, esta diferencia en el confinamiento da lugar a cambios en la densidad de estados electrónicos, tal magnitud representa el número de estados disponibles por unidad de volumen y energía, en estas nanoestructuras los electrones ocupan estados cuánticos discretos en lugar de una distribución continua como en el caso del material semiconductor en bulto, de acuerdo con el tipo de estructura la densidad de estados varia, véase la figura 2.11.

Para un semiconductor en bulto, la densidad de estados viene dada por:

$$D_{3D} = \frac{dN}{dE} = \frac{8\pi\sqrt{2}}{h^3} m^{*3/2} \sqrt{E - E_{min}}$$

Para un pozo cuántico, la densidad de estados es la siguiente:

$$D_{2D} = \frac{dN_{2D}}{dE} = \frac{4\pi m^*}{h^2}$$

Para un hilo cuántico la densidad de estados es:

$$D_{1D} = \frac{dN_{1D}}{dE} = \sqrt{\frac{2\pi m^*}{h^2}} \frac{1}{\sqrt{E - E_{min}}}$$

En el caso del punto cuántico se representa por deltas de Dirac:

$$D_{0D} = \frac{dN_{0D}}{dE} = \sum_{E_{min} < E} \delta(E - E_{min})$$

Donde m^* es la masa efectiva y E_{min} es la energía mínima del electrón, es decir, la energía de la parte inferior de la banda de conducción.

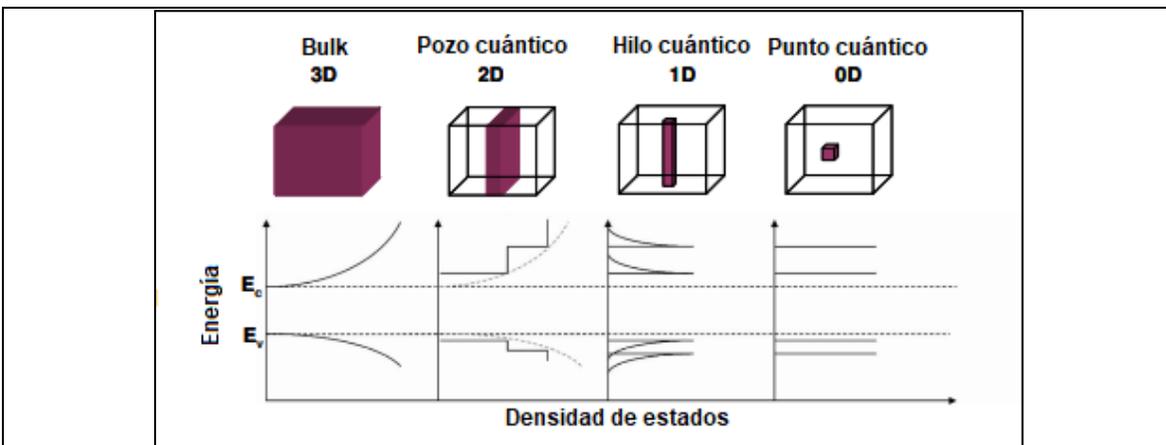


Figura 2.11. Densidad de estados en función de la energía para estructuras con diferente grado de confinamiento.

Comparando la densidad de estados para bulto, pozos e hilos cuánticos se puede ver la reducción sucesiva en grados de libertad para el movimiento del electrón, lo que conlleva a la reducción de la densidad " $D = (dN/dE)$ " en factores de $E^{1/2}$.

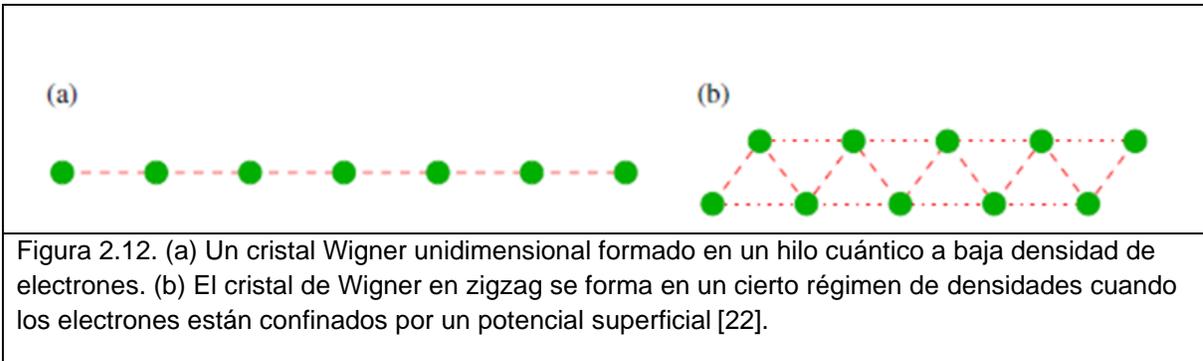
2.5. Cristalización de Wigner

El cristal de Wigner es un fenómeno físico que ocurre en sistemas cuánticos bidimensionales y unidimensionales, Wigner demostró que, como consecuencia de que la interacción de Coulomb domina sobre la energía cinética, a bajas densidades electrónicas puede ocurrir que por la minimización de la energía del sistema los electrones formen arreglos periódicos análogos a un cristal [18]. El régimen en el que es posible determinar de una manera general la formación del cristal de Wigner puede ser parametrizado usando el radio de Wigner-Seitz “ r_s ”, el cual se define como la distancia promedio entre electrones en unidades del radio de Bohr. Para sistemas 2D su valor es $r_s = a_0^{-1} \frac{1}{\sqrt{\pi n}}$, donde n es la densidad de electrones por unidad de área y a_0 es el radio de Bohr [19],

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon\hbar^2}{m^*e^2}$$

En la fórmula de a_0 , la masa efectiva es m^* y ϵ es la permitividad del vacío. Estimaciones numéricas [20] sitúan el umbral para la transición hacia la cristalización de Wigner en $r_s > 40$ para sistemas 2D formando una red hexagonal.

Para el caso de sistemas en 1D (donde los electrones están confinados en dos direcciones), la transición hacia la formación del cristal de Wigner ocurre para $r_s = (n_{1D} a_0)^{-1} > 4$, donde n_{1D} es el número de electrones por unidad de longitud [21]. La figura 2.12 muestra la forma del cristal de Wigner para este sistema, sin embargo, el inciso b) es para un sistema quasi-unidimensional ya que corresponde al de un dispositivo conocido como contacto de punto cuántico (véase la figura 2.13) el cual se basa en un gas de electrones bidimensional que se hace pasar por la constricción aplicando un voltaje negativo a dos compuertas, lo que obliga a los electrones a fluir de un lado de la muestra al otro a través de un canal muy estrecho [22].



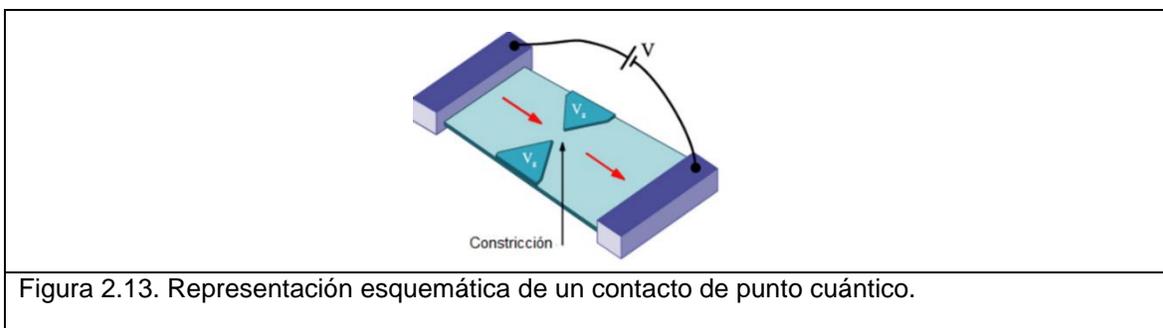


Figura 2.13. Representación esquemática de un contacto de punto cuántico.

En el caso de un sistema tridimensional (3D) para alcanzar densidades tan bajas en un material es extremadamente difícil, especialmente debido a las inevitables impurezas y defectos que interrumpirían la fase cristalina del electrón. Por lo tanto, hasta ahora no ha habido evidencias directas de un verdadero cristal 3D Wigner [23]. Una vez que ya hemos definido r_s podemos dar una explicación más completa sobre la cristalización de Wigner, la interacción de Coulomb disminuye al aumentar la separación promedio entre electrones en un factor $1/r_s$ ya que $U_C = \frac{2}{\epsilon r_s} [R_Y]$ donde R_Y es la constante de Rydberg ≈ 13.6 eV y ϵ es la constante dieléctrica del medio, mientras que la energía cinética disminuye en un factor $1/r_s^2$ debido a que $K = \frac{m}{m_e} \frac{1}{r_s^2} [R_Y]$, donde m_e es la masa efectiva y m es la masa del electrón en el vacío [23], por lo tanto en el límite de baja densidad cuando r_s excede el valor crítico, las interacciones de Coulomb se vuelven dominantes sobre el factor cinético y los electrones logran minimizar su energía organizándose en un cristal [24].

El cristal de Wigner ya ha sido observado experimentalmente en un sistema electrónico bidimensional en la superficie de helio líquido [25], además se ha podido determinar experimentalmente en sistemas semiconductores 2D [26,27] y en hilos cuánticos [28-30]. Para estos casos en relación al sistema 2D un campo magnético es aplicado perpendicularmente al gas electrónico bidimensional para inducir la formación del cristal utilizando espectroscopia de radio-frecuencia (la técnica de radio-frecuencia hace uso de resonancia magnética), para el caso de los hilos cuánticos se determina la formación del cristal mediante el uso de espectroscopia de tunelamiento en donde se obtiene un mapa de conductancia diferencial dI/dV .

2.6. COMSOL Multiphysics (método de elemento finito)

COMSOL Multiphysics [31] es un software que utiliza el método por elementos finitos (FEM, por sus siglas en inglés) de forma automatizada para la resolución de ecuaciones diferenciales parciales (PDE, por sus siglas en inglés) para aplicaciones físicas y de ingeniería, especialmente fenómenos acoplados, o multifísicos. también contiene varios módulos adicionales que amplían las capacidades del software en las siguientes áreas de aplicación: AC/DC, acústica, ingeniería química, transferencia de calor, y mecánica estructural, entre otros. Dentro de cada módulo se encuentran las distintas interfaces físicas, estas son plantillas de ecuaciones, variables, condiciones de frontera asociadas a cada tipo de problema físico. Además, COMSOL contiene un entorno de programación

gráfica en el que se pueden diseñar interfaces físicas personalizadas, esta herramienta se llama Physics Builder y fue utilizada en este trabajo de tesis para implementar la aplicación específica de la ecuación de Schrödinger más el potencial de Yukawa.

El método de elemento finito es uno de los mejores métodos numéricos para resolver PDE de forma aproximada, dados los valores de frontera, sin importar el tipo de geometría ni la forma de las fronteras. El procedimiento de cálculo FEM comienza con la división de la geometría del problema en varias subdivisiones (de aquí el nombre del método). Este paso del proceso se denomina mallado, los elementos pueden ser formas geométricas simples como se muestra en la figura 2.14, como triángulo, cuadrilátero, hexágono, etc. Entonces, la variación de la cantidad en cuestión que se rige por la PDE / ODE (por ejemplo, desplazamiento, temperatura, presión de fluido) se aproxima usando funciones simples con los valores de las variables dependientes en los nodos de elementos [32].

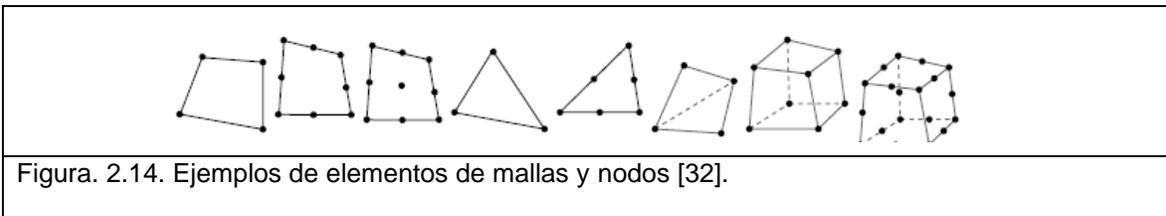


Figura. 2.14. Ejemplos de elementos de mallas y nodos [32].

Después del mallado para encontrar la solución aproximada, las PDE se transforman en ecuaciones algebraicas para cada elemento. Las soluciones son los valores nodales de la cantidad en cuestión (es decir, desplazamiento, temperatura, presión). Estos valores nodales se pueden utilizar para calcular los valores de una cantidad en cualquier punto dentro de cada elemento y, por lo tanto, en todo el dominio geométrico del problema. La solución aproximada \bar{u} para una variable u en un elemento de una dimensión, con n nodos, se expresa de la forma:

$$u(x) \approx \bar{u}(x) = \sum_{j=1}^n u_j N_j(x)$$

Donde se asigna una función de forma $N_j(x)$ a cada valor nodal, las funciones de forma suelen ser polinomiales y están en función de la variable de posición x [32]. En general el proceso que se lleva a cabo para realizar una simulación en COMSOL es el siguiente: (i) elección del módulo físico (por ejemplo, electroquímica o el módulo de transferencia de calor), (ii) creación de una geometría, (iii) asignación de una malla, (iv) especificación de una física o más, (v) elección del tipo de estudio (estacionario, dependiente del tiempo) y, (vi) la visualización de los resultados.

2.7. Antecedentes

2.7.1 Substrato GaAs (631) – Nanoestructuras 1D

Dentro de los trabajos de investigación realizados con el substrato de alto índice de arseniuro de galio con orientación cristalográfica (631), el dado por la referencia [33] genera un interés particular debido a los resultados reportados, los cuales muestran el crecimiento

por MBE de hilos con un alto grado de correlación en función de las condiciones de crecimiento. Como se puede ver en la imagen 2.15, los crecimientos son muy sensibles a los parámetros experimentales utilizados, pero mediante la adecuada elección de ellos, el sustrato de GaAs (631) resulta ser una plantilla efectiva para la auto-organización de nanoestructuras 1D.

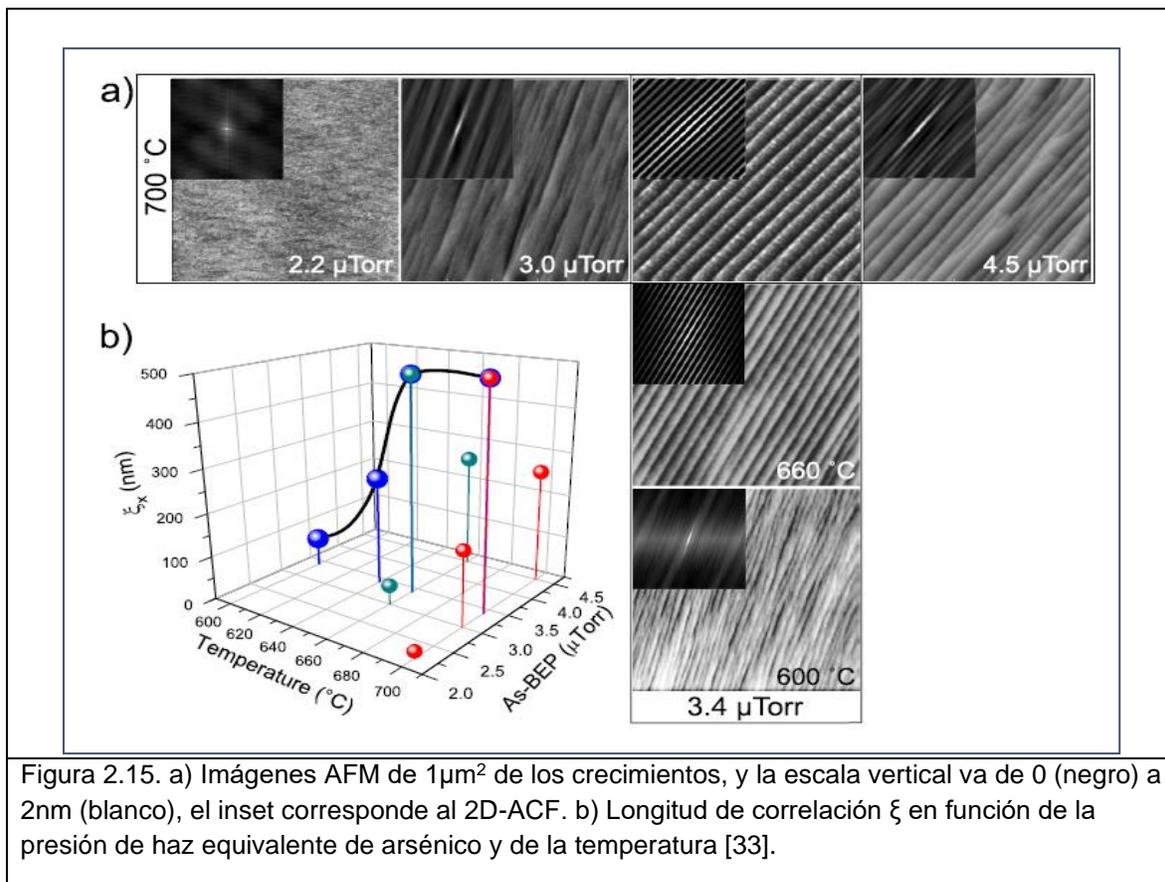


Figura 2.15. a) Imágenes AFM de $1\mu\text{m}^2$ de los crecimientos, y la escala vertical va de 0 (negro) a 2nm (blanco), el inset corresponde al 2D-ACF. b) Longitud de correlación ξ en función de la presión de haz equivalente de arsénico y de la temperatura [33].

Estos crecimientos homoepitaxiales de GaAs sirvieron como guía en relación a los parámetros experimentales para la fabricación de la muestra de esta tesis sin embargo en nuestro caso se trata de un crecimiento heteroepitaxial para provocar el confinamiento cuántico GaAs/ AlGaAs con un dopaje delta de silicio, el diseño se muestra a detalle en el capítulo 4.

2.7.2 Modelo de potencial efectivo de Yukawa

Varios estudios teóricos han sido realizados con el fin de explorar el cristal de Wigner en sistemas de confinamiento cuántico, el modelo de potencial efectivo [34] tiene la particularidad de tratar con el problema físico de muchos cuerpos con un coste computacional menor comparado con el enfoque Hartree-Fock y el funcional de densidad.

De acuerdo con [34] se resuelve la ecuación de Schrödinger que tiene acoplado el potencial de Yukawa " V_y ", el cual está dado por:

$$V_Y = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\exp[-kr]}{r}$$

Donde r es la distancia de separación electrón-electrón, e es la carga del electrón, ϵ es la constante dieléctrica del hilo cuántico, ϵ_0 es la permitividad del vacío y k es el parámetro de apantallamiento dado por:

$$k = \sqrt{\frac{2e^2n}{\epsilon\epsilon_0k_B T}}$$

Donde n es la densidad electrónica, K_B la constante de Boltzmann y T la temperatura. El parámetro de apantallamiento es el que contiene la información de las densidades electrónicas, que pueden ser del orden de dopajes que se utilizan experimentalmente (10^{22} cm^{-3}) lo cual es una de las principales ventajas de este modelo. La figura 2.16 muestra los resultados que se obtuvieron en [34] utilizando el potencial efectivo. En tal referencia, llegaron a la conclusión de que la formación del cristal de Wigner depende fuertemente de la dimensionalidad de la estructura y de la concentración electrónica. En la imagen se determina el cristal de Wigner a partir de que en la distribución electrónica se identifiquen perfectamente los dos picos, como es el caso del inciso (c) para k_D y k_C .

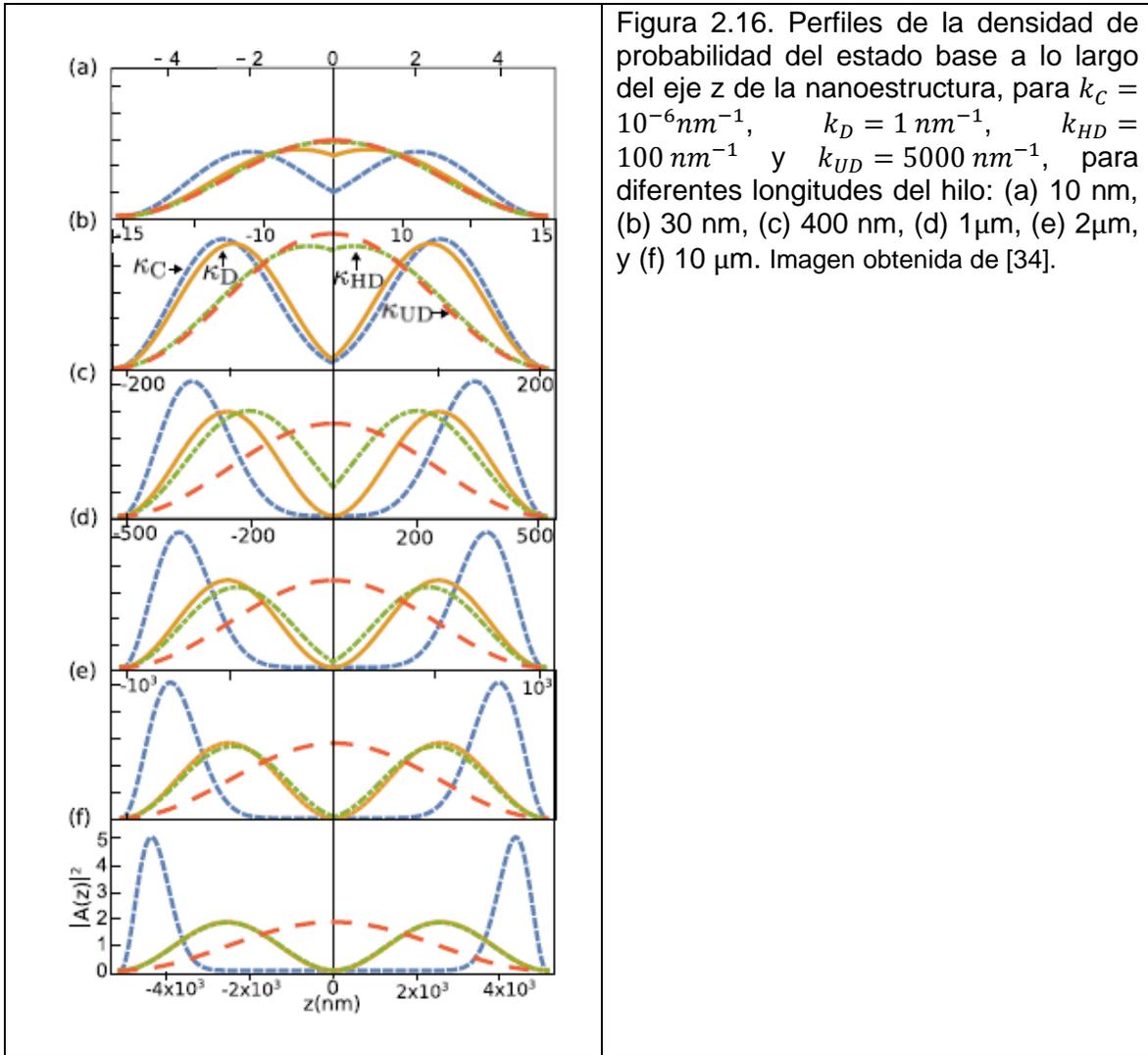


Figura 2.16. Perfiles de la densidad de probabilidad del estado base a lo largo del eje z de la nanoestructura, para $k_C = 10^{-6} \text{ nm}^{-1}$, $k_D = 1 \text{ nm}^{-1}$, $k_{HD} = 100 \text{ nm}^{-1}$ y $k_{UD} = 5000 \text{ nm}^{-1}$, para diferentes longitudes del hilo: (a) 10 nm, (b) 30 nm, (c) 400 nm, (d) 1 μm , (e) 2 μm , y (f) 10 μm . Imagen obtenida de [34].

En el siguiente capítulo describiremos las técnicas experimentales llevadas a cabo en el desarrollo de este trabajo de tesis.

Referencias

- [1] Chang, R. (2010). *Química*. México DF, México: McGraw hill/interamericana editores.
- [2] Ning C. Z., Dou L., y Yang, P. (2017). Bandgap engineering in semiconductor alloy nanomaterials with widely tunable compositions. *nature reviews materials*. 2(12),17070.
- [3] Adachi, S. (2005). *Properties of Group-IV, III–V and II–VI Semiconductors*. Chichester, Inglaterra: John Wiley & Sons Ltd.
- [4] http://depa.fquim.unam.mx/amyd/archivero/condsemicondais2_27505.pdf
- [5] Henini, M., (2013), *Molecular beam epitaxy: from research to mass production*, Waltham, USA: Elsevier Inc.
- [6] Shchukin, V.A., Ledentsov N.N. y Bimberg, D. (2004), *Epitaxy of nanostructures*, New York, USA: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [7] Herman, M., Richter, W., y Sitter, H. (2004), *Epitaxy: physical principles and technical implementation*, New York, USA: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [8] Albella, J., (2003), *Láminas delgadas y recubrimientos. Preparación, propiedades y aplicaciones*, Madrid, España: Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
- [9] Pina, C., (2014), Los fundamentos de la Cristalografía: una reseña histórica. *An.Quim.* 110(4). 294-302 páginas.
- [10] Bauer, E., (1958). Phänomenologische Theorie der Kristallabscheidung an Oberflächen. *Z. Kristallographie*.110.
- [11] Venables, J. A., Spiller, G. D. T. y Hanbucken, M. (1984). Nucleation and growth of thin films. *Rep. Prog. Phys.*, 47(4).
- [12] Herring, C. (1951). Some Theorems on the Free Energies of Crystal Surfaces. *Physical Review*. 82(1).
- [13] Jeong, H.C., Williams, E.D. (1999). Steps on surfaces: experiment and theory. *Surface Science Reports*. 34. 184-194 páginas.
- [14] Marchenko, V. I. (1981). Theory of the equilibrium shape of crystals. *Sov. Phys.* 54(3). 605-607 páginas.
- [15] Notzel, R., Ledentsov, N. N., Doweritz, L. y Ploog, K. (1992). Semiconductor quantum-wire structures directly grown on high-index surfaces. *Physical Review B*. 45(7).

- [16] Méndez, R., López, M., Méndez, V. H., Valdez, D., Ortega, E., Benitez, A., Ponce, A. y Cruz, E. (2017). Nanowire Y-junction formation during self-faceting on high-index GaAs substrates. *RSC Adv.* 7(29).
- [17] Zuo, J.K., Warmack, R.J., Zehner, D.M. y Wendelken, J.F. (1993). Periodic faceting on TaC(110): Observations using high-resolution low-energy electron diffraction and scanning tunneling microscopy. *Phys. Rev. B.* 47(16).
- [18] E. Wigner. (1934). On the interaction of electrons in metals. *Phys. Rev.*, 46(11).
- [19] B. Tanatar and D. M. Ceperley. (1989). Ground state of the two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 39(8).
- [20] Drummond, N.D.; Needs, R.D. (2005). Hybrid Phase at the Quantum Melting of the Wigner Crystal. *Phys. Rev. Lett.* 94 (046801).
- [21] R. Egger, W. Häusler, C. H. Mak, and H. Grabert. (1999). Crossover from Fermi liquid to Wigner molecule behavior in quantum dots. *Phys. Rev. Lett.*, 82.
- [22] J. S. Meyer and K. A. Matveev. (2009). Wigner crystal physics in quantum wires. *J. Phys.: Condens. Matter*, 21 (023203).
- [23] Yu. P. Monarkha and V. E. Syvokon. (2012). A two-dimensional Wigner crystal (Review Article). *Low Temp. Phys.* 38 (1067).
- [24] Ziani, N.T.; Cavaliere, F.; Becerra, K.G.; Sasseti, M. (2021) A Short Review on One Dimensional Wigner Crystallization. *Crystals*, 11(20).
- [25] C. C. Grimes and G. Adams. (1979) Evidence for a liquid-to-crystal phase transition in a classical, two-dimensional sheet of electrons. *Phys. Rev. Lett.*, 42.
- [26] E. Y. Andrei, G. Deville, D. C. Glattli, F. I. B. Williams, E. Paris y B. Etienne. (1988). Observation of a Magnetically Induced Wigner Solid. *Phys. Rev. Lett.*, 60.
- [27] B. A. Piot, Z. Jiang, C. R. Dean, L. W. Engel, G. Gervais, L. N. Pfeiffer y K. W. West. (2008). Wigner crystallization in a quasi-three-dimensional electronic system. *Nat. Phys.*, 4.
- [28] C. Ellenberger, T. Ihn, C. Yannouleas, U. Landman, K. Ensslin, D. Driscoll y A. C. Gossard. (2006). Excitation Spectrum of Two Correlated Electrons in a Lateral Quantum Dot with Negligible Zeeman Splitting. *Phys. Rev. Lett.*, 96(12).
- [29] L. H. Kristinsdóttir, J. C. Cremon, H. A. Nilsson, H. Q. Xu, L. Samuelson, H. Linke, A. Wacker y S. M. Reimann. (2011). Signatures of Wigner localization in epitaxially grown nanowires. *Phys. Rev. B*, 83(4).
- [30] Zhukov et al. (2014). Investigations of Local Electronic Transport in InAs Nanowires by Scanning Gate Microscopy at Liquid Helium Temperatures. *JETP Letters*, 100(1).
- [31] www.comsol.com

Capítulo 2

[32] M. Tabatabaian. (2014). COMSOL for Engineers. Virginia, USA. Mercury Learning and Information.

[33] E. Cruz-H, et al. (2012). "Highly ordered self-assembled nanoscale periodic faceting in GaAs(631) homoepitaxial growth". *Appl. Phys.* 101(7).

[34] Reyna méndez-camacho et al. (2017). Wigner crystallization in quantum wires within the Yukawa approximation. *Physical review b*, 95(8).

Capítulo 3. Técnicas experimentales

En este capítulo abordaremos las técnicas utilizadas para el desarrollo de esta tesis, explicaremos el fundamento físico y el arreglo experimental de cada técnica, desde el sistema MBE para la síntesis de los hilos cuánticos hasta las técnicas de espectroscopia, fotoluminiscencia y fotorreflectancia; también describiremos la técnica de microscopia de fuerza atómica para determinar la morfología superficial de la muestra. Este capítulo está dividido en cuatro secciones.

3.1. Sistema MBE

3.2. Microscopia de fuerza atómica

3.3. Fotoluminiscencia

3.4. Fotorreflectancia

3.1. Sistema MBE

La técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE, del inglés: molecular beam epitaxy) fue desarrollada por J. R. Arthur and A. Y. Cho [1,2] para el crecimiento de estructuras de GaAs y GaAs/Al_xGa_{1-x}As, actualmente se utiliza para el crecimiento de diferentes compuestos. Esta técnica consiste en la interacción de flujos de haces moleculares con la superficie de un sustrato cristalino, el cual es calentado a varios cientos de grados centígrados provocando la formación de películas o nanoestructuras a partir de crecimiento epitaxial. Una de las ventajas de la técnica MBE es que permite depositar películas con alta precisión, de modo que se pueden producir interfaces abruptas a nivel atómico entre capas de diferentes compuestos. Para lograr este nivel de control, se utilizan tasas de depósito de alrededor de una monocapa por segundo. Los sistemas de MBE trabajan en condiciones de ultra alto vacío (UAV), del orden de 10^{-11} Torr, que garantiza una longitud del camino libre medio de las moléculas del haz, mayor que la distancia entre la fuente y el sustrato evitando así la colisión entre las moléculas y permitiendo la transferencia de masa [3]. Además, el UAV permite tener acoplado al equipo MBE varias técnicas de caracterización in situ tales como RHEED, XPS, entre otras. Todas estas características permiten obtener por MBE materiales y compuestos con la más alta calidad cristalina y pureza.

El diseño experimental de un sistema MBE varía en función de los materiales a crecer y del propósito, ya sea investigación o producción, a continuación, describiremos un sistema MBE típico de investigación para crecimientos de materiales III-V.

El sistema MBE (véase la figura 3.1 y 3.2) está compuesto por tres cámaras: cámara de introducción, cámara de análisis y cámara de crecimiento. La cámara de introducción permite introducir el sustrato al sistema MBE sin romper el UAV, mediante el traspaso de muestras a la cámara de crecimiento vía una barra de transferencia. Una cámara de análisis es la cámara intermedia, se encuentra entre la cámara de introducción y la de crecimiento, puede estar equipada con técnicas de caracterización in situ tales como: espectroscopia de electrones Auger (AES, del inglés: Auger electron spectroscopy), espectroscopia de fotoemisión de rayos-X (XPS, del inglés: X-ray photoemission spectroscopy), etc. La cámara de crecimiento se compone de celdas que producen los haces moleculares, de obturadores (shutters) que permiten activar y desactivar los haces moleculares, de un soporte de molibdeno para montar el sustrato y que a su vez permite elevar su temperatura. La temperatura de crecimiento es medida a través de un termopar colocado atrás del soporte. Con el fin de mejorar la homogeneidad de los flujos de haz sobre el sustrato, el soporte del sustrato se mantiene en rotación acimutal continua. También en esta cámara es donde se encuentra instalada la técnica de difracción de electrones reflejados de alta energía (RHEED, del inglés: high-energy electron diffraction in reflection), la cual permite monitorear el crecimiento en tiempo real. Dentro de esta cámara también se encuentran criopaneles enfriados con nitrógeno líquido, los cuales se localizan alrededor de las celdas y del soporte del sustrato, y sirven para el aislamiento térmico de las celdas y para atrapar contaminantes tales como CO, CO₂ y H₂O [4].

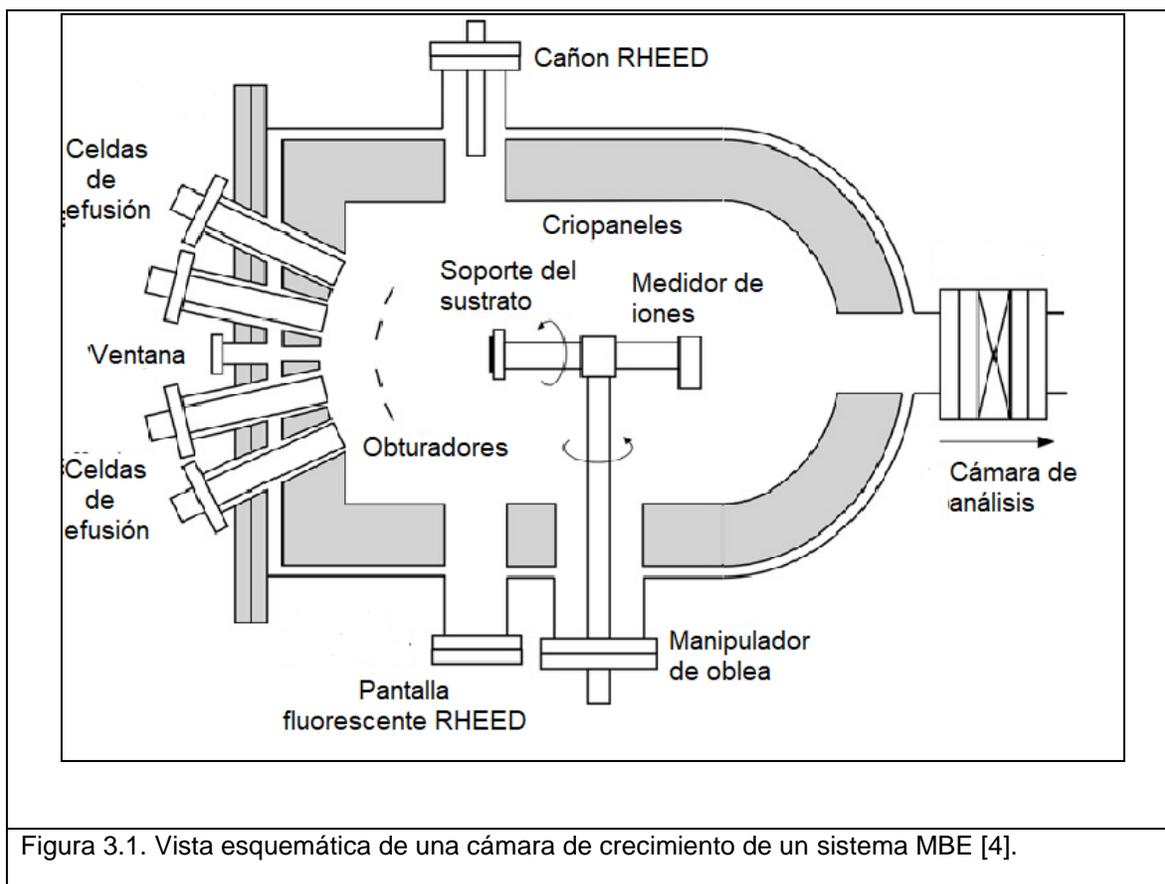
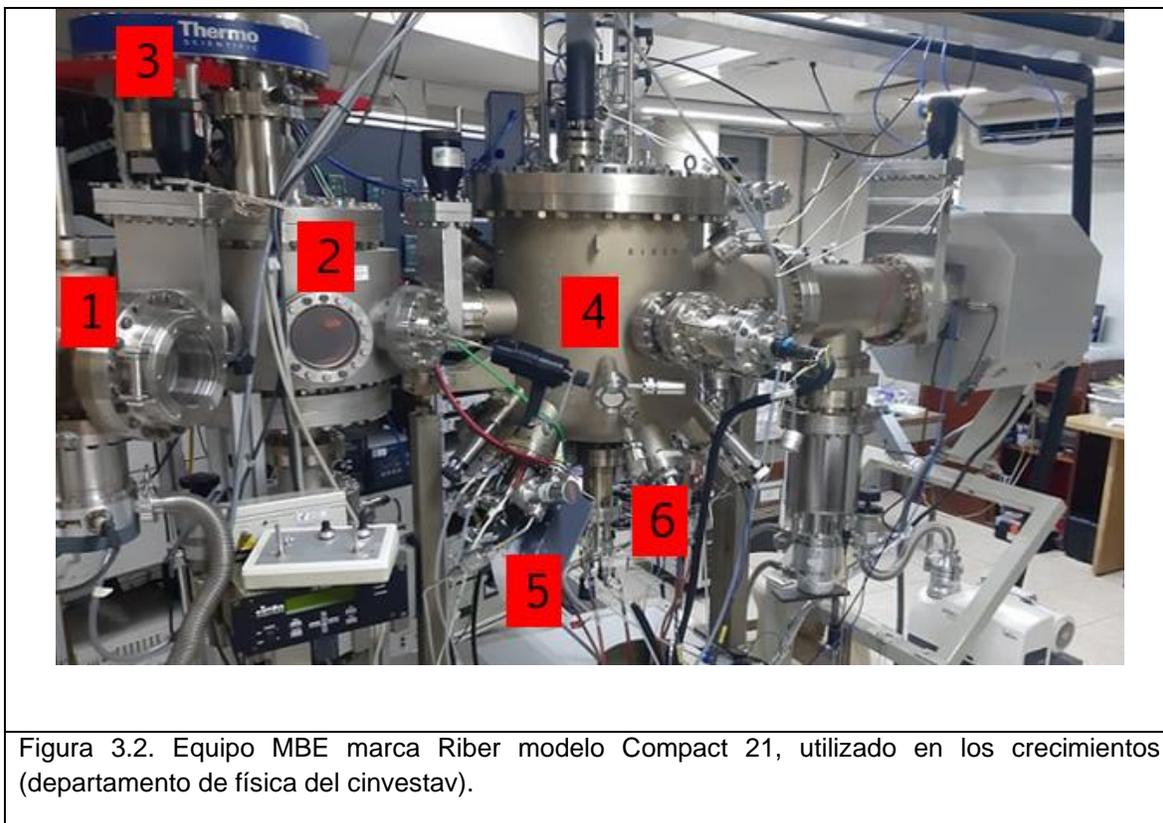


Figura 3.1. Vista esquemática de una cámara de crecimiento de un sistema MBE [4].



- 1** Cámara de introducción
- 2** Cámara de análisis
- 3** XPS
- 4** Cámara de crecimiento
- 5** Cañón RHEED
- 6** Celdas de efusión

Las celdas acopladas al sistema MBE se les conoce como celdas Knudsen y los materiales a depositar ya sea en su estado sólido o como evaporante líquido están contenidos en crisoles, generalmente hechos de nitruro de boro pirolítico de alta pureza. Los crisoles son calentados por radiación mediante filamentos de Tantalio, los cuales a su vez son calentados por efecto Joule. La medición de la temperatura se realiza a través de un termopar en contacto con la base de la celda. La variación de temperatura de las celdas se controla mediante el ordenador y es importante debido a que un cambio en la temperatura modifica el flujo proporcionado por las celdas. Este flujo se expresa en unidades de presión, en específico presión de haz equivalente (BEP, del inglés: Beam-Equivalent Pressure). La medición adecuada de los flujos conlleva a un mayor control de composición y de perfiles de dopaje del crecimiento; el método más usado para la medición de los flujos está basado en un medidor de iones el cual está colocado en la posición de la oblea [4].

En algunos casos, las celdas pueden ser del tipo cracker, la cual contiene un área a mayor temperatura que disocia molecularmente al material (proceso químico importante para cuando se desea depositar arsénico o fósforo), donde los tetrámeros evaporados se convierten parcialmente en dímeros. Este proceso se logra mediante interacciones de tetrámeros con la superficie de la celda cracker mantenida a varios cientos de grados centígrados. La temperatura de la zona de disociación determina las cantidades relativas de As_4 y As_2 suministradas a la superficie de crecimiento. Las primeras investigaciones de MBE en sistemas III-V revelaron que a temperaturas de sustrato relativamente bajas, todos los átomos de un elemento del grupo III tienen un coeficiente de adherencia de la unidad a la superficie del sustrato. También se ha encontrado que los átomos o moléculas del grupo V no se adhieren a la superficie en ausencia de un flujo de átomos del grupo III, por lo tanto, la tasa de crecimiento se rige completamente por la tasa de llegada de los átomos del grupo III en la superficie del sustrato y el exceso de átomos del grupo V se desorben de la superficie. En contraste con los elementos del grupo III que llegan a la superficie en forma de átomos, los elementos del grupo V pueden alcanzar la superficie en forma de varios tipos de moléculas. Por ejemplo, en el caso del crecimiento por MBE de GaAs, el arsénico puede llegar a la superficie en forma de tetrameros As_4 si la fuente del haz es arsénico metálico, en forma de moléculas diméricas As_2 si la fuente es GaAs cristalino o, si se utiliza una celda cracker de As_4 , o en forma de átomos de As si la fuente es arsina AsH_3 [5].

La cinética superficial que ocurre con las moléculas diméricas y con los tetrámeros de arsénico se muestra en la figura 3.3. El As_2 adsorbido al principio migra sobre la superficie de GaAs (100) en un estado precursor fisisorbido débilmente unido; si la temperatura del sustrato es superior a 300 °C, los dímeros pueden disociarse (figura 3.3, panel izquierdo) y los átomos de As resultantes pueden (i) incorporarse a la fase sólida mediante la unión con átomos de Ga adsorbidos en la superficie o (ii) desorción como dímeros o tetrámeros.

Para el caso de As_4 y Ga en superficies de GaAs (100) (figura 3.3, panel derecho) los tetrámeros adsorbidos experimentan un proceso más complejo que el descrito para As_2 . De hecho, las moléculas de As_4 son fisisorbidas en la superficie en estados precursores móviles que migran a la superficie con una energía de activación de aproximadamente 0,25 eV. Cuando dos tetrámeros de As_4 encuentran cuatro átomos de Ga libres en

configuraciones de superficie adecuadas, experimentan una interacción de segundo orden por pares; como consecuencia, cuatro átomos de As se incorporan a la fase sólida y los cuatro restantes se desorben como una molécula de As_4 [4].

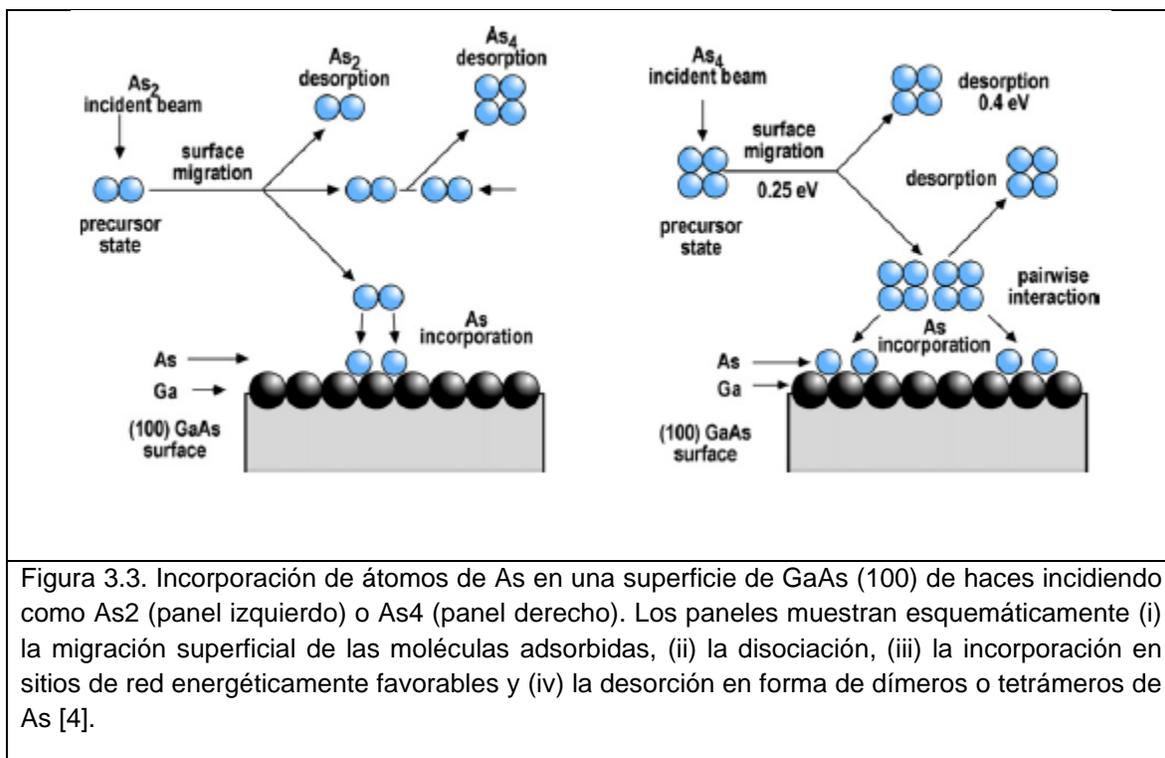


Figura 3.3. Incorporación de átomos de As en una superficie de GaAs (100) de haces incidiendo como As_2 (panel izquierdo) o As_4 (panel derecho). Los paneles muestran esquemáticamente (i) la migración superficial de las moléculas adsorbidas, (ii) la disociación, (iii) la incorporación en sitios de red energéticamente favorables y (iv) la desorción en forma de dímeros o tetrámeros de As [4].

3.2. Microscopía de fuerza atómica

El microscopio de fuerza atómica (AFM, del inglés: Atomic Force Microscope) fue inventado por IBM en 1982. AFM es una técnica de caracterización que nos permite obtener información topográfica de la muestra y se basa principalmente en la interacción de una punta con la superficie de la muestra que puede ser conductora o aislante. Las imágenes AFM se obtienen básicamente de la medición de la fuerza generada entre la punta creada por la proximidad a la superficie de la muestra. Más específicamente, durante un barrido de la superficie la fuerza que actúa entre la micropalanca y la superficie de la muestra causa diminutas desviaciones en la micropalanca que se detectan mediante un sistema óptico, el cual está compuesto por un haz de luz láser que es reflejado desde la punta de la micropalanca hacia un fotodiodo que detecta el movimiento de la punta. La lectura de salida del fotodiodo controla la fuerza que se aplica en la punta de tal manera que esta permanezca constante. Lo anterior se logra a partir de un escáner (movimiento en la dirección x, y, z) piezoeléctrico acoplado a la muestra que causa el movimiento hacia arriba y hacia abajo para mantener constante la fuerza entre la punta y la muestra, proporcionando la información topográfica de la superficie [6].

Esta fuerza punta-muestra tiene contribuciones de largo y corto alcance (véase la figura 3.4). Podemos clasificar las contribuciones por su alcance y fuerza. En el vacío, existen

fuerzas químicas de corto alcance (fracciones de nm) y fuerzas de van der Waals, electrostáticas y magnéticas con un largo alcance (hasta 100 nm). En condiciones ambientales, las fuerzas de menisco formadas por las capas de adhesión en la punta y la muestra (agua o hidrocarburos) también pueden estar presentes [7].

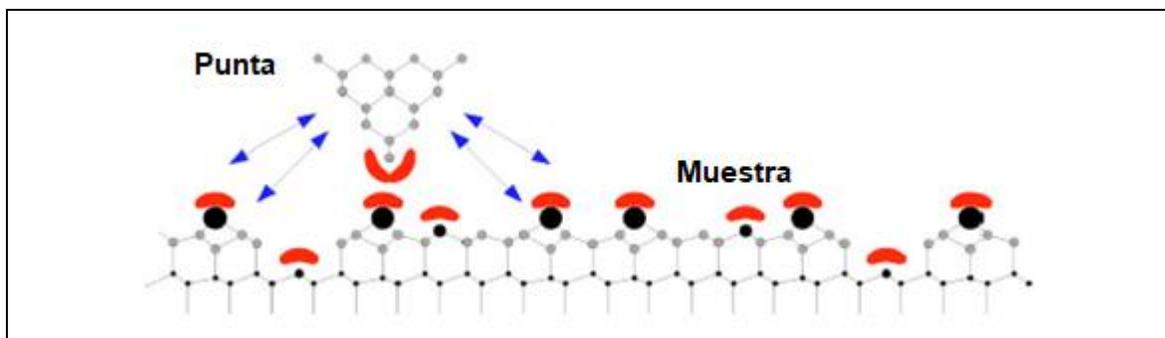


Figura 3.4. Vista esquemática de una punta AFM cerca de una muestra. Las fuerzas químicas de corto alcance actúan cuando la punta y los orbitales de la muestra (medias lunas) se superponen. Las fuerzas de largo alcance (indicadas con flechas) se originan en todo el volumen y la superficie de la punta y son una función crítica de la forma mesoscópica de la punta [7].

La figura 3.5 muestra el diseño típico de un equipo de AFM el cual consta de tres partes principales:

- Sonda del microscopio, que corresponde a la micro-palanca, en cuyo extremo se fija una punta que experimentará fuerzas de interacción.
- Escáner, que consiste en un desplazador XYZ, el movimiento en Z sirve para realizar la aproximación de la punta a la superficie y el XY para realizar el barrido sobre la superficie.
- Electrónica de control e interfaz con el ordenador.

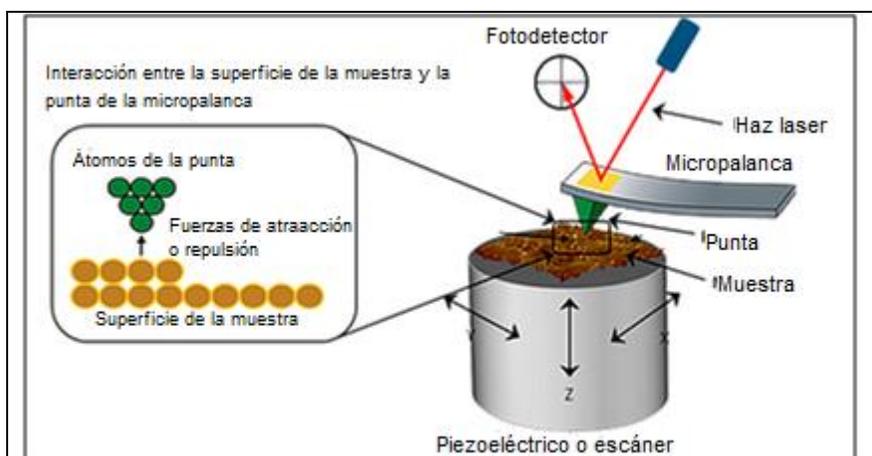
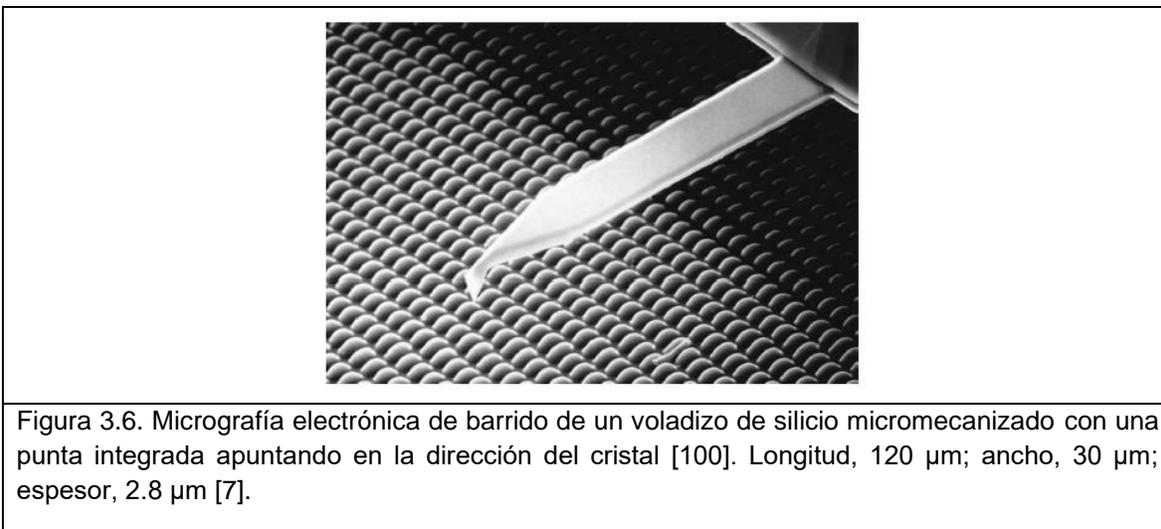


Figura 3.5. Diseño característico de un microscopio de fuerza atómica [8].

La siguiente figura 3.6 muestra una micro-palanca típica con la punta integrada que se utiliza en el microscopio de fuerza atómica.



A continuación, se describen los modos de operación de un equipo AFM;

Modo contacto: En este caso, la punta mantiene un contacto constante con la superficie de la muestra. El inconveniente de este modo es que durante el proceso de escaneo las muestras pueden atrapar cargas electrostáticas, las cuales pueden incrementar la fuerza de atracción entre la punta y la muestra. Esto puede ocasionar fuerzas de fricción adicionales a medida que la punta se desplaza sobre la muestra, lo cual achata la punta y daña la muestra. Este problema se puede evitar utilizando el modo dinámico también conocido como tapping [6].

Modo dinámico: En este modo el contacto es intermitente, de manera que se hace oscilar a la micropalanca a partir de una fuerza externa constante. El modo dinámico tiene dos métodos de operación: modulación de amplitud (AM) y modulación de frecuencia (FM). En AM se mantiene constante la amplitud y la frecuencia en tanto la punta no toque la muestra, cuando la punta se acerca a la muestra, las interacciones elásticas e inelásticas causan un cambio tanto en la amplitud como en la fase de la micropalanca. Estos cambios se utilizan como la señal de retroalimentación y por lo tanto generan la información topográfica de la superficie. En FM los cambios en la frecuencia de oscilación proporcionan información sobre las interacciones entre la punta y la muestra, la frecuencia se puede medir con una sensibilidad muy alta y, por lo tanto, el modo de modulación de frecuencia permite el uso de micropalancas muy rígidas. Las micropalancas rígidas proporcionan estabilidad muy cerca de la superficie [7].

Modo no-contacto: En este caso la punta está suspendida a unos cuantos nanómetros por encima de la superficie de la muestra, de igual manera se hace oscilar a la micropalanca para detectar los cambios en la amplitud debido a las fuerzas de Van der Waals, para mantener constante la amplitud de oscilación el escáner piezoeléctrico ajusta la distancia

de la punta a la superficie de la muestra en cada conjunto de datos (x,y) generando así la información topográfica de la superficie [6][7].

Durante el desarrollo de este trabajo se ha utilizado un equipo AFM modelo multimode 8-HR utilizando el modo dinámico. Además, ha sido empleado el software de libre acceso Gwyddion para procesar y analizar la imagen mostrada en este trabajo de tesis. Una vez obtenida la imagen AFM de la muestra, se pueden obtener parámetros cuantitativos como la rugosidad superficial (rugosidad cuadrática media y la rugosidad promedio), la longitud de correlación además se pueden obtener perfiles topográficos de la superficie.

3.3. Fotoluminiscencia

La técnica espectroscopia de fotoluminiscencia es un método de no-contacto, no destructivo que permite sondear la estructura electrónica de la muestra, consiste en excitar la muestra haciendo incidir energía mediante una fuente luminosa, normalmente un láser, provocando la absorción fotónica, teniendo en cuenta que la excitación se realiza a energías superiores a los niveles presentes en la muestra. A continuación, se describe más a detalle este mecanismo para un semiconductor intrínseco, consta de los siguientes tres procesos físicos principales (figura 3.7) [9]:

1. Excitación: un fotón externo con energía $\hbar\omega'$, que normalmente es mayor que la banda prohibida de energía del semiconductor entra en él para excitar un electrón para que transite desde su estado de banda de valencia inicialmente ocupado a un estado de banda de conducción vacío, formando un par electrón-hueco.
2. Relajación energética: el electrón fotogenerado y el hueco del proceso de excitación se encuentran en general en estados excitados en las bandas de conducción y de valencia. Pasan por varios procesos de relajación de energía, como interacciones electrón-fonón, para relajarse a sus respectivos estados fundamentales, es decir, los estados de borde de la banda de conducción y de valencia.
3. Recombinación radiativa: el electrón y el hueco relajados energéticamente se recombinan, es decir, el electrón en el estado de borde de banda de conducción pasa al estado de borde de banda de valencia vacío, emitiendo radiativamente un fotón con una energía $\hbar\omega$.

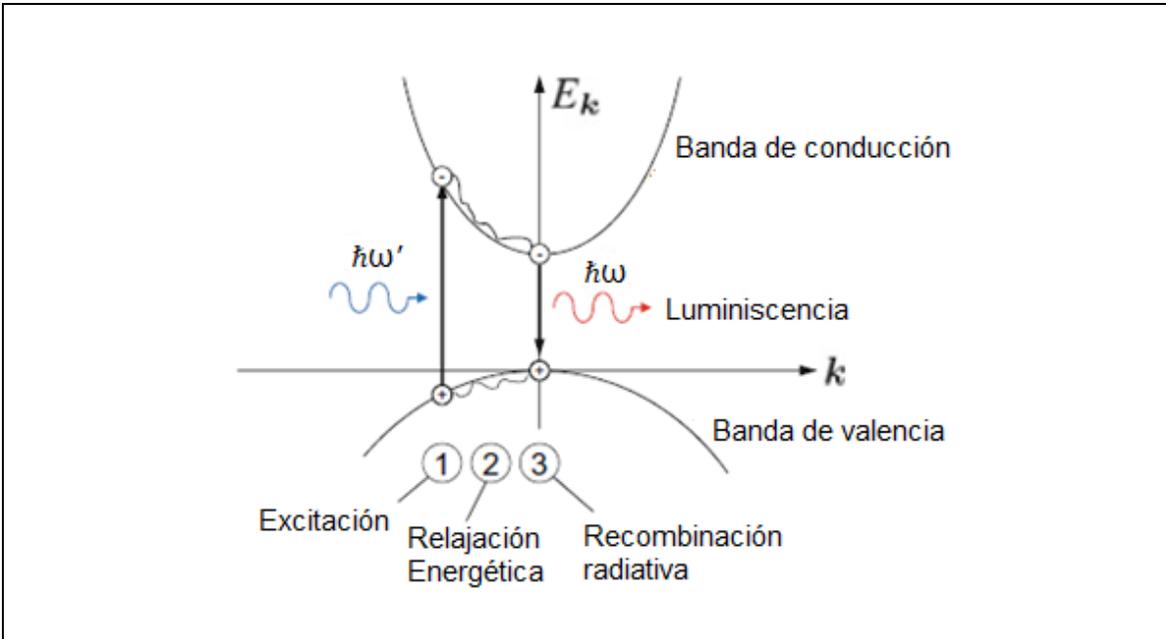


Figura 3.7. Esquema del proceso de fotoluminiscencia en un semiconductor intrínseco. Un fotón de sondeo $\hbar\omega'$ incide en la muestra para fotoexcitar un electrón para que transite desde un estado de banda de valencia a un estado de banda de conducción (proceso 1); El electrón excitado y el hueco se relajan a sus respectivos estados fundamentales, (proceso 2); el electrón y el hueco relajados energéticamente se recombinan radiativamente para emitir un fotón $\hbar\omega$ (luminiscencia, también llamada fluorescencia) [9].

Hay que tener en cuenta que la información obtenida en este tipo de medida procede de una profundidad de aproximadamente la longitud de absorción de la luz de excitación, puesto que únicamente en esta zona se generan pares electrón-hueco. La profundidad de penetración del láser es $\approx 1/\alpha$ donde " α (m^{-1})" es el coeficiente de absorción que varía de acuerdo con la longitud de onda del láser empleado y dependiendo del material en el que este incidiendo.

La siguiente figura 3.8 muestra el montaje experimental típico para la medición de fotoluminiscencia. Para realizar mediciones en función de la temperatura la muestra se coloca en un criostato también conocido como dedo frío conectado a una bomba de vacío, con el que se puede bajar la temperatura hasta casi los 10 °K. Frente al láser se encuentra una lente que permite focalizar el haz sobre la muestra. De igual manera la emisión radiada por la muestra se focaliza por medio de lentes además con el fin de hacer incidir sobre el detector un haz monocromático y evitar la incidencia de longitudes de onda provenientes del plasma del láser, se coloca un filtro correspondiente a esta longitud de onda en la entrada del monocromador. Dicho aparato dispersa la luz en las longitudes de onda que la componen y selecciona una banda estrecha de longitudes de onda que es la que llega al dispositivo de carga acoplada (CCD, Charge Coupled Device) para ser registrada y este se conecta a una computadora que controla todo el sistema.

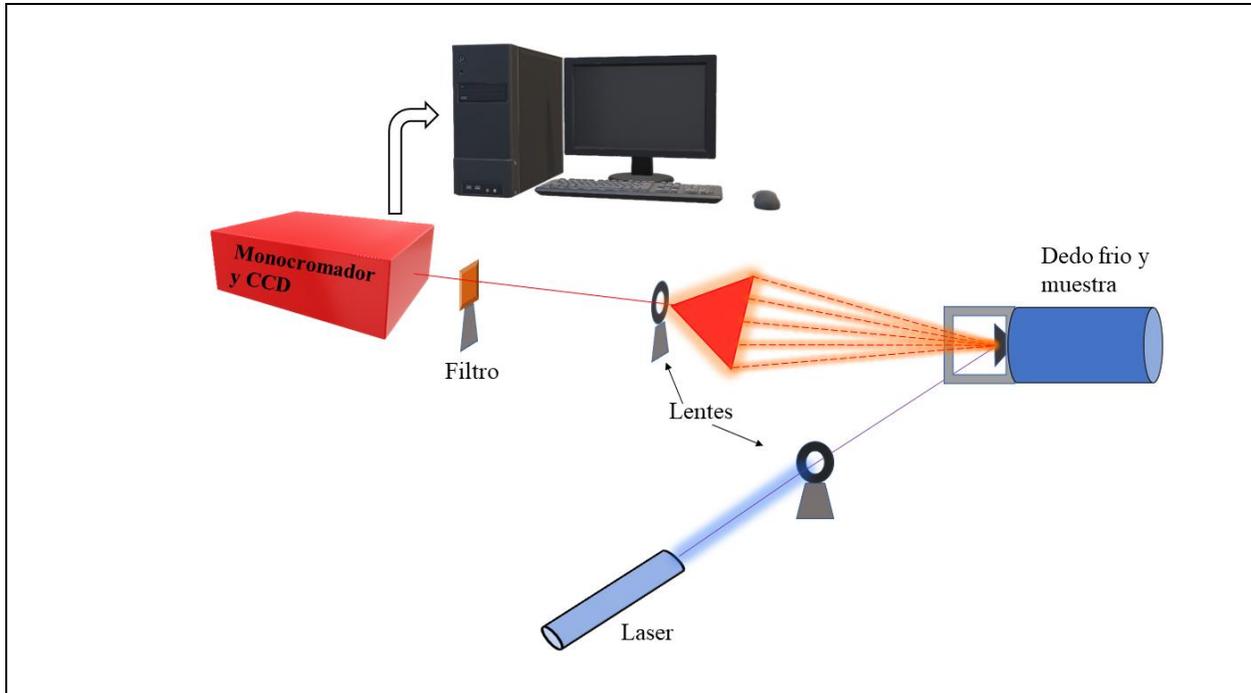


Figura 3.8. Arreglo experimental para fotoluminiscencia.

3.4 Fotorreflectancia

La técnica de espectroscopia de fotorreflectancia (PR), es una técnica de modulación, en la cual se generan pares electrón-hueco por medio de los fotones (laser interrumpido mecánicamente como fuente de modulación), cambiando los campos eléctricos internos los cuales se detectan por el cambio de los coeficientes de reflectividad. Consideremos la figura 3.9 para explicar el mecanismo físico que se lleva a cabo en esta técnica.

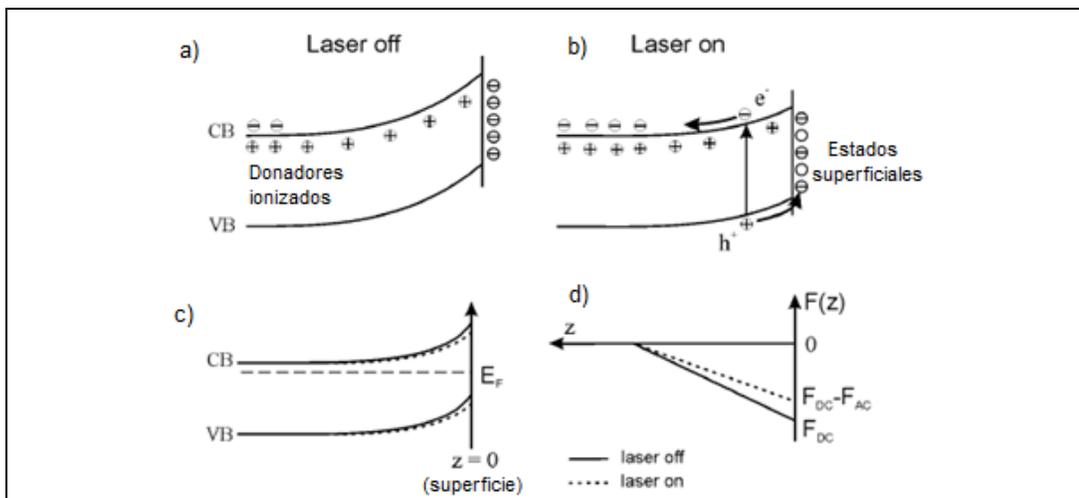


Figura 3.9. Representación esquemática del efecto fotorreflectancia para un semiconductor tipo n [10].

La superficie de un cristal semiconductor es inestable debido a sus enlaces libres, esto provoca una reconstrucción superficial del material que conlleva a no tener un cristal perfecto (discontinuidad en la estructura cristalina del sólido) y a tener estados energéticos dentro del bandgap (estados trampa) estos estados superficiales ocupados por electrones del interior del cristal crean una barrera de potencial, esto hace que las bandas de conducción y de valencia se curven cerca de la superficie. La presencia de una alta densidad de estados superficiales hace que se modifique el nivel de Fermi para mantenerlo constante en la interfase semiconductor –aire, acercándolo a energías mayores (para tipo n) y a energías menores (tipo p). fig. 3.9 (a), cuando se hace incidir el haz laser hacia el material con una energía fotónica mayor que el bandgap se crean pares electrón-hueco los cuales son separados por el campo eléctrico incorporado F_{DC} (este campo se genera debido a la región de agotamiento formada por los estados trampa), con los portadores minoritarios (huecos en este caso) dirigidos hacia la superficie y los electrones hacia la región de agotamiento, esto se manifiesta en una disminución en la ocupación de los estados superficiales provocando una reducción en la barrera de potencial y en el campo eléctrico incorporado, $F_{DC} - F_{AC}$, donde F_{AC} es el cambio en el campo eléctrico incorporado. Fig. 3.9(b) y 3.9(d) [10, 11]. De acuerdo con [12] entre más ancha sea la región de agotamiento el campo eléctrico es menor. En la fig.3.9. (c) se observa que, si el láser esta encendido la población de los estados superficiales es reducida, disminuyendo el doblamiento de las bandas.

Como ya se mencionó el campo eléctrico disminuye debido a la excitación lumínica y aumenta cuando el láser se apaga, es decir cuando el “chopper” bloquea el haz, esto se traduce en cambios en el coeficiente de reflectividad los cuales son medidos de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{R_{off} - R_{on}}{R_{off}}$$

Donde R_{on} y R_{off} son los coeficientes de reflectividad cuando el láser esta encendido y apagado respectivamente.

El arreglo experimental típico se muestra en la figura 3.10, dentro de las ventajas que tiene esta técnica, es que no requiere de aislar la muestra, es decir, se puede medir a temperatura ambiente y sin necesidad de vacío.

El funcionamiento inicia a partir de una lámpara que puede ser de filamento de tungsteno. La luz proveniente de la lámpara entra a un monocromador el cual funciona como un prisma que separa la luz en diferentes longitudes de onda, de allí a través de un arreglo de lentes se hace incidir la luz sobre la muestra. La luz del láser es interrumpida mecánicamente por un obturador mecánico o “Chopper” a una frecuencia generalmente en el rango 130 a 260 Hz y se hace incidir sobre la muestra en el mismo punto que la luz proveniente de la lámpara. La luz reflejada por la muestra es enfocada a un fotodetector que convierte la señal de luz en corriente o voltaje y que está conectado a un amplificador lock-in. La luminiscencia generada por el láser debe eliminarse a la entrada del detector, para ello se usa un filtro. Finalmente, la computadora divide la señal $AC \approx I_0 \Delta R$ por el componente $DC \approx I_0 R$ dando el espectro de fotorreflectancia $\Delta R/R$.

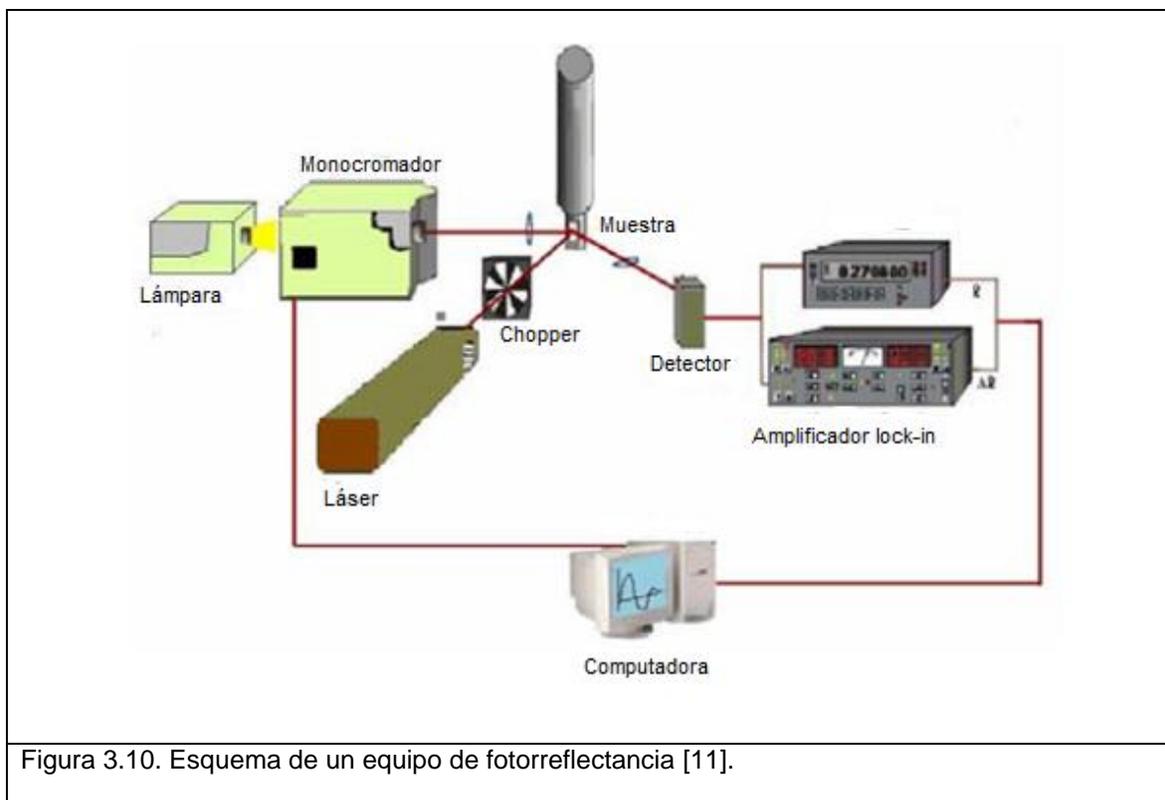


Figura 3.10. Esquema de un equipo de fotorreflectancia [11].

Referencias

- [1] Arthur, J. R. (1968). Interaction of Ga and As₂ Molecular Beams with GaAs Surfaces. *J. Appl. Phys.* 39(8).
- [2] Cho, A. Y. (1969). Epitaxy by periodic annealing. *Surface Science*, 17(2).
- [3] Farrow, R., (1995), Molecular beam epitaxy: applications to key materials, Park Ridge, USA, Noyes Publications.
- [4] Henini, M., (2013), Molecular beam epitaxy: from research to mass production, Waltham, USA. Elsevier Inc.
- [5] Shchukin, V., Ledentsov, N. y Bimberg, D., (2004), Epitaxy of nanostructures, New York, USA. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [6] Skoog, D.A., Stanley, R. C. y Holler F. J. (2008). *Principios de análisis instrumental*, 6^o ed.; DF, México. Ed. McGraw-Hill.
- [7] Giessibl, F. J. (2003). Advances in atomic force microscopy. *Reviews of Modern Physics*, 75 (3).
- [8] http://www.linan-ipicyt.mx/Microscopio_de_Fuerza_Atomica.html
- [9] Wei Lu, Ying Fu., (2018), Spectroscopy of Semiconductors; Numerical Analysis Bridging Quantum Mechanics and Experiments. Atlanta, USA. Springer Series in Optical Sciences.
- [10] J. Misiewicz et al. (2003). Semiconductor heterostructures and device structures investigated by photoreflectance spectroscopy. *Materials Science*, 21(3).
- [11] Francy Nelly Jiménez g et al. (2008). La técnica de fotorreflectancia para analizar propiedades ópticas y mecánicas de muestras semiconductoras. *Scientia et Technica Año XIV, No 39*. Universidad Tecnológica de Pereira. ISSN 0122-1701.
- [12] H. Shen and Fred H. Pollak. (1990). Generalized Franz-Keldysh theory of electromodulation. *Physical review B*, 42(11).

Capítulo 3

Capítulo 4.- Condiciones experimentales y Diseño de la interfaz física

En este capítulo se describe el diseño empleado en el crecimiento de la heteroestructura GaAs/AlGaAs con el fin de explicar la importancia de cada parte que conforma la muestra. También se presentan las condiciones experimentales y el proceso del crecimiento llevado a cabo. Además, en la parte teórica se muestra la interfaz física personalizada en COMSOL Multiphysics que se implementó para la simulación del hilo cuántico. Este capítulo está dividido en cuatro secciones.

4.1. Diseño propuesto de la heteroestructura

4.2. Condiciones Experimentales

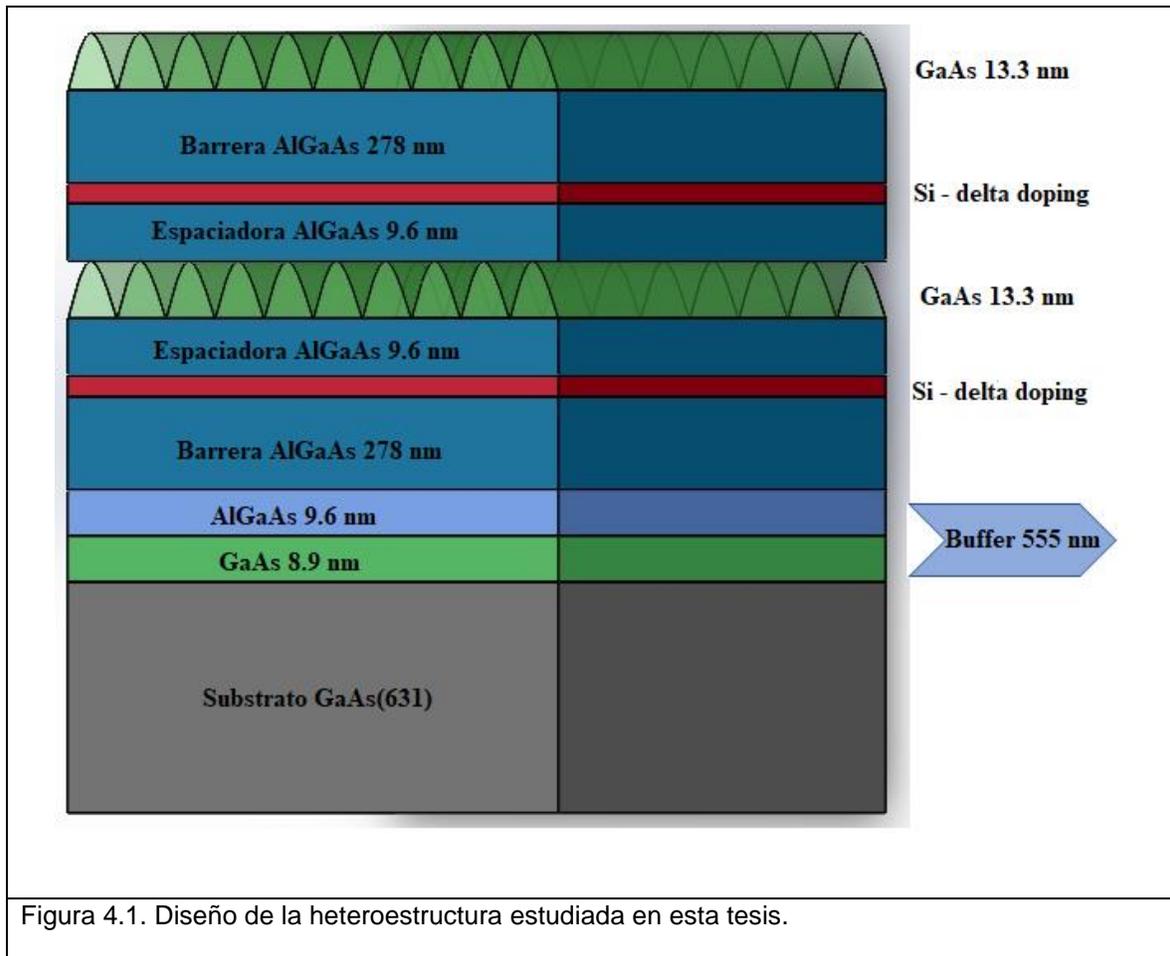
4.3. Proceso del crecimiento

4.4. Interfaz física Schrödinger-Yukawa

4.1. Diseño propuesto de la heteroestructura

Es importante mencionar que en el capítulo 5 se reporta la fracción molar de aluminio presente en la muestra calculada a partir de mediciones de fotoluminiscencia, la cual corresponde a $x = 0.34$. A continuación se muestra en la figura 4.1 el diseño utilizado que se compone de:

- Substrato orientado de alto índice GaAs (631).
- Un buffer compuesto de una súper-red (SL, del inglés: superlattice) de 60 capas alternadas (30 de GaAs y 30 de $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$), la capa o película correspondiente a $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$ fue de 9.6nm de espesor. La película de GaAs fue de 8.9 nm de espesor. En total se crecieron 555 nm de SL.
- Dos barreras de $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$ con espesor de 278 nm.
- Un doble dopaje delta (delta doping) de Silicio.
- Dos capas espaciadoras de $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$ con espesor de 9.6 nm.
- Dos capas de GaAs facetadas con espesor de 13.3 nm.



La idea de proponer este diseño se basa en dos objetivos, el primero, proveer de una estructura adecuada para sintetizar hilos auto-organizados, el segundo objetivo con vista a un trabajo futuro es el tener una muestra con las condiciones necesarias para hacer mediciones eléctricas.

Substrato de GaAs (631). - Como se mencionó en el capítulo 2 la elección de este tipo de sustrato de alto índice se debe a que funciona como una base para la auto-organización de hilos cuánticos debido a la naturaleza del tipo superficie vecinal que presenta (véase la figura 4.2 [1]) además teniendo en cuenta que debido a la inestabilidad energética que presenta este tipo de superficies de alto índice tienden a facetarse para lograr el equilibrio.

Buffer. - Se decidió crecer una capa buffer de 555 nm debido a que en el proceso de crecimiento, la primera etapa que corresponde a la desorción de óxidos de la oblea, cuando finaliza, la superficie cristalina de la oblea a nivel mesoscópico suele quedar dañada así que la capa buffer sirve para la planarización de la superficie, es decir, para tener una interfaz atómicamente abrupta, ya que la calidad superficial es crucial para el crecimiento de capas epitaxiales. Otro efecto favorable que tiene la súper-red AlGaAs-GaAs es que

detiene la migración de las impurezas hacia las partes centrales de interés de la muestra, ya que las impurezas que están presentes en el sustrato tienden a migrar hacia las capas epitaxiales durante el proceso de crecimiento [2].

Barrera de $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$ y delta doping de Si ($\delta\text{-Si}$). - Las barreras de AlGaAs de 278 nm contienen a las estructuras dopadas (dopadas tipo n) mediante las llamadas “delta doping”. Se eligió este tipo de dopaje ya que presenta ventajas en comparación con el dopaje convencional, las cuales son: mayor movilidad, mayor densidad electrónica, menor dispersión por impurezas y una distribución uniforme electrónica. Este tipo de dopaje dobla la banda de conducción de tal manera que forma un pozo de potencial en forma de V [3][4]. Por estas ventajas se eligió el δ -doping además se eligieron dos $\delta\text{-Si}$ dispuestos simétricamente debido a que se tiene una movilidad electrónica más alta que en el caso de un $\delta\text{-Si}$ individual [2][3]. Estas barreras son las encargadas de donar los electrones que se encontraran confinados en el hilo cuántico de GaAs. La elección del silicio como dopante fue debido a su difusividad relativamente baja y su alto grado de activación además de que es uno de los dopantes que más se manejan en semiconductores [2].

Capa espaciadora ($\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$). - Se crecieron dos capas espaciadoras de 9.6 nm de grosor dispuestas simétricamente, la función de esta parte de la heteroestructura es aumentar la separación entre las impurezas ionizadas y la capa activa en donde se realizará la conducción de electrones, en este caso el hilo de GaAs, mejorando así la movilidad de los portadores. Entre menos ancha sea esta capa mayor densidad electrónica habrá en el pozo, ya que un aumento en el grosor de esta capa implica un decaimiento del potencial V. La literatura nos indica que a menor grosor de la capa espaciadora mayor densidad de portadores en el pozo [2][3]. Además, estas capas sirven para provocar el confinamiento cuántico en la capa facetada de GaAs.

Capa de GaAs facetada. – Esta etapa del crecimiento es de las más importantes ya que es donde se llevará a cabo la auto-organización de los hilos cuánticos. Las dos capas de GaAs fueron crecidas cada una con diferentes objetivos. La primera capa fue crecida para tener un pozo de potencial provocado por la unión de esta capa entre dos materiales semiconductores (AlGaAs.- Capas espaciadoras) con bandas prohibidas más grandes y así mismo provocar un confinamiento cuántico. La segunda capa de GaAs se creció con el fin de evitar la oxidación de la barrera de AlGaAs y también para determinar la morfología de la primera capa de GaAs, ya que al tratarse de un crecimiento epitaxial y al utilizar los mismos parámetros de crecimiento, se espera que ambas superficies sean idénticas.

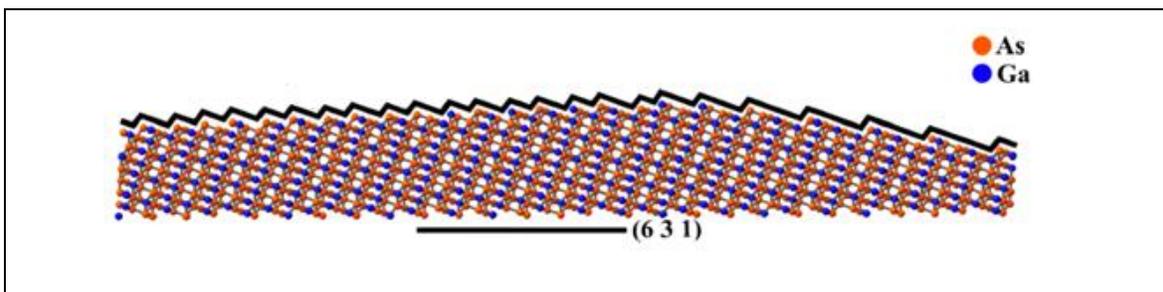


Figura 4.2. Vista lateral de la estructura atómica del plano (631) donde se observan escalones y terrazas [1].

4.2. Condiciones experimentales

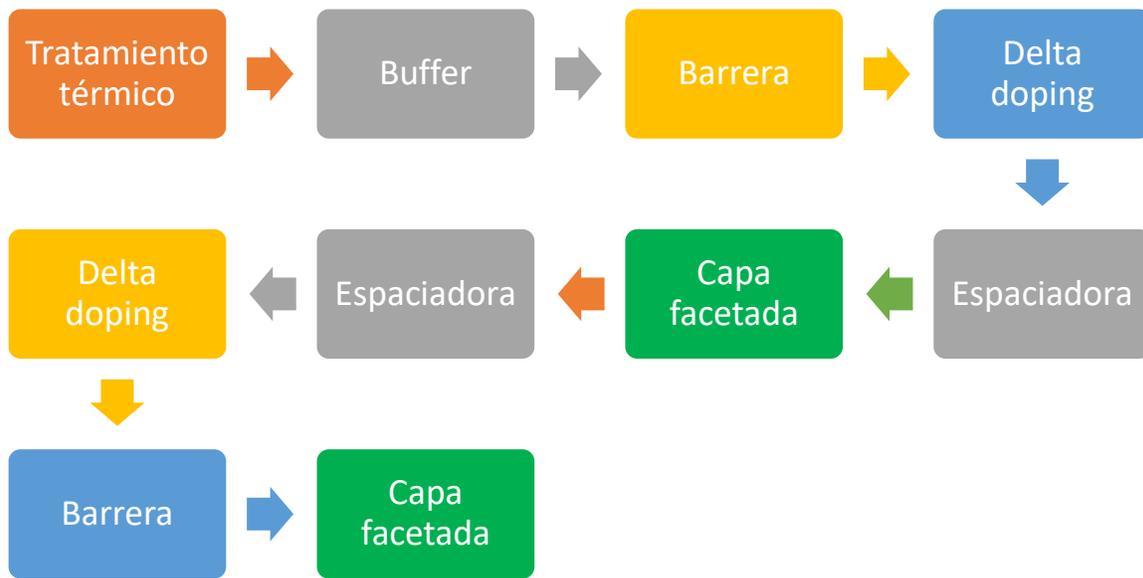
En la tabla 4.1 se muestran los parámetros experimentales utilizados para la síntesis de la muestra, (presión de haz equivalente “BEP, por sus siglas en inglés”, temperaturas de las celdas de efusión de los semiconductores utilizados, entre otros parámetros).

BEP As - T _{celda}	3.23x10 ⁻⁶ Torr – 125°C
BEP Ga - T _{celda}	1.16x10 ⁻⁷ Torr – 900°C
BEP Al - T _{celda}	4.27x10 ⁻⁸ Torr – 1015°C
Temperatura del sustrato	590°C
Temperatura del sustrato para la etapa de la capa de GaAs facetada	690°C
Velocidad de crecimiento GaAs	0.31 $\frac{\mu m}{hr}$
Velocidad de crecimiento AlGaAs	0.48 $\frac{\mu m}{hr}$

La relación V/III es importante tanto en la cinética del crecimiento como en la conversión del tipo de dopaje. Contrario a lo que es comúnmente observado para crecimientos sobre planos singulares, la longitud de migración superficial de moléculas de As₄ sobre planos de alto índice aumenta con un incremento de la tasa de flujo V/III [1,5]. Para el caso de AlGaAs dopado con Silicio en un crecimiento que se lleva a cabo con tasas de flujo V/III altas, los átomos de silicio ocupan los sitios del grupo III actuando como donador (tipo n) debido a que el incremento de la incorporación de As (> BEP As) al crecimiento resulta en una reducción de presencias de vacancias de As, por consiguiente, provoca la aparición de vacancias de Ga [6,7].

4.3. Proceso del crecimiento

En esta sección se da a conocer el procedimiento llevado a cabo durante la síntesis de la muestra, para el crecimiento se utilizó un sustrato epi-ready, este tipo de sustratos tienen superficies preparadas para ser utilizadas directamente en una cámara de crecimiento sin ninguna limpieza adicional. Este tipo de sustratos son obtenidos mediante un conjunto de pasos de limpieza destinados a eliminar la contaminación y crear capas de carbono y óxido que se pueden eliminar mediante un tratamiento in situ en la cámara de crecimiento (tratamiento térmico). El proceso de síntesis inicia llevando a cabo el tratamiento térmico. El siguiente mapa conceptual muestra el proceso resumido y enseguida se da una descripción más detallada.



1. **Tratamiento térmico:** Primero se introdujo el sustrato de GaAs (631) a la cámara de crecimiento, para posteriormente elevar la temperatura del sustrato moderadamente. Cuando la temperatura alcanzó los 480°C se abrió la celda de As ($T_{\text{celda}}= 125^{\circ}\text{C}$) bajo flujo constante ($\text{BEP}= 3.23 \times 10^{-6}$ Torr) debido a que a esta temperatura ocurre la desorción del arsénico, además cada 5 minutos de estar en una cierta temperatura se hacía incidir un haz de galio. Como se mencionó en el capítulo 3: el arsénico no se adhiere a la superficie en ausencia de átomos del grupo III. Cuando la temperatura del sustrato alcanzó los 590°C ocurrió la desorción de los óxidos superficiales (véase la sección de resultados). Se mantuvo esta temperatura durante 14 minutos y enseguida se inició la capa buffer. (véase el anexo).
2. **Buffer:** Enseguida, para formar la súper-red ($T_{\text{sustrato}}= 590^{\circ}\text{C}$) se abrió la celda de Galio por 1 minuto 43 segundos logrando una capa de 8.9 nm de espesor. Acto seguido se abrió la celda de aluminio durante 1 minuto 12 segundos para formar una capa de AlGaAs de 9.6 nm de espesor después se cerró esta celda y se mantuvieron los flujos de arsénico y galio para crecer la siguiente capa de GaAs (1' 43"); de esta manera se crecieron las 60 capas alternadas GaAs/ $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$ (empezando con GaAs y terminando con $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$) hasta tener una súper-red de 555 nm.
3. **Barrera de $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$:** Inmediatamente que se terminó el crecimiento del buffer se continuó con la barrera con un tiempo de crecimiento de 34 minutos 48 segundos, logrando así una capa de 278 nm de espesor.
4. **Delta doping ($\delta\text{-Si}$):** Este tipo de dopaje consiste en el crecimiento de una monocapa de silicio, para lograrlo se interrumpe el crecimiento y solo se mantiene el flujo de arsénico proporcionando así una superficie aniónica estabilizada debido a que el silicio (anión) sustituye en algunos sitios al galio (catión) y la elevada electronegatividad del arsénico logra dar más estabilidad al anión [3]. Para este tipo de perfil de dopaje el tiempo de

interrupción del crecimiento (es decir, el tiempo de depósito del δ -Si) se calcula mediante la siguiente ecuación [3]: $\tau = \frac{N^{2D}}{Nv_g}$

Donde N^{2D} es la densidad bidimensional de dopantes deseada, N es la concentración tridimensional de dopante obtenida a una temperatura específica de la celda de efusión y v_g es la tasa de crecimiento. Sustituyendo los siguientes valores $N^{2D} = 5 \times 10^{12} \text{ e/cm}^2$, de acuerdo con el sistema MBE empleado tenemos que $N = 2.6 \times 10^{18} \text{ e/cm}^3$ con una temperatura de la celda de silicio igual a $T_{\text{celda}} = 1180^\circ\text{C}$, $= 1 \mu\text{m/hr} = 2.7 \times 10^{-8} \text{ cm/seg}$. Con estos datos, se obtiene $\tau = 71$ segundos, el cual fue el tiempo utilizado para la obtención de los dos δ -Si.

5. Capa espaciadora $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$: Al finalizar los 71 segundos se cerró la celda de Si y se abrieron las celdas de Ga y Al durante 1' 12" para formar la capa espaciadora con espesor de 9.6nm.
6. Capa de GaAs facetada: En este punto se aumentó la temperatura del sustrato. Cuando se finalizó el crecimiento de la capa espaciadora se activó una rampa de aumento de temperatura durante 1' 30" únicamente bajo flujo de arsénico (celdas de Al y Ga cerradas). La temperatura del sustrato paso de ser de 590°C a 690°C , acto seguido se abrió la celda de Ga durante 2' 34" para formar una capa de 13.3nm de espesor.
7. Segunda capa espaciadora $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$: Una vez finalizada la capa de GaAs se cerró la celda de Ga e inmediatamente se activó la rampa de descenso de temperatura durante 1' 30", la temperatura del sustrato paso de 690°C a 590°C . Cuando se llegó a 590°C se abrió la celda de Ga y Al durante 1' 12" para crecer la segunda capa espaciadora de 9.6nm de espesor.
8. Segundo δ -Si: Acto seguido de finalizar la capa espaciadora se interrumpió el crecimiento (celdas de Ga y Al cerradas) y se abrió la celda de silicio durante 71 segundos bajo flujo de arsénico constante.
9. Segunda barrera de $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$: Inmediatamente que se terminó el segundo δ -Si se continuo con la barrera con un tiempo de crecimiento de 34' 48", logrando así una capa de 278 nm de espesor.
10. Capa de GaAs facetada superior: Para finalizar el crecimiento se siguió el mismo procedimiento que el punto 6, se activó una rampa de aumento de temperatura durante 1' 30" posteriormente se realizó el crecimiento de GaAs durante 2' 34" y una vez finalizado el crecimiento se activó la rampa de descenso de temperatura de igual manera hasta 590°C únicamente bajo flujo de arsénico.

4.4. Interfaz física Schrödinger-Yukawa

Para desarrollar esta interfaz, como ya se mencionó, se utilizó COMSOL Multiphysics el cual contiene un entorno de programación gráfica en el que se pueden diseñar interfaces físicas personalizadas, esta herramienta se llama constructor de físicas [8] y fue utilizada en este trabajo para implementar la aplicación específica de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo más el potencial de Yukawa.

La ecuación de Schrödinger sirve para el estudio de sistemas cuánticos y es descrita por una ecuación diferencial parcial lineal, ecuación (1), sirve para describir la función de onda en términos de posición y energía, además describe como puede ser influenciada la función de onda por factores externos. La función de onda es compleja, pero toma un sentido físico real cuando se trata con la densidad de probabilidad $|\psi|^2 = \psi^*\psi$, donde ψ^* es el complejo conjugado de ψ .

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \quad (1)$$

Para hacer frente al problema físico de muchos cuerpos (este concepto suele encontrarse en la literatura como many-body) se hace uso del potencial de Yukawa [9], por lo tanto, ahora la ecuación de Schrödinger, denominada ecuación de Schrödinger-Yukawa independiente del tiempo, tiene la siguiente forma, ec. (2):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V_{ef}\Psi = E\Psi \quad (2)$$

Donde $\hbar = h/2\pi$, h es la constante de Planck, ∇ es el operador nabla, m es la masa efectiva del electrón y V_{ef} es el potencial efectivo, que contiene el potencial de Yukawa V_y y el potencial de la interacción electrón-pared V_{e-w} el cual es cero dentro del hilo e infinito fuera de el, así que se tiene $V_{ef} = V_y + V_{e-w}$. El potencial de Yukawa se define de la siguiente manera, ec. (3):

$$V_y = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\exp[-kr]}{r} \quad (3)$$

Donde r es la distancia de separación electrón-electrón, e es la carga del electrón, ϵ es la constante dieléctrica del hilo cuántico, ϵ_0 es la permitividad del vacío y k es el parámetro de apantallamiento dado por (4):

$$k = \sqrt{\frac{2e^2n}{\epsilon\epsilon_0 k_B T}} \quad (4)$$

Con n siendo el dopaje de la muestra o la densidad electrónica, K_B la constante de Boltzmann y T la temperatura.

A continuación, se muestra el tratamiento matemático para expresar la ecuación de Schrödinger-Yukawa en formulación débil (weak form) debido a que la formulación débil es el primer paso hacia la solución aproximada mediante FEM (método de elemento finito). La ecuación (1) se puede definir de la siguiente manera (5):

$$-\nabla \cdot \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \Psi \right) + V_{ef} \Psi - E \Psi = 0 \quad (5)$$

Considerando a $C = \hbar^2/2m$, posteriormente multiplicando la ecuación (5) por u (funciones de prueba) y aplicando una integral sobre el dominio Ω , se tiene (6):

$$\int_{\Omega} -\nabla \cdot (C \nabla \Psi) u \, dx + \int_{\Omega} V_{ef} \Psi u \, dx - \int_{\Omega} E \Psi u \, dx = 0 \quad (6)$$

u representa una clase completa de funciones de prueba donde cada una corresponde a una ecuación. Por supuesto, no podríamos considerar todas las funciones de prueba posibles, ya que esto daría como resultado una cantidad infinita de ecuaciones. En la práctica, necesitamos un número finito de funciones de prueba. Aquí es donde entran en juego los elementos finitos.

Posteriormente se aplicó el teorema de la divergencia de Gauss a la primera integral de la ecuación (6);

$$\int_{\Omega} -\nabla \cdot (C \nabla \Psi) u \, dx = \int_{\Omega} C \nabla \Psi \cdot \nabla u + \int_{\partial \Omega} -C \nabla \Psi \cdot n u$$

Finalmente, la ecuación (6) en su formulación débil queda de la siguiente forma (7):

$$\int_{\Omega} C \nabla \Psi \cdot \nabla u \, dx - \int_{\partial \Omega} C \nabla \Psi \cdot n u \, dx + \int_{\Omega} V_{ef} \Psi u \, dx - \int_{\Omega} E \Psi u \, dx = 0 \quad (7)$$

Con $\partial \Omega$ siendo la frontera del dominio Ω y “ n ” el vector normal orientado fuera del dominio. Teniendo en cuenta que la energía potencial es cero dentro del hilo e infinita fuera de él entonces podemos asumir una condición de frontera en la que hay cero probabilidades para que la partícula se encuentre fuera del dominio/hilo esta condición de frontera se conoce como condición de Dirichlet, además, la herramienta constructor de física requiere que se introduzcan las partes del dominio de la ecuación en formulación débil, mientras que las partes de las fronteras están disponibles automáticamente.

COMSOL contiene una sintaxis particular para expresar la formulación débil, debemos tener en cuenta que el software proporciona el operador de prueba, que se utiliza para expresar las funciones de prueba “ u ”. El operador de prueba actúa sobre la variable solución Ψ y sus derivadas, es decir, $u = \text{test}(\Psi)$. Continuando con la sintaxis es importante considerar la siguiente notación, la función de prueba es expresada como, ec. (8);

$$u = \text{test}(\Psi) \quad (8)$$

para la derivada de la función de prueba se tiene;

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \text{test}(\Psi_x) \quad (9)$$

Similarmente la derivada para la variable dependiente es expresada como;

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \Psi_x \quad (10)$$

De acuerdo con lo anterior la ecuación (7) toma la siguiente forma;

$$C \cdot \nabla \psi \cdot \text{test}(\nabla \psi) + V_{er} \cdot \psi \cdot \text{test}(\psi) - \lambda \cdot \psi \cdot \text{test}(\psi)$$

Donde λ representa los eigenvalores, sustituyendo el valor de C y añadiendo el potencial de Yukawa en el que se consideró un dopaje de $1 \times 10^{18} \text{ e/cm}^3$, una temperatura de 300°K y una constante dieléctrica correspondiente a GaAs con valor de 12.9 da como resultado un parámetro $k = 1 \text{ nm}^{-1}$ (ver ec.4) después de sustituir estos valores se obtiene la ecuación que se utilizó finalmente en el constructor de física:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \psi \cdot \text{test}(\nabla \psi) - (V_{e-w} + ((e_{\text{const}}^2 / 4 \pi \epsilon_0 \text{const}^2 \cdot 12.9) \cdot \exp(-1 \cdot (g.\text{coord}.1) / (g.\text{coord}.1) - \lambda)) \cdot \psi \cdot \text{test}(\psi)$$

No es necesario incluir el signo igual, ya que COMSOL establece la formulación débil automáticamente en cero, en cuanto a "g.coord.1" que ocupa la posición de r en el potencial de Yukawa corresponde a la coordenada x en la geometría. La formulación débil es menos estricta porque todos los términos involucrados son integrales sobre elementos de malla y no necesitan estar bien definidos en cada punto del dominio. Este es el beneficio clave del enfoque de elementos finitos, que permite que el software COMSOL obtenga soluciones para distintas aplicaciones.

La figura 4.3 muestra la interfaz gráfica del software en el constructor de físicas una vez finalizado el modelo físico Schrödinger-Yukawa.

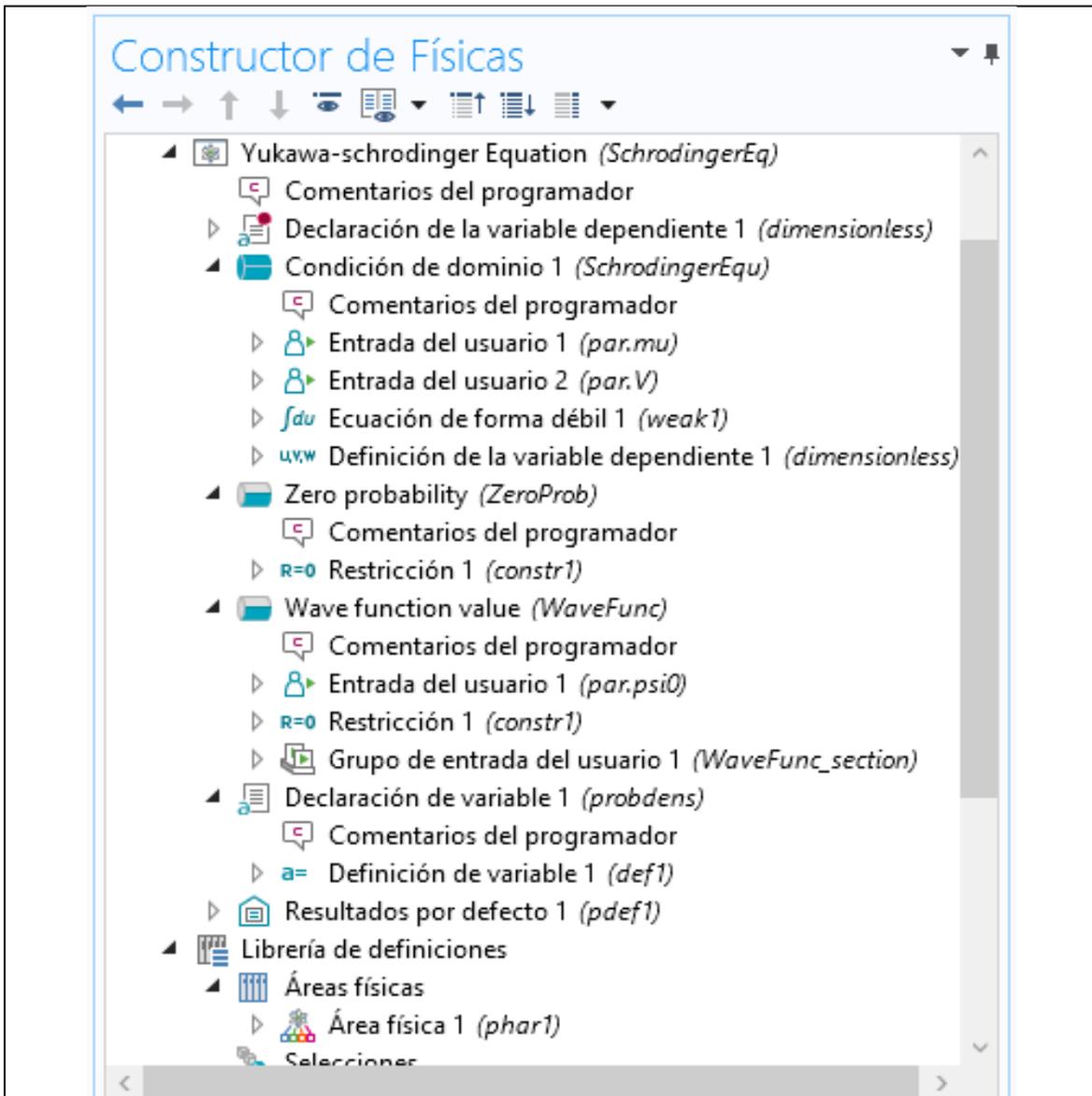


Figura 4.3. Interfaz Gráfica que muestra el constructor de físicas con los nodos del modelo físico creado.

Referencias

- [1] E. Cruz-H, et al. (2012). "Highly ordered self-assembled nanoscale periodic faceting in GaAs(631) homoepitaxial growth". *Appl. Phys.* 101(7).
- [2] Henini, M., (2013), *Molecular beam epitaxy: from research to mass production*, Waltham, USA: Elsevier Inc.
- [3] Singh, B., Deb, S., Mishra, G.P., Sarkar, S. (2009). Effects of Double Delta Doping on Millimeter and Sub-millimeter Wave Response of Two- Dimensional Hot Electrons in GaAs Nanostructures. *International Journal of Nuclear and Quantum Engineering.* 3(4).
- [4] Schubert, E.F. (1990). Delta doping of III-V compound semiconductors: Fundamentals and device applications. *J. Vac, Sci. Technol. A.* 8(3).
- [5] Y. Higuchi et al. (2003). V/III ratio dependence of surface migration length of As₄ molecules during molecular beam epitaxy of GaAsP on (411)A GaAs substrates. *Journal of Crystal Growth* 251(1).
- [6] Wilson Yeung-Sy Su, et al. (2020). Temperature-dependent charge-carrier transport between Si-δ-doped layers and AlGaAs/InGaAs/AlGaAs quantum well with various space layer thicknesses measured by Hall-effect analysis. *Scientific Reports*, 10(1).
- [7] V.-H. Méndez-García, et al. (2015). Si-doped AlGaAs/GaAs (631)A heterostructures grown by MBE as a function of the As-pressure. *Journal of Crystal Growth*, 425.
- [8] COMSOL Multiphysics. Physics Builder Manual.
- [9] Reyna méndez-camacho et al. (2017). Wigner crystallization in quantum wires within the Yukawa approximation. *Physical review b*, 95(8).

Capítulo 5.- Resultados y Discusión

En el presente capítulo nos encargaremos de presentar y explicar los resultados obtenidos de la síntesis a partir de las técnicas de caracterización empleadas además se mostrará el resultado obtenido de la interfaz física Schrödinger-Yukawa diseñada en COMSOL y el diagrama de bandas propio de la heteroestructura. El capítulo está dividido en las siguientes secciones.

5.1. Diagrama de bandas de la heteroestructura delta dopada

5.2. Microscopía de fuerza atómica

5.3. Fotoluminiscencia

5.4. Fotorreflectancia

5.5. Modelado teórico de interacción electrónica

5.1. Diagrama de bandas de la heteroestructura delta dopada

Durante el diseño de una heteroestructura es importante realizar un análisis para determinar el comportamiento de sus bandas energéticas. En consecuencia, se llevó a cabo el cálculo autoconsistente de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger utilizando el programa "1D Heterostructure Tool" [1], el cual permitió introducir niveles de impurificación y concentraciones molares de materiales ternarios correspondientes a nuestras muestras. La parte del diseño de la heteroestructura utilizada para la simulación se muestra en la figura 5.1, la cual consiste en la parte central del crecimiento que es la zona de interés donde ocurren los efectos del dopaje y de la formación del pozo en la banda de conducción. El modelo de densidad utilizado fue el modelo cuántico de masa efectiva ya que proporciona las sub-bandas de energía. El comportamiento resultante de la banda de conducción se muestra en la figura 5.2, el cual fue obtenido a 300 °K y asumiendo que las impurezas están ionizadas. Los valores de la concentración de portadores intrínsecos introducidos fueron: GaAs = $1.8 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$, $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As} = 2.1 \times 10^3 \text{ cm}^{-3}$ y para el dopaje $\delta\text{-Si}$ fue de $2.6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

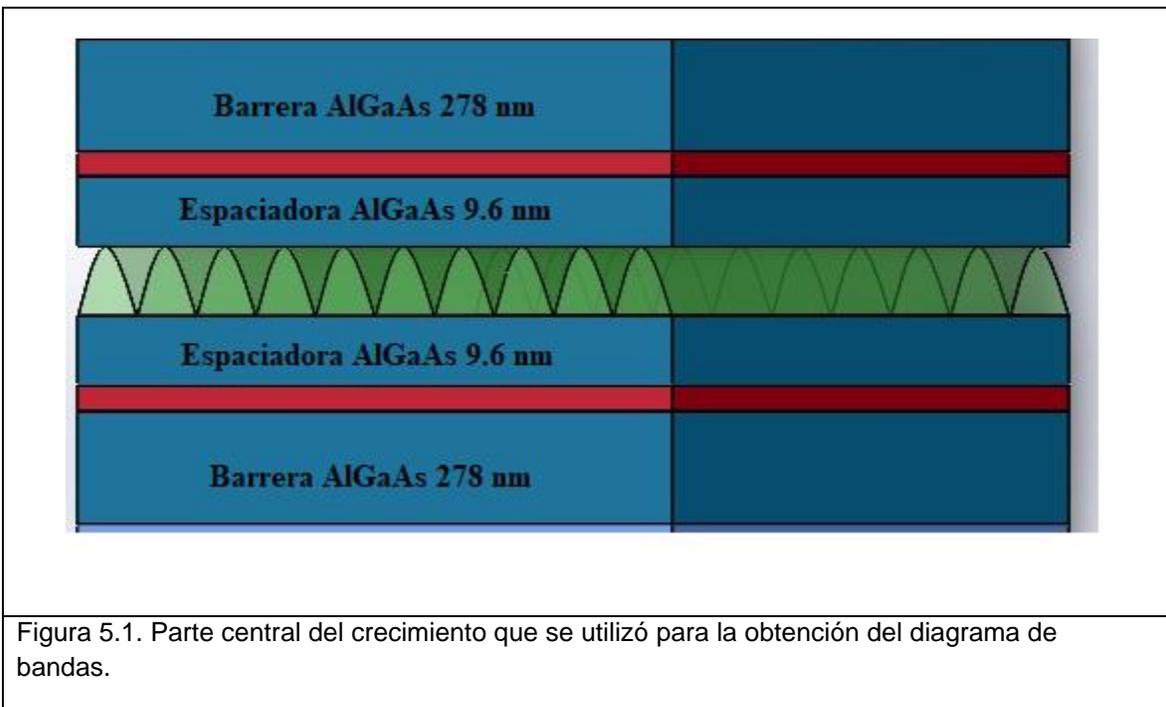
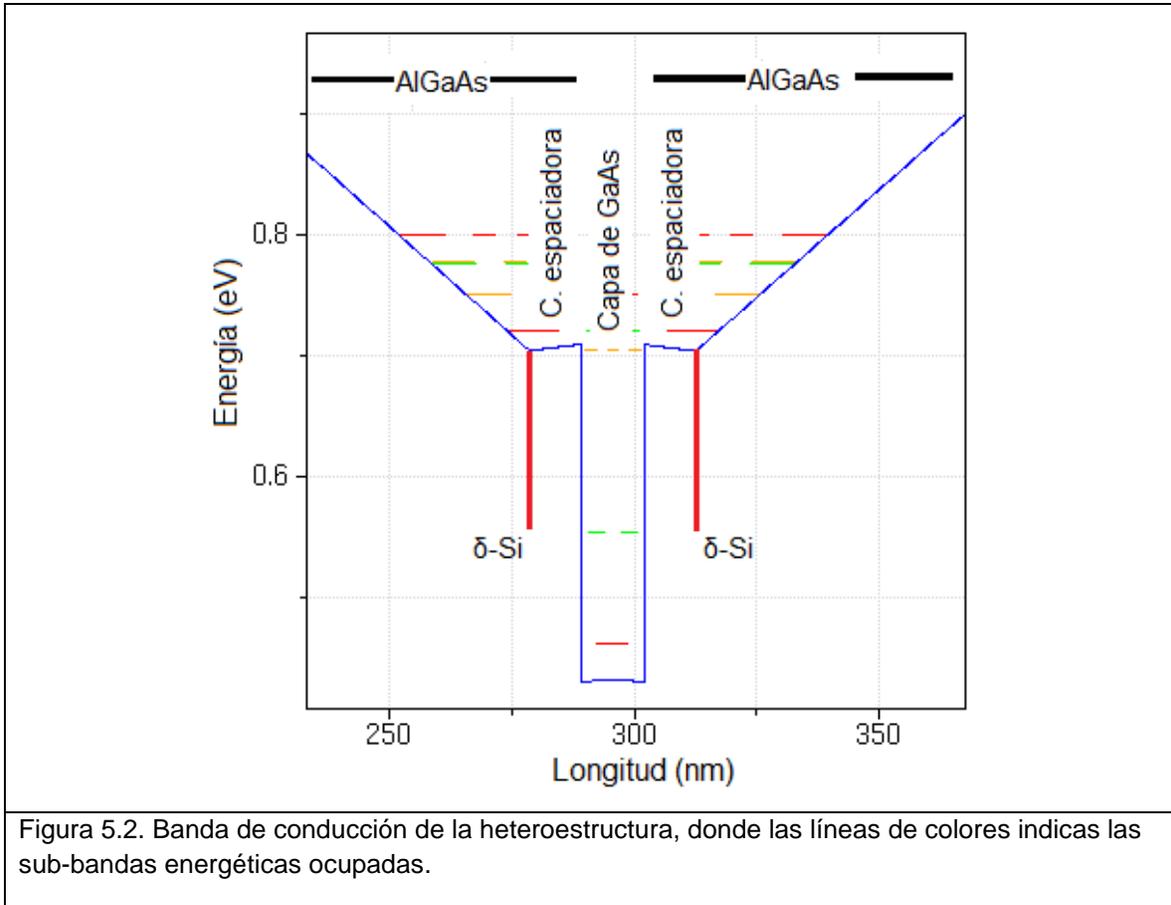


Figura 5.1. Parte central del crecimiento que se utilizó para la obtención del diagrama de bandas.



El comportamiento de este diagrama se traduce en lo siguiente; el ancho de banda prohibida del ternario $\text{Al}_{0.34}\text{Ga}_{0.66}\text{As}$ - capa espaciadora (1.84 eV) al ser mayor que el de GaAs (1.42 eV) provoca la creación de un pozo de potencial, el doblamiento de la banda en forma de "V" en la zona del dopaje tipo delta-Si es provocado por los átomos donadores ionizados debido a que se crea una placa de carga positiva. En esta parte se vuelve importante la distancia entre el dopaje $\delta\text{-Si}$ y el canal de GaAs (pozo) donde se llevara a cabo la conducción de electrones. La capa espaciadora es la que provee esta separación, su importancia radica en que la densidad de electrones en el pozo y su movilidad depende del grosor de esta capa, por lo tanto, fue necesario acudir a la literatura [2-4] para determinar un espesor adecuado para esta capa que se ajuste a nuestras necesidades (transporte electrónico), el grosor utilizado fue de 9.6 nm el cual permite tener una alta densidad electrónica en el pozo y por lo tanto mayor movilidad debido al efecto de apantallamiento. Un aumento en el espesor de esta capa implica un decaimiento del potencial "V" en la zona del dopaje y por consiguiente menor densidad electrónica en el pozo. En un caso contrario en donde el grosor de la capa sea de aproximadamente ≈ 5 nm habrá mayor suministro de portadores al pozo, pero mayor dispersión de los dopantes ionizados debido a la cercanía entre las impurezas y el pozo. Es importante mencionar que en nuestro caso en donde se desea tener una muestra que tenga las propiedades adecuadas para medir el transporte electrónico no es recomendable dopar directamente el canal de GaAs porque se generaría

una elevada dispersión provocada por las impurezas. Además, el doble dopaje delta que se encuentra en la heteroestructura dispuesto simétricamente entre sí, presenta ventajas en comparación con el dopaje delta individual, el doble δ -Si suministra mayor densidad de electrones al canal de GaAs y también aumenta la movilidad de estos provocado por el incremento de la distancia promedio de los electrones desde las capas dopadas lo que conlleva a la reducción de dispersión por impurezas [2, 5-7].

Continuando con el análisis del diagrama, se observa la formación de tres sub-bandas energéticas confinadas en el pozo. Las sub-bandas que aparecen en la posición de las impurezas se deben a que la dimensión del pozo delta que generan es comparable a la longitud de onda de De Broglie de los electrones libres, las energías electrónicas para el movimiento perpendicular al plano dopado delta se cuantifican en una serie de bandas discretas. En conclusión, al determinar que se tienen tres sub-bandas ocupadas en el pozo de GaAs y 5 sub-bandas ocupadas en el pozo δ -Si se tiene una heteroestructura con la capacidad de realizar transporte electrónico, debido a que el electrón confinado en el pozo de GaAs que se encuentra en el estado fundamental al ser arrancado por una fuente de potencial externo provoca un decaimiento energético del electrón de la segunda sub-banda para ocupar el estado fundamental vacío y el electrón de la tercera sub-banda pasara a ocupar la segunda por lo tanto los pozos delta servirán de reservorio para proveer de electrones al pozo de GaAs.

5.2. Microscopía de fuerza atómica

Esta técnica permitió determinar la morfología superficial de la muestra, la imagen AFM 3D obtenida se presenta en la figura 5.3 donde se observa un máximo en el eje Z de 2.8nm.

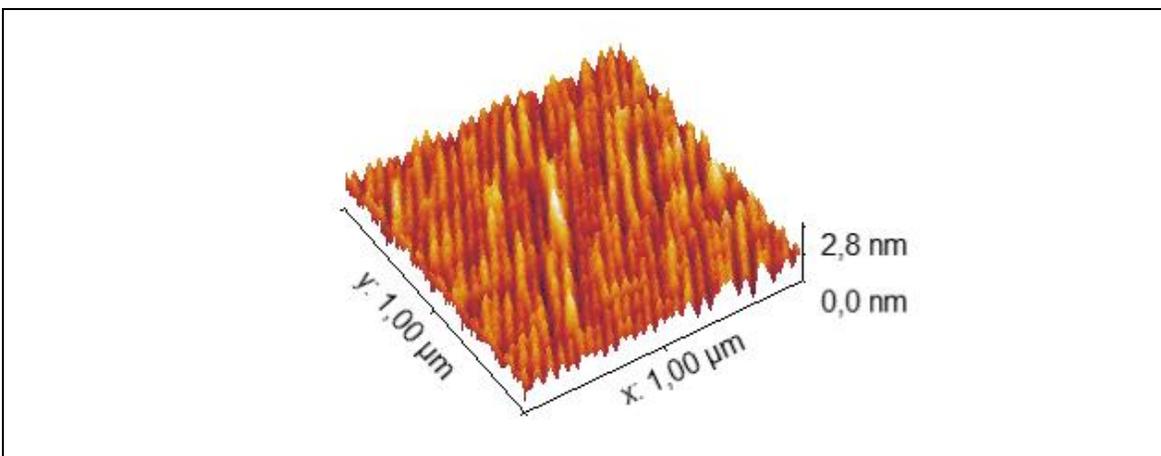


Figura 5.3. Imagen AFM 1μm x 1μm en visualización 3D.

En la siguiente imagen AFM bidimensional (figura 5.4) se aprecia más claramente la topografía superficial de la muestra, en la que se confirma la presencia de hilos cuánticos auto-organizados de GaAs, se realizó un análisis en el que se trazaron dos perfiles de línea, transversal a los hilos (perfil 1) y sobre un hilo (perfil 2) con el objetivo de comprobar las variaciones de altura que generan entre si estos hilos, véase la gráfica 5.1, estas oscilaciones son características de un perfil transversal a una muestra de hilos paralelos entre sí.

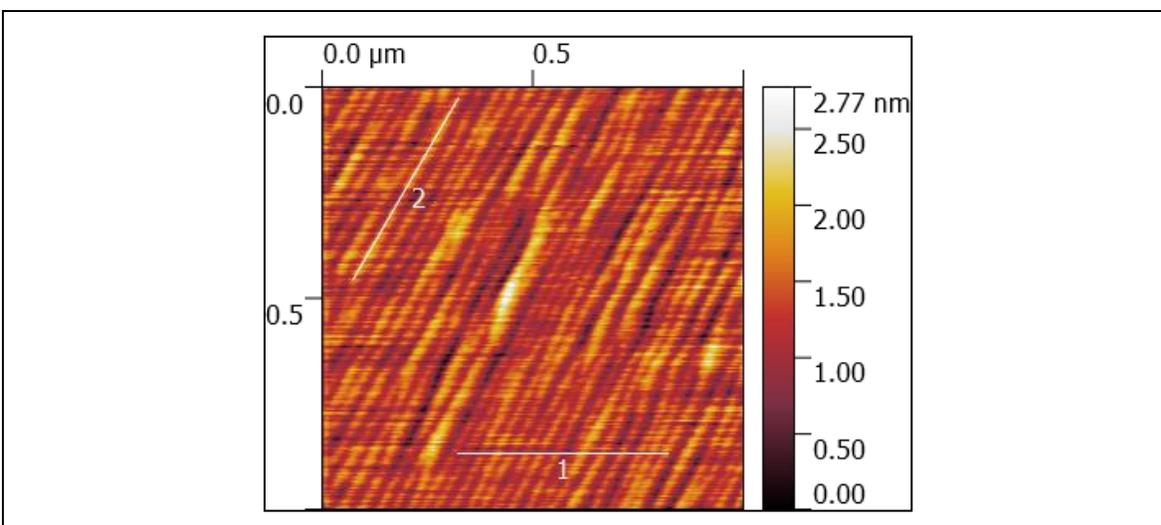
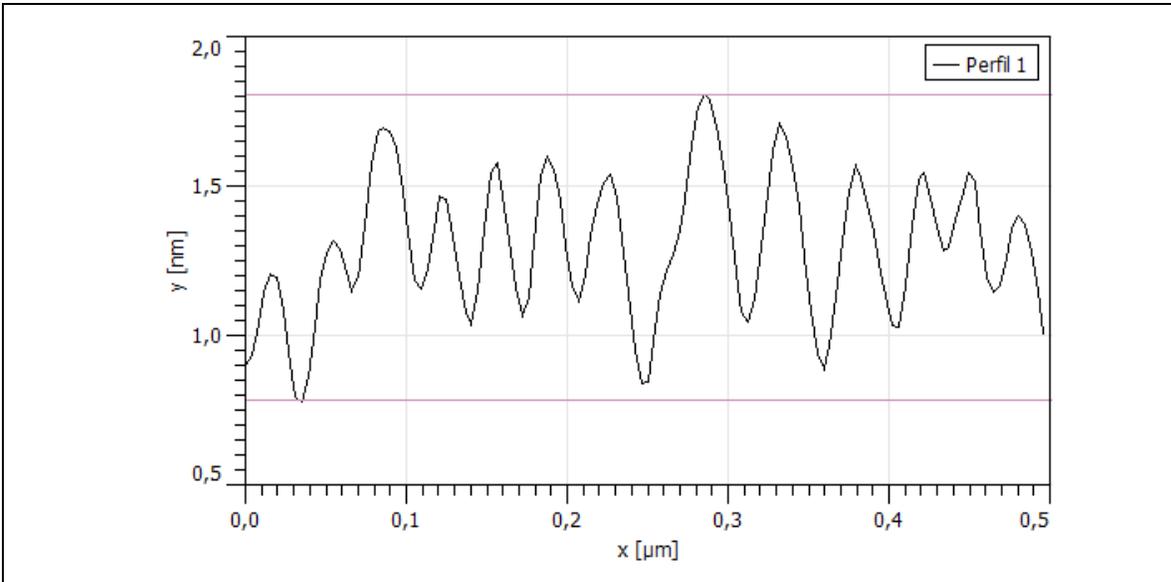


Figura 5.4. Imagen de AFM (1x1μm) del crecimiento, con los perfiles de línea 1 y 2.



Gráfica 5.1. Perfil de línea 1 tomado a partir de una longitud de $0,5 \mu\text{m}$, las líneas moradas indican la amplitud máxima.

Específicamente cada oscilación de la gráfica 5.1 representa un hilo y la amplitud máxima desde la superficie al hilo que más sobresale en altura es 1 nm . A partir de esta grafica se encontró que la periodicidad lateral aproximada es de 35 nm , lo cual se obtuvo a partir de un promedio de la separación entre los máximos de los 13 hilos, la figura 5.5 muestra la separación entre el quinto hilo y el sexto.

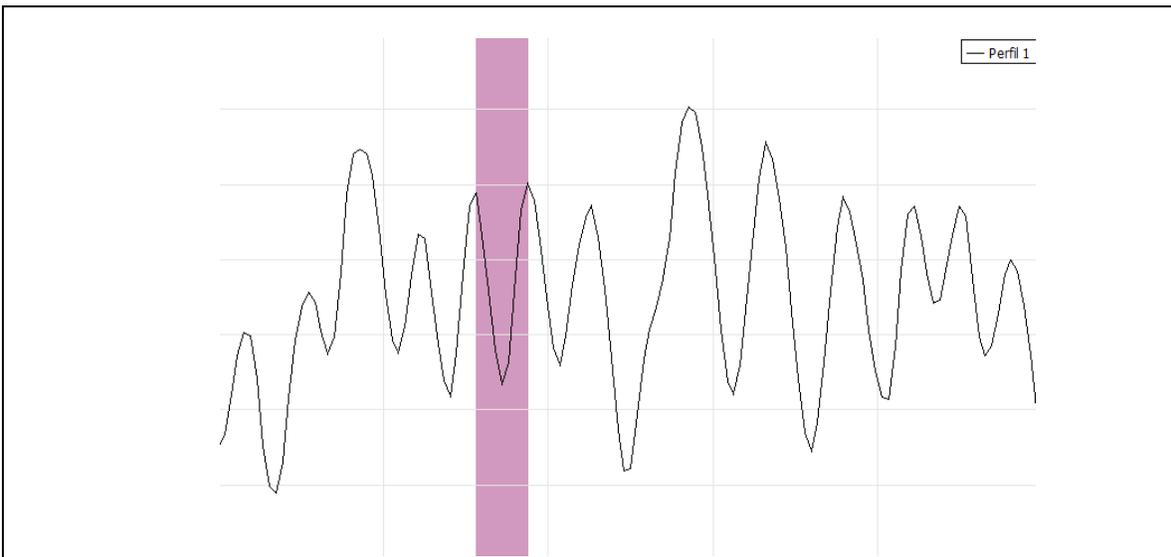
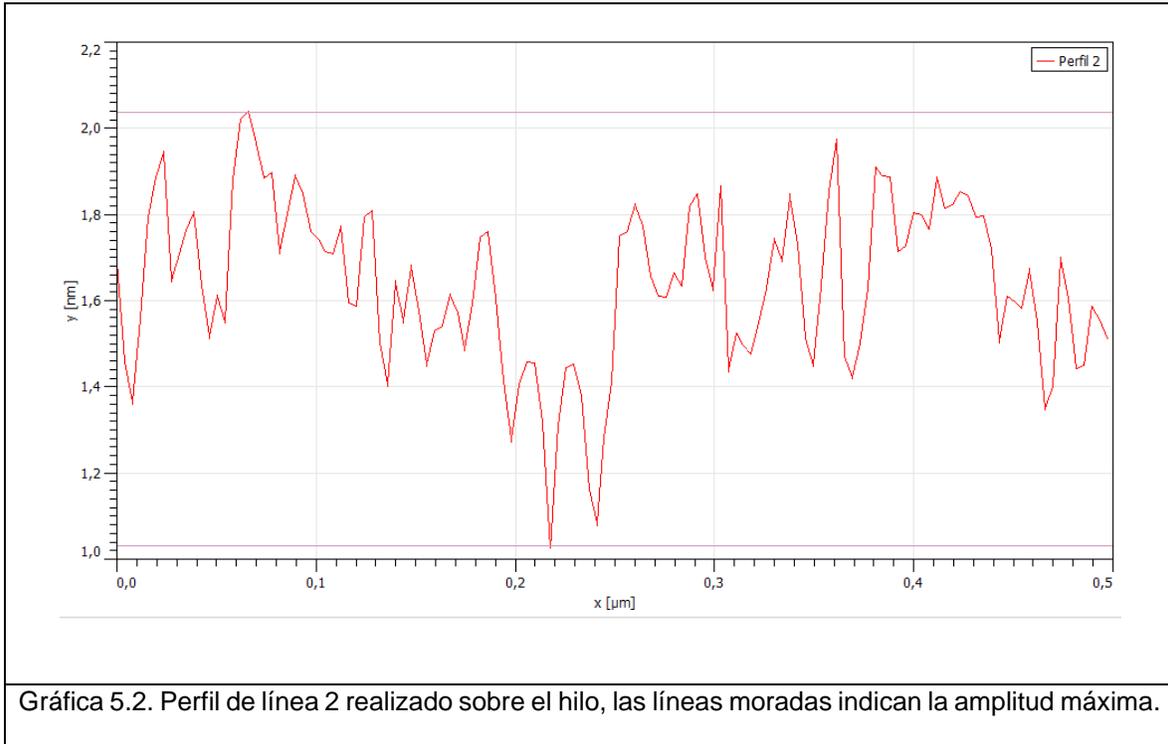


Figura 5.5. Perfil 1, la barra morada muestra la separación entre hilos.

A continuación, se muestra la gráfica 5.2 correspondiente al perfil de línea 2 trazado sobre el hilo



Gráfica 5.2. Perfil de línea 2 realizado sobre el hilo, las líneas moradas indican la amplitud máxima.

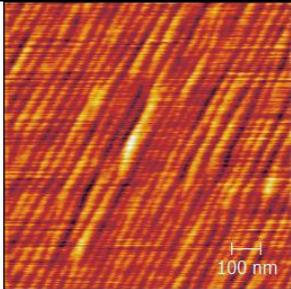
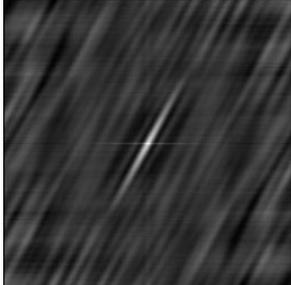
En la gráfica anterior se observa de igual manera la presencia de variaciones de altura con una amplitud máxima de 1 nm. Estos resultados nos indican que los hilos generados son uniformes, ya que no se presentan variaciones pronunciadas en las gráficas. Sin embargo, se requiere de un análisis más completo de la imagen AFM para determinar el grado de uniformidad de los hilos presentes en la muestra ya que el perfil de línea solo da información de una región específica de la imagen topográfica. En la siguiente subsección se realiza este análisis a partir de la imagen AFM de la figura 5.4.

5.2.1. ACF-2D

La función de autocorrelación (ACF; por sus siglas en inglés) provee de información cuantitativa que permite establecer el grado de ordenamiento de estructuras superficiales, está dada por (1):

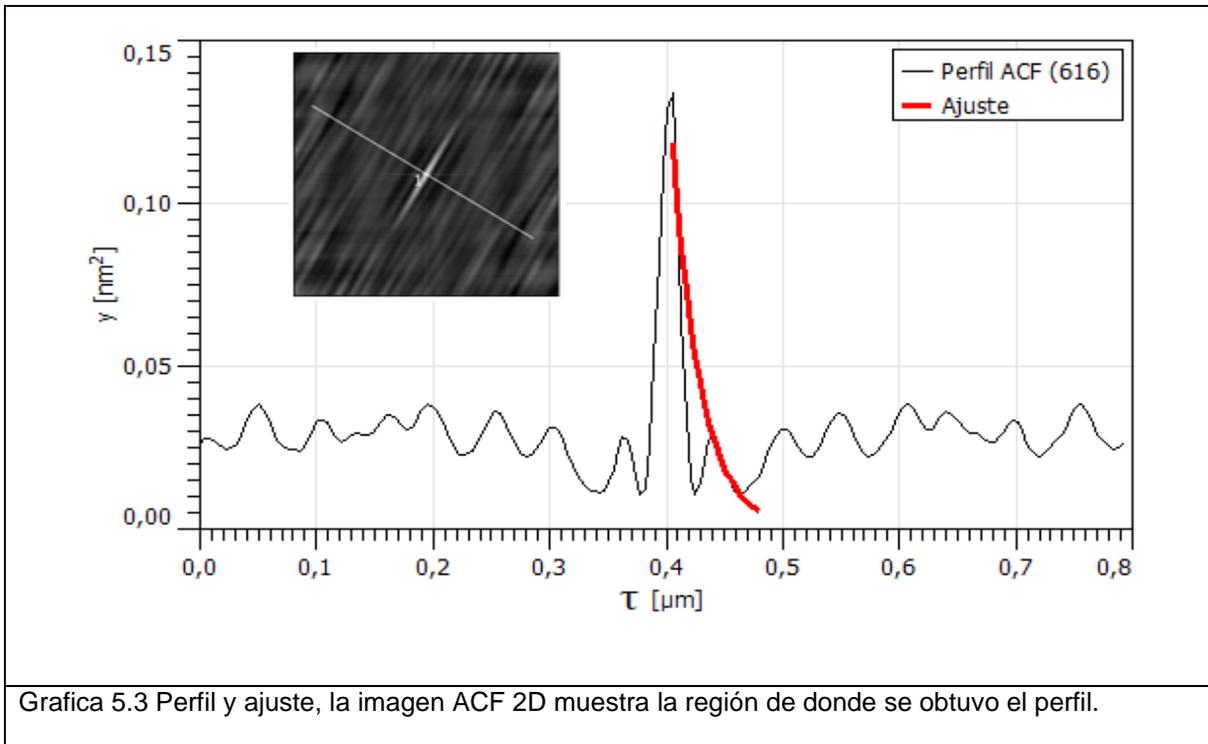
$$ACF(x, y) = \frac{\iint \rho(x - x^*, y - y^*) \cdot \rho(x^*, y^*) dx^* dy^*}{\iint \rho^2(x, y) dx dy} \quad (1)$$

Donde $\rho(x, y)$ es una función de perfil definida en la superficie (x, y) y el denominador es un factor de normalización, es decir ACF compara la altura en el punto (x, y) con la de algún segundo punto (x^*, y^*) y asigna esta comparación en función de la distancia entre ellos [8]. La tabla 5.1 que se presenta enseguida contiene la imagen ACF 2D obtenida.

Tabla 5.1. Topografía e imagen ACF 2D de la muestra.	
Topografía	
Imagen ACF	

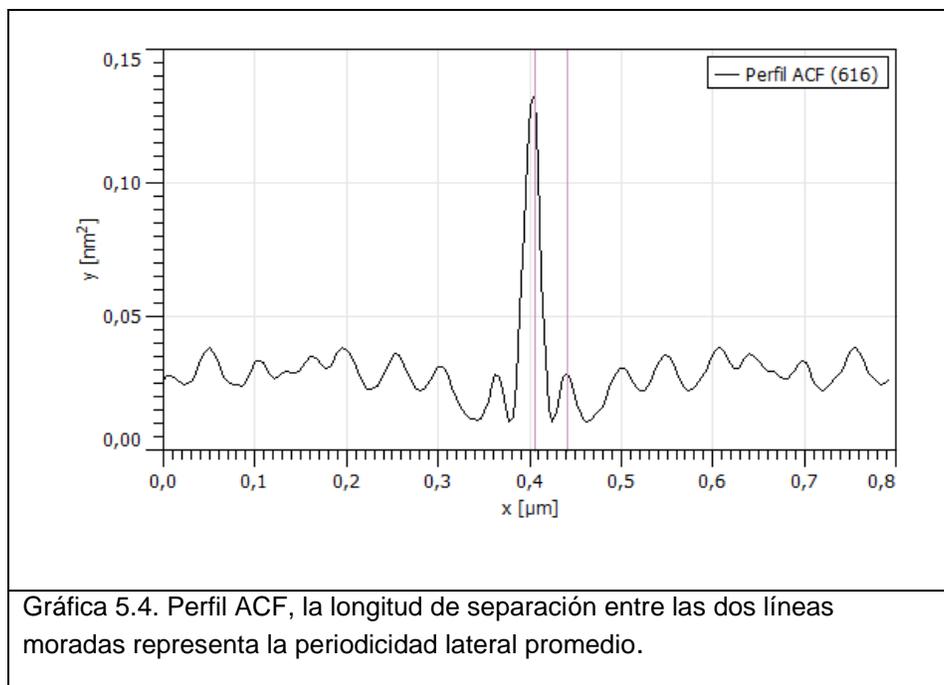
La imagen ACF indica visualmente el grado de uniformidad y la anisotropía superficial, sin embargo, es necesario establecer a partir de un perfil la longitud de correlación, el cual es un parámetro cuantitativo que permite determinar el orden de corto alcance. El perfil para la muestra fue tomado transversalmente (véase la gráfica 5.3). El perfil fue ajustado con la función de autocorrelación exponencial (2) que se muestra en seguida con el objetivo de determinar la longitud de correlación (ξ). Donde σ se refiere a la varianza y τ se refiere a la distancia entre dos puntos $\tau = x_1 - x_2$.

$$G(\tau) = \sigma^2 e^{-\left(\frac{\tau}{\xi}\right)} \quad (2)$$



Las oscilaciones presentes en la gráfica 5.3 indican la presencia de estructuras periódicas, es decir, cualquier ondulación en la superficie con una separación aproximadamente uniforme dará lugar a oscilaciones en el perfil ACF. El ajuste realizado en la gráfica 5.3 proporcionó una longitud de correlación de $\xi = 24 \text{ nm}$. Este parámetro es obtenido a partir de la disminución inicial de la función exponencial, este valor y las oscilaciones presentes en el perfil nos indican que los hilos tienen un orden local de corto alcance que se extiende hasta una longitud de 48 nm , también a partir de la distancia entre el máximo y la oscilación vecina (ver gráfica 5.4) se puede determinar una longitud promedio asociada con la distancia entre los hilos, el valor obtenido fue de 35 nm el cual coincide con el valor generado aritméticamente del perfil 1 (gráfica 5.1).

Entre mayor sea el valor de la longitud de correlación (ξ) mayor será la extensión de uniformidad de las nanoestructuras presentes en determinada superficie.



A partir de estos resultados se pudo comprobar que los parámetros experimentales utilizados fueron los adecuados para lograr la auto-organización de hilos cuánticos debido a que, cinéticamente, la alta temperatura del sustrato (690°C) promovió la alta longitud de migración superficial de los adátomos de Ga, además, sabiendo que a partir de 620°C ocurre la desorción de arsénico y galio, este efecto fue contrarrestado por un flujo elevado de arsénico ($\text{BEP} = 3.23 \times 10^{-6}$ Torr) lo que también contribuyó a elevar la tasa V/III promoviendo ahora el incremento de la longitud de migración superficial de As. Estos procesos físicos ya han sido investigados en sustratos de alto índice [9-12]. La importancia de la alta longitud de difusión superficial radica en que ocurre una fuerte anisotropía de la difusión la cual genera que los adátomos que llegan a las terrazas se difundan unidimensionalmente hasta que se incorporan en un borde escalonado debido a que es un sitio favorable energéticamente, posteriormente ocurre la coalescencia de estos escalones produciendo facetas (este proceso es conocido como step-bunching o agrupamiento de escalones), tal proceso es favorecido por la alta presencia de escalones en planos de alto índice posteriormente entra en juego el aspecto termodinámico que lleva al sistema a la minimización de energía mediante la formación de facetas estables [13].

5.3. Fotoluminiscencia

Esta técnica no destructiva permitió determinar las emisiones presentes en la muestra, también se utilizó para obtener la fracción molar de aluminio contenida en el ternario $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, para llevar a cabo las mediciones presentadas en esta tesis se utilizó un láser UV ($\lambda = 355 \text{ nm}$) con energía de excitación de 3.49 eV.

La siguiente imagen, figura 5.6, muestra los espectros obtenidos en función de la temperatura, desde 10°K hasta 40°K, los cuales fueron ajustados con la función Gaussiana.

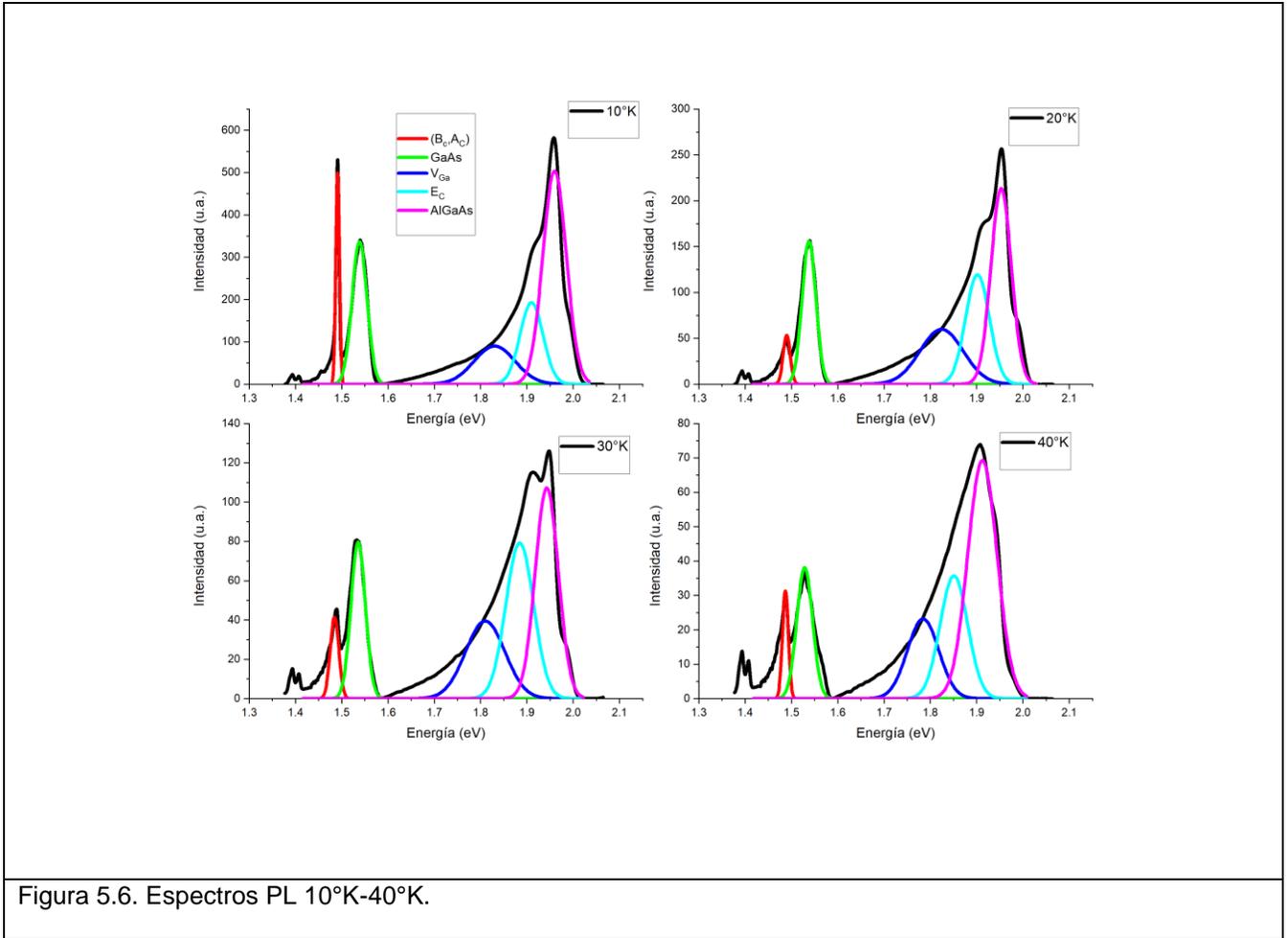


Figura 5.6. Espectros PL 10°K-40°K.

La primera emisión, etiquetada como B_{cAc} , ubicada en 1.49 eV (10°K) se debe a la transición de la banda de conducción al nivel aceptor de carbón. El carbón es una impureza típica no intencional comúnmente observada en capas de GaAs y AlGaAs crecidas por MBE, esta suele ser muy intensa a bajas temperaturas [14]. Las impurezas energéticamente están por debajo del band gap del material, en este caso GaAs, debido a que generan niveles de energía, al ser aceptor, cercano a la banda de valencia (ver figura 5.7). La emisión asociada a la recombinación radiativa entra la banda de conducción y la banda de valencia correspondiente a GaAs se encuentra en 1.5385 eV (10°K).

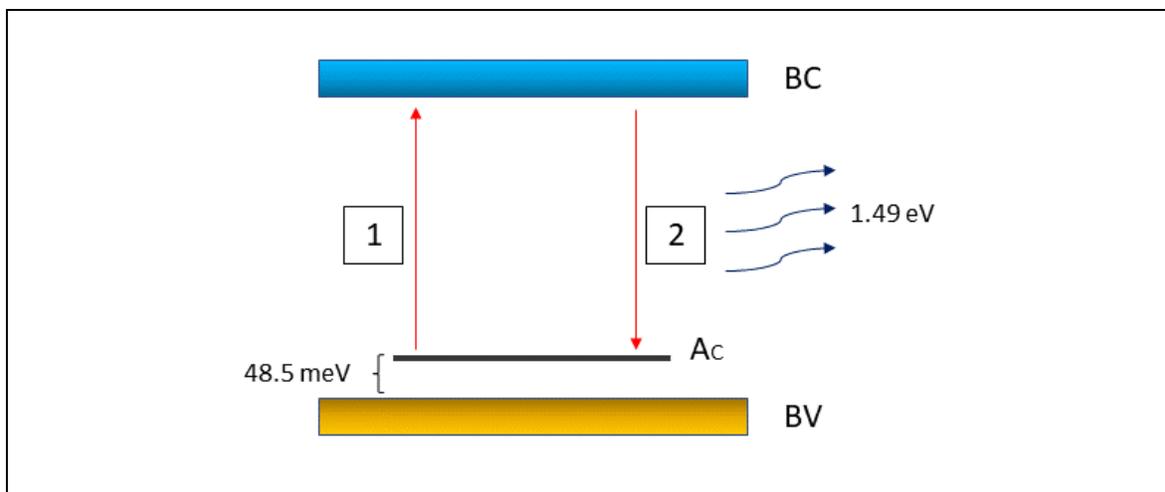


Figura 5.7. Proceso de emisión de la impureza de carbono en 10°K. 1- Excitación desde el nivel aceptor del carbono hacia la banda de conducción. 2- Recombinación radiativa donde ocurre la emisión fotónica. El valor de 48.5 meV corresponde en el espectro a la separación de los picos verde y rojo (band gap de GaAs e impureza de carbono respectivamente).

La tercera emisión con una forma de línea que se caracteriza por ser ancha ubicada en 1.83 eV (10°K) corresponde a la vacancia de Galio [15] que es un defecto cristalino puntual y de igual manera que las impurezas introducen niveles de energía dentro del bandgap y que se relacionan con centros profundos en este caso del ternario AlGaAs, la cuarta emisión ubicada en 1.91 eV (10°K) pertenece a la transición debido a impurezas del carbón (E_c) sobre sitios de arsénico del ternario AlGaAs, es decir, la impureza actuando como aceptor, caso parecido con la figura 5.7, por último, se presenta la transición entre bandas correspondiente al band gap de AlGaAs en 1.9598 eV [16,17].

La ecuación que sirvió para la identificación del carbón fue ($0 < x < 0.4$) [17]:

$$E_c \text{ (meV)} = 26.7 + 5.6x + 110x^{3.4}$$

Tomando en cuenta la energía de unión del carbón en función de la concentración molar de aluminio, por consiguiente, fue necesario primero determinar x , mediante las siguientes ecuaciones y utilizando el resultado de 1.9598 eV se calculó la fracción molar del ternario AlGaAs [18]:

$$E_g(T)_{AlGaAs} = E_g(0)_{AlGaAs} - \frac{(5.41 \times 10^{-4})(T^2)}{(T + 204)}$$

$$E_g(0)_{AlGaAs} = 1.519 + 1.155x + 0.37x^2$$

Se obtuvo una fracción molar de aluminio con valor de $x=0.34$.

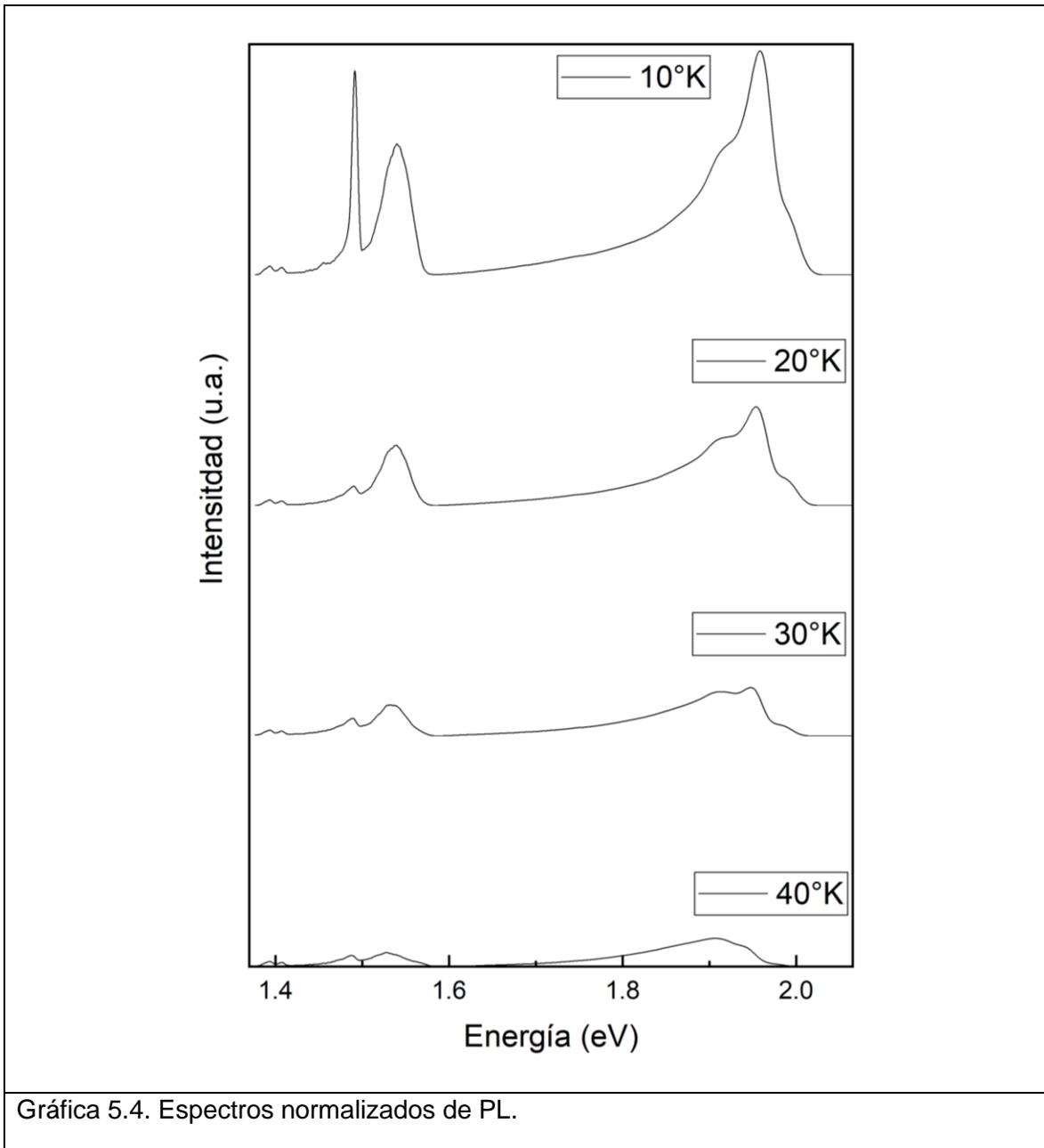
La gráfica 5.4 muestra los espectros normalizados donde se ve más claro el efecto que tiene la temperatura con la emisión de fotoluminiscencia, cuando aumenta la temperatura

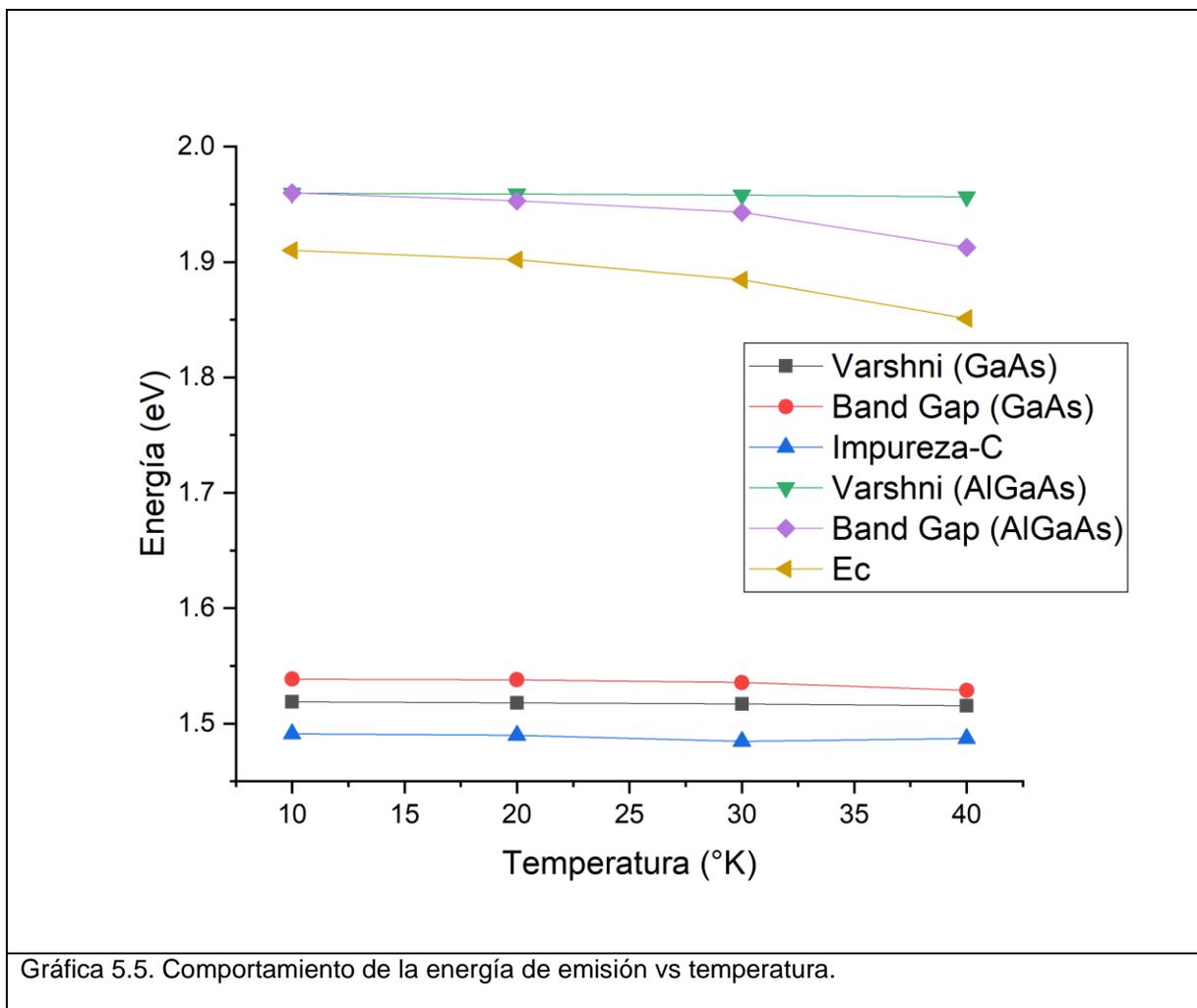
ocurre la disminución de intensidad y el corrimiento de las emisiones hacia energías menores. Este comportamiento puede entenderse mejor si se considera que el espacio interatómico aumenta cuando aumenta la amplitud de las vibraciones atómicas debido al aumento de la energía térmica. Este efecto se cuantifica por el coeficiente de expansión lineal de un material. Una modulación directa de la distancia interatómica, como la aplicación de un alto esfuerzo de compresión (tensión), también provoca un aumento (disminución) de la banda prohibida. En el caso de la disminución de la intensidad con el incremento de la temperatura es atribuido a la interacción de excitones y fonones.

En la siguiente gráfica 5.5 se muestra el comportamiento de las emisiones con respecto a la temperatura, también se muestran los resultados generados por el modelo de Varshni.

Relación de Varshni:
$$Eg(T) = Eg(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta}$$

Donde $\alpha = 5.41 \times 10^{-4}$ eV/°K, $\beta = 204$ °K, T es la temperatura y $Eg(0)$ es el band gap teórico del material en el cero absoluto.





Gráfica 5.5. Comportamiento de la energía de emisión vs temperatura.

Los resultados obtenidos en esta sección nos permitieron determinar las impurezas y los defectos cristalinos presentes en la muestra además se obtuvieron las emisiones del band gap para GaAs y para AlGaAs, a partir de este último se obtuvo la fracción molar de Al presente en el ternario. La no concordancia entre los valores teóricos de Varshni y los valores experimentales obtenidos para la emisión de GaAs en el que el espectro presenta mayor energía de emisión (blue-shift) puede deberse a varios factores físicos. El corrimiento del band gap hacia energías mayores se ha reportado en heterouniones que forman una alineación de banda del tipo II (también llamada staggered) véase la figura 5.8. El desplazamiento hacia el azul se explica de la siguiente manera: cuando el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia ocurren en lados opuestos de la interfaz de un semiconductor, los electrones y los huecos quedan atrapados en diferentes regiones de la heteroestructura. Debido a que los electrones y los huecos se atraen entre sí, se forman QW estrechos adyacentes a la interfaz, como se muestra en la figura 5.8. A medida que aumenta la excitación, los portadores se acumulan en estos pozos, lo que aumenta la energía de confinamiento de los pozos y la energía del dipolo a través la interfaz [19-21].

Sin embargo, la alineación de banda de tipo II no se presenta en una interfaz GaAs/ AlGaAs, en este caso se presenta el tipo I, que se podría decir que es la alineación de bandas clásica en donde el band gap de un semiconductor (GaAs) está completamente contenido en el band gap de otro semiconductor (AlGaAs).

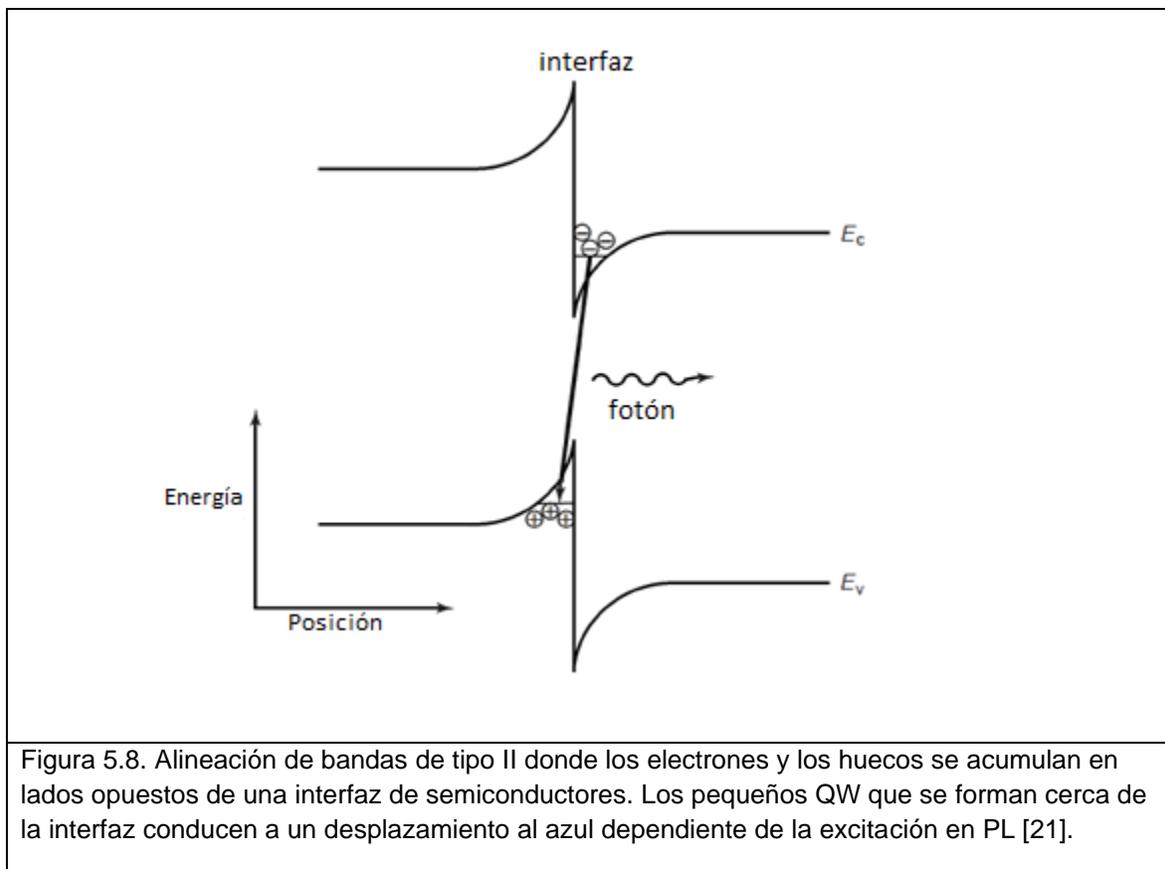
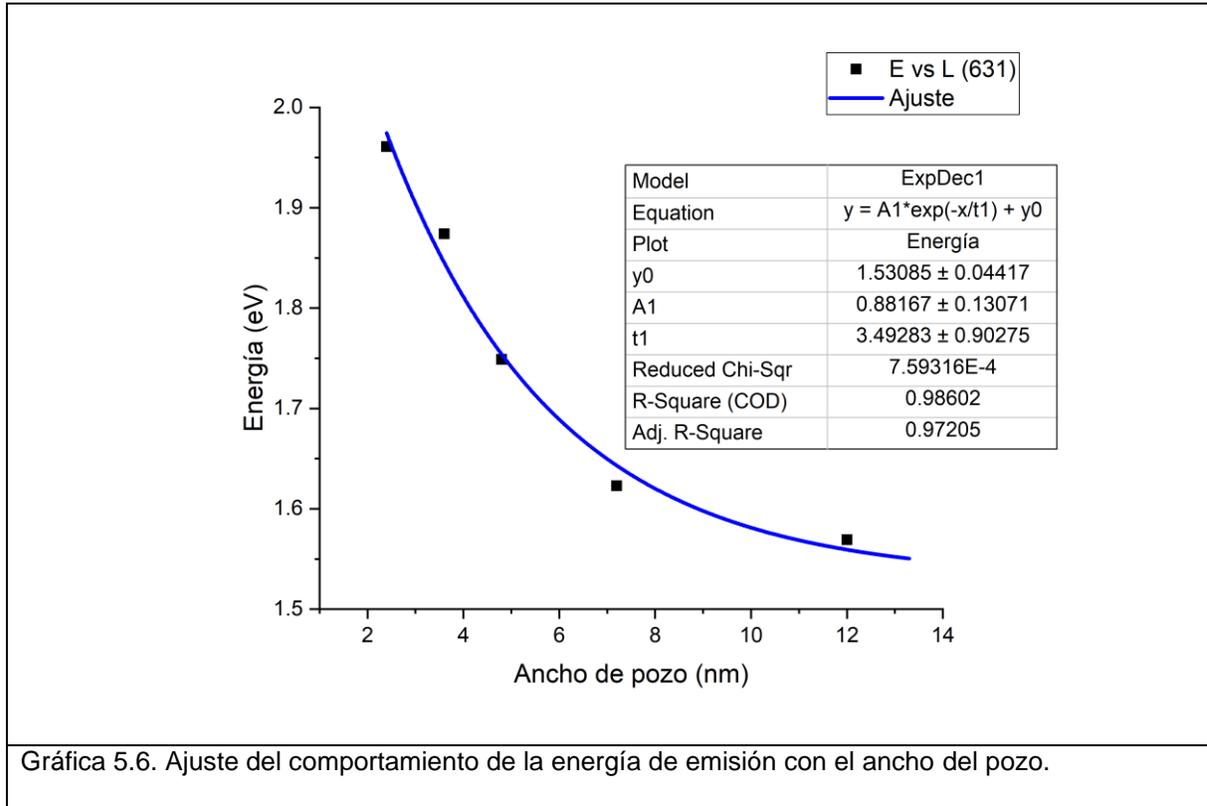


Figura 5.8. Alineación de bandas de tipo II donde los electrones y los huecos se acumulan en lados opuestos de una interfaz de semiconductores. Los pequeños QW que se forman cerca de la interfaz conducen a un desplazamiento al azul dependiente de la excitación en PL [21].

También se exploró la posibilidad de que el blueshift se debiera al pozo generado en la intercara de GaAs superficial (corrugación) con la barrera de AlGaAs, por lo tanto, se acudió a la literatura, en este artículo [22] en donde utilizan un sustrato de GaAs (631) se reportan emisiones de pozos de GaAs para diferentes grosores y en los cuales se tiene un arreglo de hilos de GaAs como en nuestro caso (ver tabla 5.2). Acto seguido se hizo una gráfica (gráfica 5.6) de los valores de energía de emisión que reportaron versus el ancho del pozo y se ajustaron con una función de decaimiento exponencial $Y = y_0 + A_1 e^{-x/t_1}$. El ajuste se extendió hasta 13.3 nm que es el ancho de nuestra capa de GaAs corrugada y se obtuvo un valor de 1.5505 eV.

Tabla 5.2. Energía de emisión y ancho del pozo correspondiente.

Energía	1.961 eV	1.874 eV	1.749 eV	1.623 eV	1.569 eV
Ancho del pozo	2.4 nm	3.6 nm	4.8 nm	7.2 nm	12 nm



Gráfica 5.6. Ajuste del comportamiento de la energía de emisión con el ancho del pozo.

Además, el resultado obtenido del ajuste (1.5505 eV) se comparó con el valor obtenido de la fórmula de eigenvalores (1) de una partícula de masa m^* en un pozo de potencial infinito con longitud “L” de 13.3 nm.

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m^* L^2} \quad (1)$$

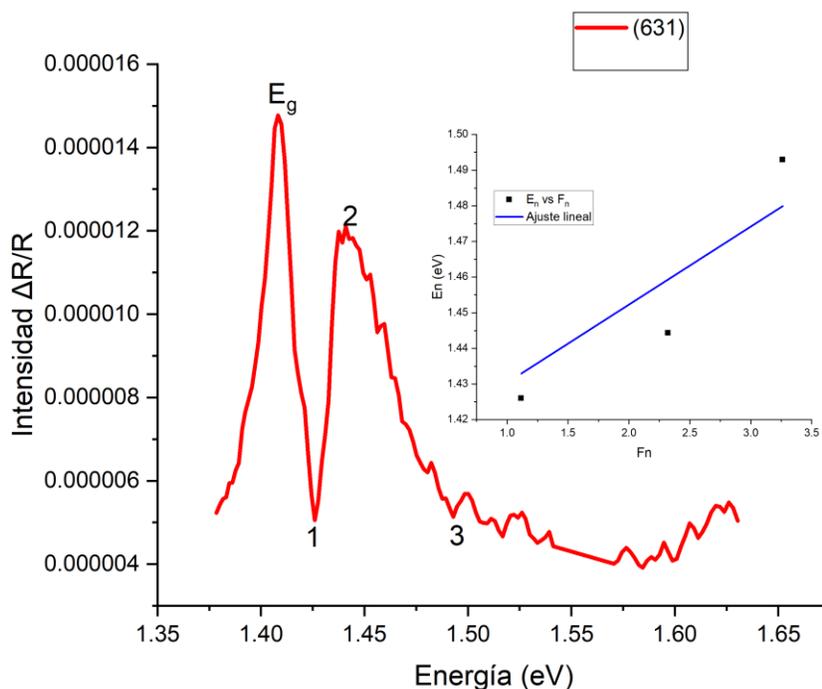
Donde m^* es la masa efectiva de GaAs ($0.067 \cdot m_0$), \hbar es la constante de planck reducida, L es el ancho del pozo y n se refiere al eigen valor que en nuestro caso es 1, correspondiente al primer nivel de energía confinado. Sustituyendo los valores se obtuvo un valor de 31.4 meV, sumándolo a 1.51875 eV (valor generado del modelo de Varshni en 10°K) se tiene 1.5501 eV el cual coincide con el valor obtenido del ajuste. Por lo tanto, al tener un valor experimental de la emisión de GaAs en 1.5385 eV (10°K) podemos concluir que el blueshift no se debe a una emisión energética de algún nivel confinado.

Así que, en nuestro caso puede deberse a un esfuerzo compresivo (compressive strain) en la capa superficial de GaAs, que se genera por una tensión superficial intrínseca dado que el entorno de los átomos superficiales es diferente al del bulto [9], esto provoca la división de las bandas de huecos ligeros (LH) y huecos pesados (HH) lo que conlleva a un blueshift del band gap [23-25].

La emisión en el espectro debido a la vacancia de galio nos indica que se tiene una muestra rica en arsénico e idónea para que los átomos de silicio ocupen los sitios del grupo III actuando como donador. En el espectro no aparecen emisiones que se le puedan atribuir al silicio, tales como recombinaciones o defectos anti-sitio, debido a que el láser UV-355nm tiene una profundidad de penetración de 14nm tampoco hubiera sido posible con un láser rojo-632.8nm cuya profundidad de penetración es de 252.5 nm. Por esta misma razón no se obtuvieron las emisiones propias del pozo ya que se encuentra a 314.2 nm por debajo de la superficie, el dopaje delta-Si se encuentra a 291.3 nm.

5.4. Fotorreflectancia

La medición por fotorreflectancia fue llevada a cabo con un láser verde ($\lambda = 543.5 \text{ nm}$) como fuente de modulación a temperatura ambiente (300 °K) y a una frecuencia de chopper de 400 Hz, se utilizó una lampara de tungsteno como haz de sonda, esta luz fue monocromatizada y enfocada en la muestra. La longitud de onda utilizada tiene una profundidad de penetración de 138.5 nm de manera directa, con una modulación indirecta se obtiene una profundidad de hasta $3 \mu\text{m}$ [26]. La siguiente gráfica 5.7 muestra el espectro obtenido, solo obtuvo señal en ese rango energético debido a que el detector solo cubría ese intervalo.



Gráfica 5.7. Espectro de fotorreflectancia obtenido a temperatura ambiente. El inset corresponde al ajuste lineal de los extremos (etiquetados como 1,2 y 3).

En el espectro obtenido se observan dos tipos de señales, la correspondiente a la transición del band gap de GaAs ≈ 1.4 eV, y la otra señal se analizó suponiendo que correspondía al régimen de campo intermedio, es decir, a oscilaciones tipo coseno amortiguadas denominadas oscilaciones Franz–Keldysh (FKO, del inglés Franz–Keldysh oscillations) y es asociada a campos eléctricos internos. Con el fin de aclarar si era una señal FKO se procedió a obtener la fuerza del campo eléctrico interno asociado con la señal FKO, debido a que el procedimiento que se lleva a cabo requiere de un ajuste lineal que nos indicara si es una señal FKO, a continuación, empleamos la teoría de modulación asintótica de Franz-Keldysh [27,28]. El comportamiento oscilatorio de las FKO es modelado por la siguiente ecuación (3);

$$n\pi = \cos \left[\frac{4}{3} \left(\frac{E_n - E_g}{\hbar\Omega} \right)^{3/2} + \chi \right] \quad (3)$$

Donde E_g corresponde al band gap, E_n a la energía del extremo n-ésimo, χ es un factor de fase arbitrario y $\hbar\Omega$ es la energía electroóptica definida como (4);

$$\hbar\Omega = \left(\frac{e^2 E_{int}^2 \hbar^2}{2\mu} \right)^{1/3} \quad (4)$$

E_{int} corresponde al campo eléctrico interno y μ es la masa efectiva.

De acuerdo con la ecuación (3), los extremos de las oscilaciones (máximos y mínimos) FKO ocurren en energías dadas por (5):

$$n\pi = \left[\frac{4}{3} \left(\frac{E_n - E_g}{\hbar\Omega} \right)^{3/2} + \chi \right] \quad (5)$$

Esta ecuación (5) se puede reorganizar como (6):

$$E_n = \hbar\Omega F_n + E_g \quad (6)$$

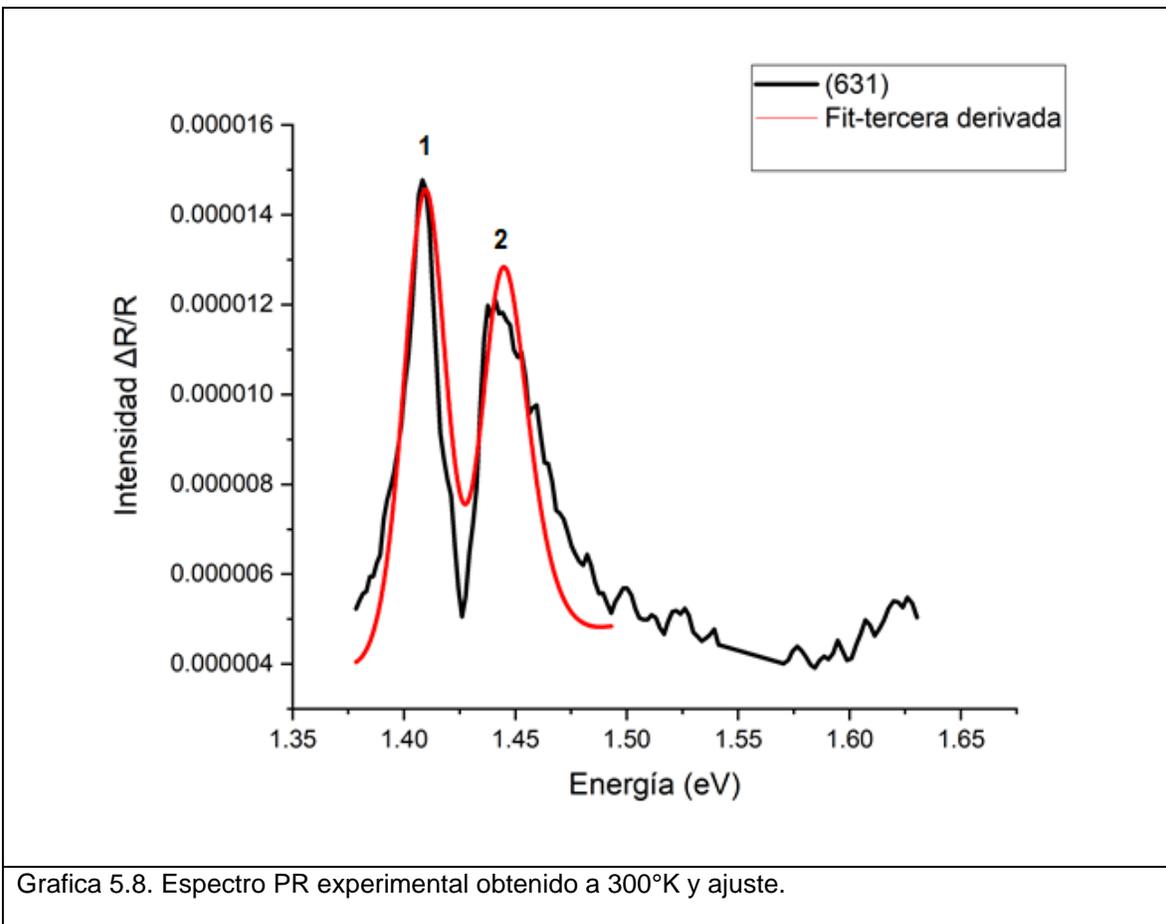
Donde $F_n = \left[\frac{3\pi}{4} \left(n - \frac{1}{2} \right) \right]^{2/3}$ n se refiere al extremo n-ésimo

La ecuación (6) corresponde a una función lineal con pendiente $\hbar\Omega$ e intersección con la ordenada al origen E_g . Mediante un ajuste lineal de E_n vs F_n (véase la tabla 5.3) se obtiene la pendiente y posteriormente utilizando la ecuación 4 podemos evaluar la magnitud del campo eléctrico, sin embargo, el ajuste lineal nos indica que no corresponde a una señal FKO.

Tabla 5.3. Localización de los Extremos			
n	1	2	3
Fn	1.115461	2.320254	3.26163
En	1.4260 eV	1.4443 eV	1.4929 eV

Al concluir que la forma de línea no corresponde a una oscilación FKO se procedió a analizar el espectro como una forma de línea de campo bajo, a continuación, se muestra el ajuste (gráfica 5.8) realizado con la formula (2) conocida como forma funcional de tercera derivada.

$$\frac{\Delta R}{R} = Re[Ae^{i\varphi}(E - E_g + i\Gamma)^{-m}] \quad (2)$$



Después de realizar el ajuste se lograron identificar dos señales, la primera correspondiente a la emisión del band gap del GaAs en bulto en 1.4103 eV y la segunda correspondiente a la transición 1e- 1hh en 1.442 eV, es decir una transición de la banda de huecos pesados (1hh) hacia el primer nivel confinado del pozo de la banda de conducción (1e) y se atribuye al pozo cuántico en la región correspondiente a los hilos auto-organizados que se encuentran en la parte central del crecimiento. Esta transición 1e-1hh se puede corroborar con los resultados reportados en el siguiente trabajo [29] en donde obtienen las transiciones ópticas de hilos cuánticos sintetizados en un sustrato de GaAs(631).

5.5. Aproximación teórica de la interacción electrónica

En esta sección se muestran los resultados obtenidos del enfoque Schrödinger-Yukawa [30] (ec. 7,8 y 9) mediante la física que se diseñó en COMSOL. La figura 5.9 muestra la interfaz del constructor de modelo que es donde se llevó a cabo la creación de una geometría, la asignación de una malla, la especificación de una física(s), la elección del tipo de solución y la visualización de los resultados.

El análisis fue enfocado a la parte longitudinal del hilo, que es donde se puede presentar la cristalización de Wigner debido a que en la parte transversal la limitante para este fenómeno físico es la reducida dimensión.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V_{ef} \Psi = E \Psi \quad (7)$$

$$V_Y = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0} \frac{\exp[-kr]}{r} \quad (8)$$

$$k = \sqrt{\frac{2e^2n}{\epsilon\epsilon_0 k_B T}} \quad (9)$$



Figura 5.9. Interfaz del software Comsol donde se llevó a cabo la simulación.

Se realizó un análisis 1D donde la geometría empleada se originó a partir de un intervalo de longitud igual a $1\mu\text{m}$ ya que de acuerdo con nuestros resultados experimentales la longitud de los hilos es equivalente a ese valor. Recordemos que el parámetro k ya fue asignado en la parte donde se diseñó la física, sección 4.4, (considerando un dopaje de $\approx 10^{18} \text{ e/cm}^3$, una temperatura de 300°K , y una constante dieléctrica correspondiente a GaAs con valor de 12.9 da como resultado un parámetro $k = 1\text{nm}^{-1}$). Continuando con la etapa de la simulación se asignaron las condiciones de frontera, la primera se refiere a que hay cero probabilidades de que el electrón se encuentre fuera del hilo, esta condición de frontera de probabilidad cero es equivalente a una condición de Dirichlet $\Psi = 0$. Por lo tanto, la energía potencial se consideró cero dentro del hilo e infinito fuera de él. La otra condición de frontera que se

utilizó fue implementar el valor inicial de la función de onda Ψ evaluada en cero. Se hizo un mallado del tipo borde y el estudio utilizado fue el de eigenvalores el cual nos permitió resolver para los valores propios y posteriormente visualizar la función de densidad de probabilidad (gráfica 5.9 y 5.10). En las imágenes 5.10 [30] y 5.11 [31] se muestran resultados teóricos de la cristalización de Wigner para el estado base, en la imagen 5.12 [32] se muestra el resultado experimental en relación con el cristal de Wigner en un nanotubo de carbono. En estos trabajos de sistemas 1D se observa una forma de línea como la obtenida en nuestro trabajo. Nuestra aproximación representa la ventaja de no tener un costo computacional alto y de no utilizar una programación numérica compleja.

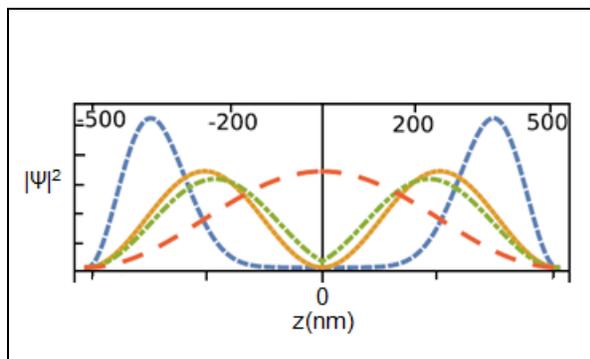
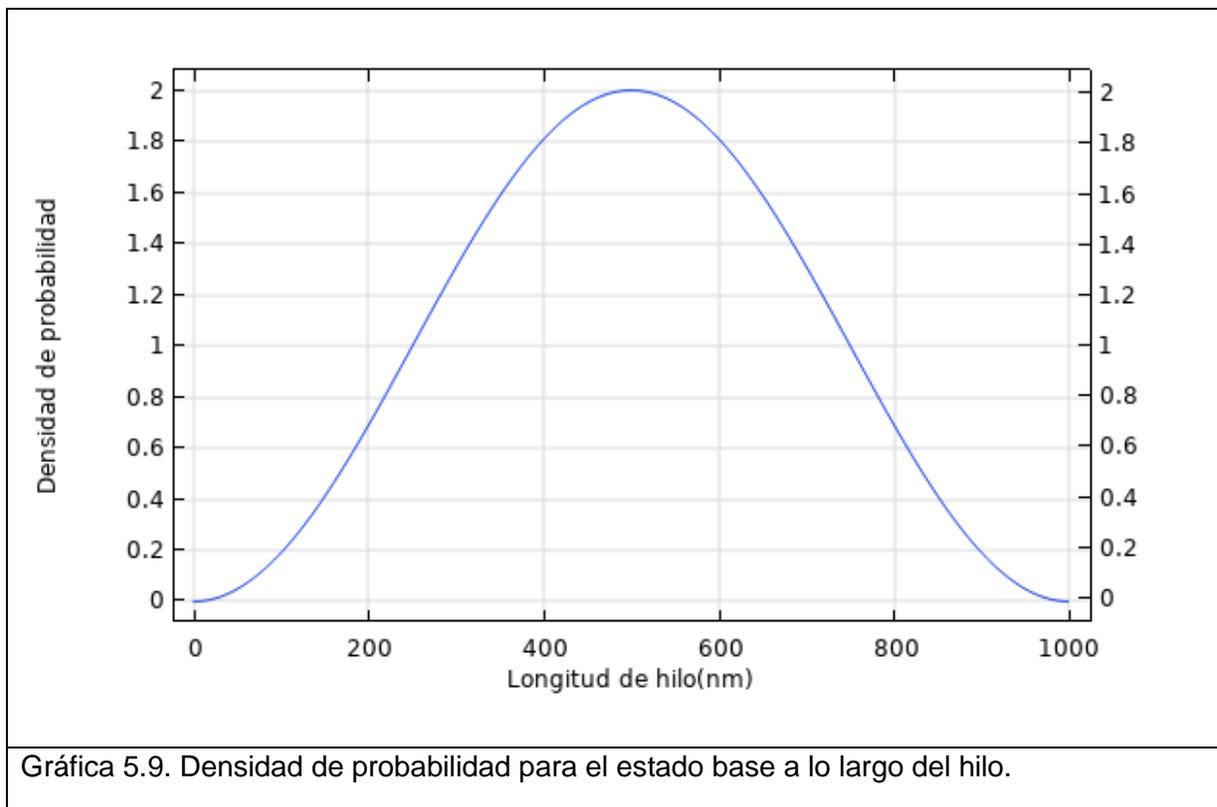


Figura 5.10. Perfiles de probabilidad para el estado base donde cada forma de línea representa un dopaje diferente.

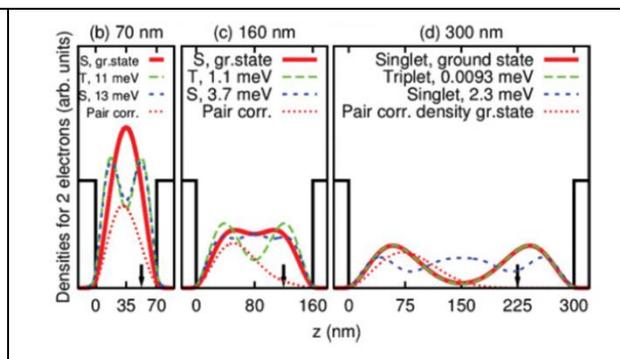
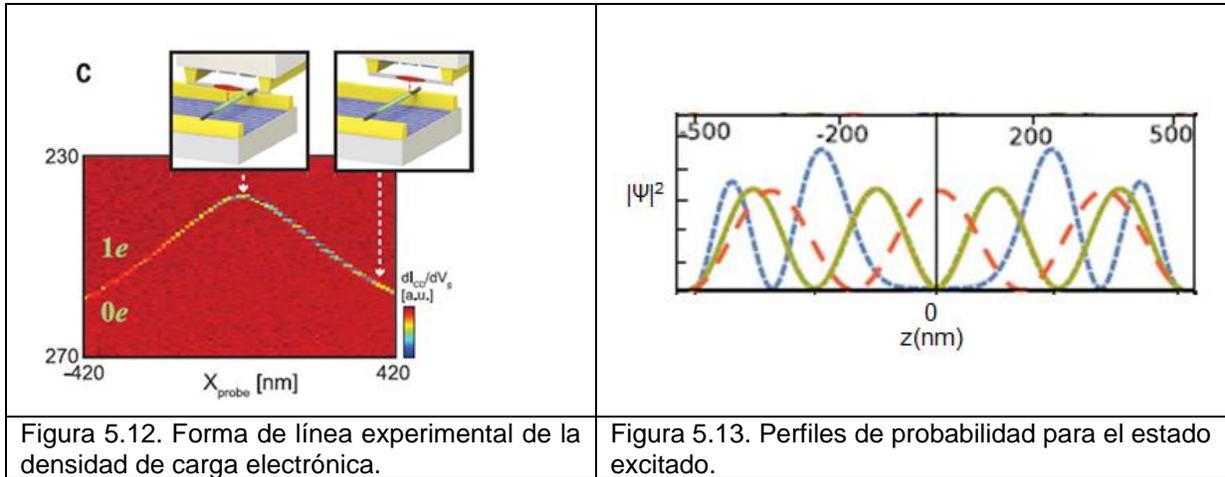
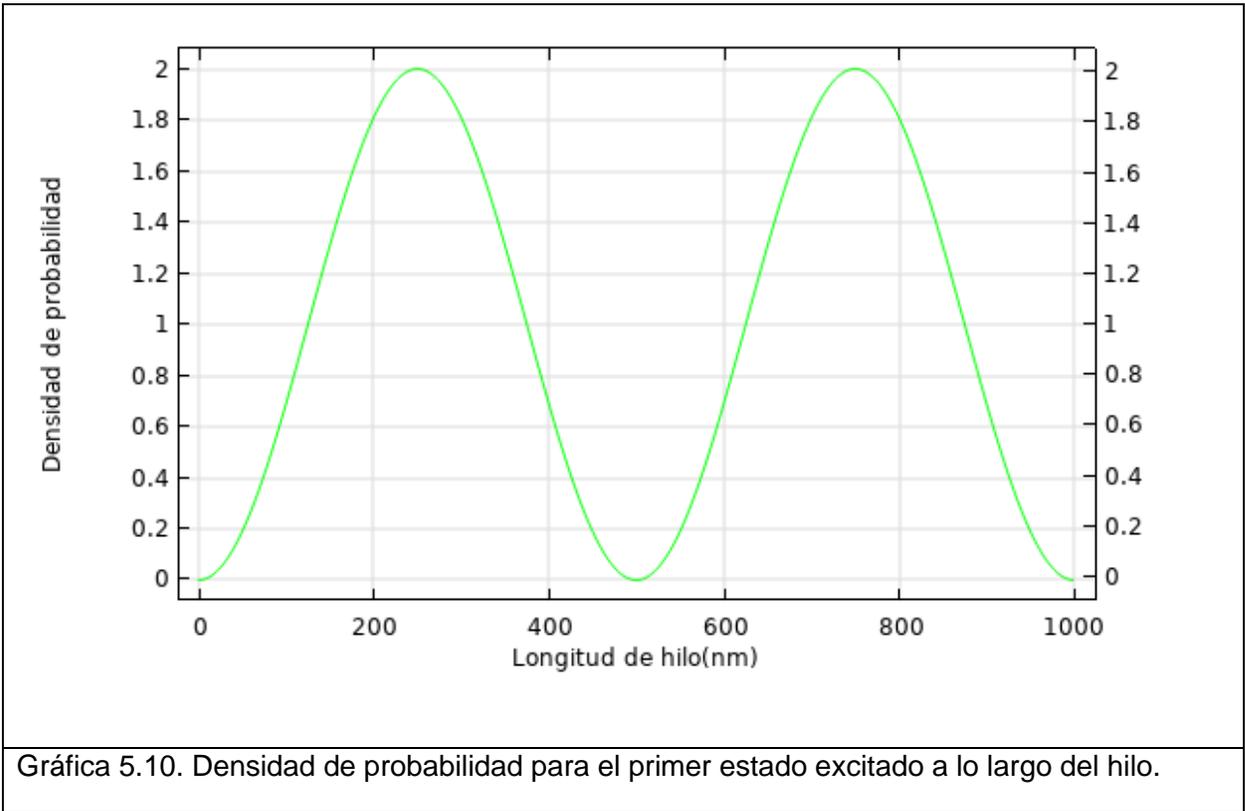


Figura 5.11. Densidad de electrones para el estado base en nanohilos de longitudes de 70, 160 y 300 nm.



Para el estado excitado (gráfica 5.10) se tiene una forma de línea que se aproxima a los resultados de la imagen 5.13 [30] en donde cada línea representa un distinto dopaje.



En ambos casos (gráfica 5.9 y 5.10) podemos observar una distribución electrónica muy localizada a lo largo del hilo, este modelo Schrödinger-Yukawa nos permitió tratar el problema considerando una gran cantidad de electrones $\approx 10^{18}$ e/cm³. De acuerdo con estos resultados podemos verificar la formación del cristal de Wigner ya que la concentración electrónica y por lo tanto el efecto de apantallamiento (parámetro k) provoca

que los electrones se mantengan más cerca provocando que la interacción de Coulomb de largo alcance domine sobre la energía cinética para el estado base y para el estado excitado. Sin embargo, aún es necesario optimizarlo para poder explorar distintos niveles de dopaje y distintas longitudes de hilos cuánticos para tener resultados mas cercanos a los reportados en la figura 5.10 y 5.13.

Conclusiones

En esta tesis se han expuesto los resultados obtenidos del estudio realizado sobre la síntesis de QWRs de GaAs/AlGaAs y su estudio teórico mediante un software comercial. Podemos mencionar los siguientes puntos como conclusiones principales:

1.- Se diseñó y se sintetizó una muestra de QWRs con las especificaciones necesarias para realizar estudios experimentales de la interacción electrónica en ellas. Lo anterior implicó diseñar un arreglo de impurificación mediante deltas-Si fuera del hilo de GaAs, realizando un cálculo autoconsistente de las ecuaciones de Poisson y Schrödinger (lo cual permitirá realizar el estudio de portadores en el hilo sin que existan defectos en él). También implicó ajustar los parámetros de crecimiento para encontrar una muestra con una corrugación suficientemente uniforme para tener hilos de más de una micra de longitud.

2.- Se caracterizó la superficie mediante AFM y se realizó un análisis ACF-2D. Lo anterior nos permitió concluir que existe un amplio margen de mejora en la fabricación de hilos cuánticos para tener arreglos más uniformes, es decir, con mayor longitud de correlación “ ξ ”. Los parámetros a ajustar se tienen bien identificados, lo que nos permitirá crecer muestras con una mejor uniformidad cuando se cuente con un equipo MBE en funcionamiento.

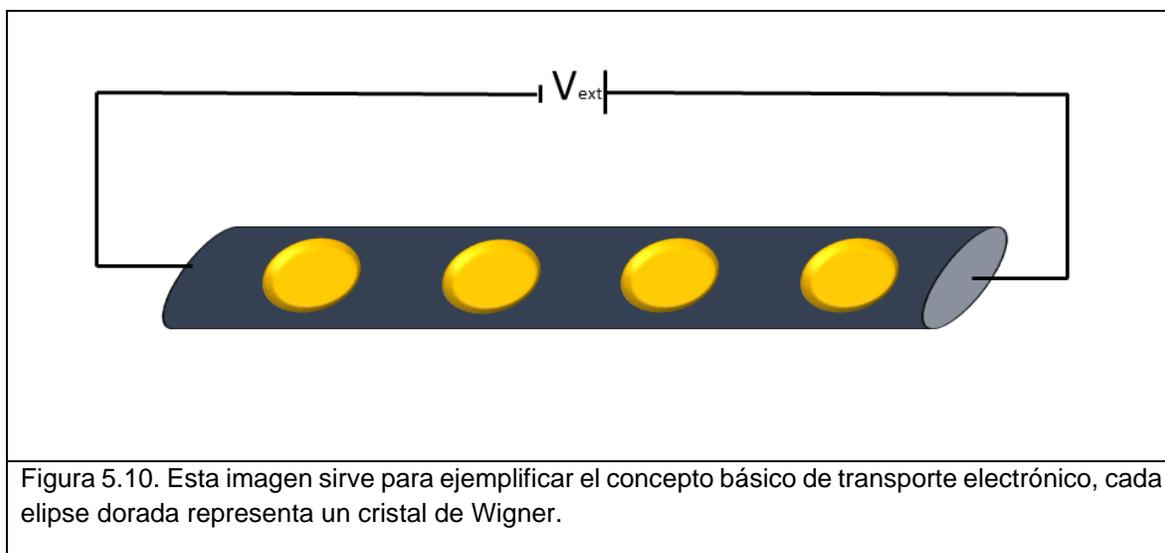
3.- De la caracterización óptica, se determinó la fracción molar de aluminio y se encontró un corrimiento hacia el azul en la señal de GaAs, posiblemente provocada por una tensión superficial intrínseca que provoca una fuerza efectiva (esta deformación elástica es la misma causante de la periodicidad que se genera en el facetamiento que da lugar a los hilos cuánticos [9, 33]). Además, se determinó la emisión del pozo cuántico en la región correspondiente a los hilos auto-organizados que se encuentran en la parte central del crecimiento.

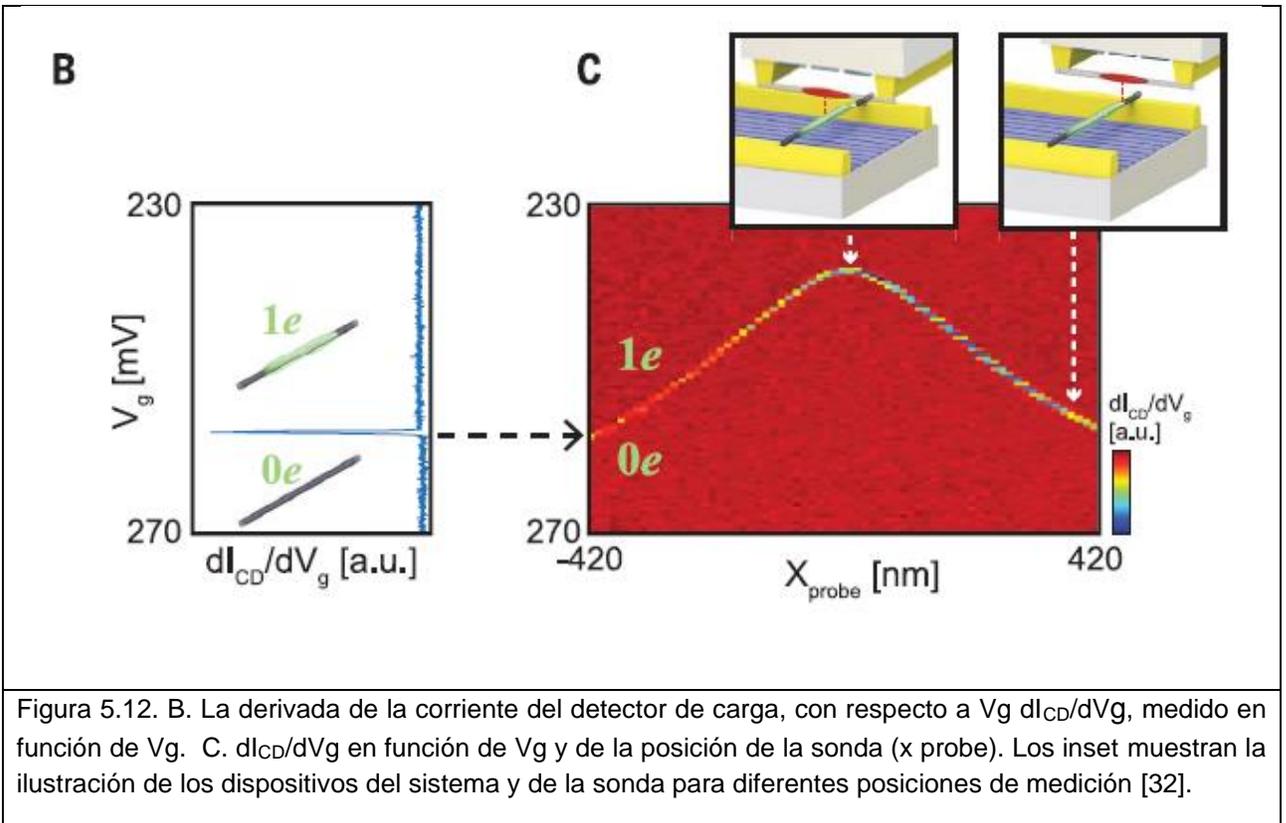
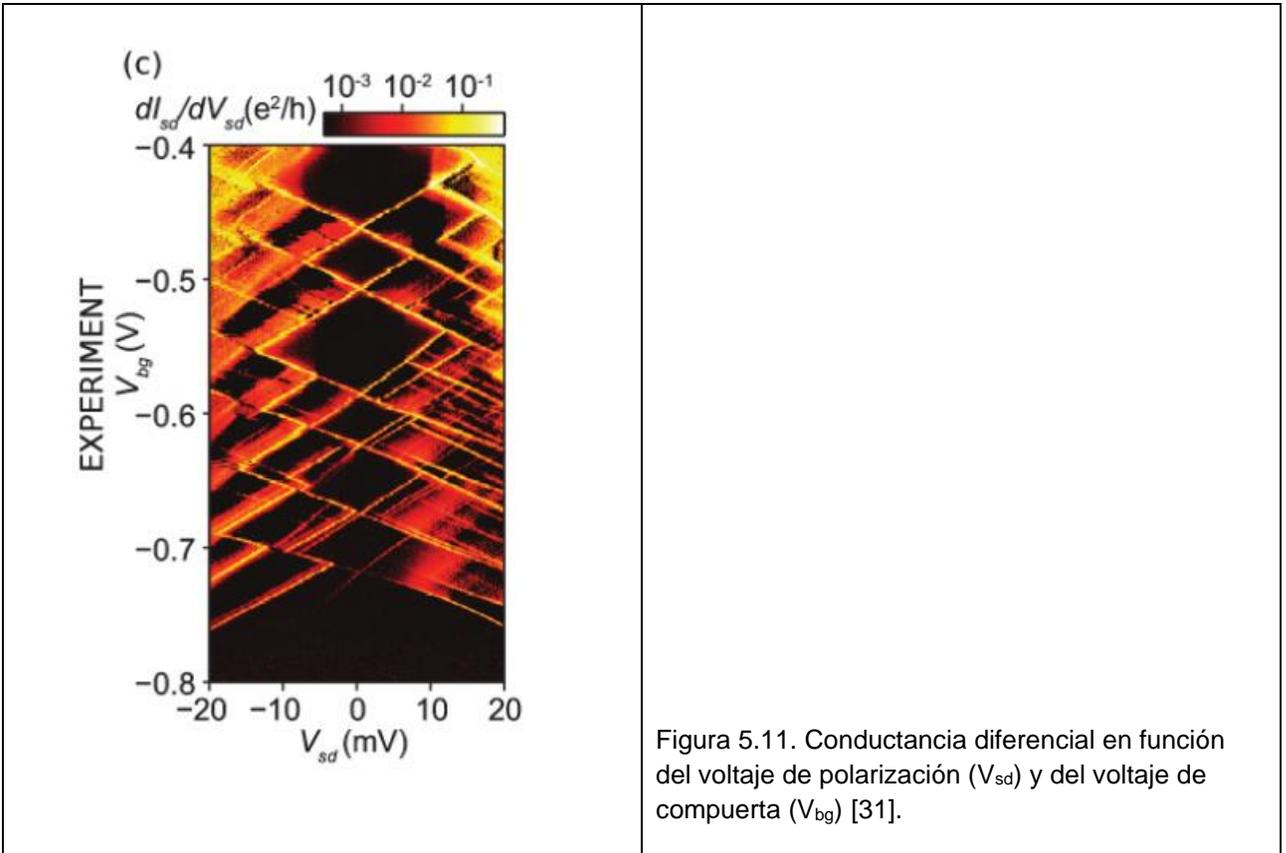
4.- Se realizó un desarrollo teórico utilizando el software comercial COMSOL, en el cual se logró incorporar la interacción de muchos electrones, mediante un potencial tipo Yukawa, en QWRs de $1\mu\text{m}$ y un dopaje de $\approx 10^{18} \text{ e/cm}^3$. Los resultados obtenidos se aproximan a modelos teóricos más complicados y con las publicaciones sobre formación del cristal de Wigner que hay reportadas. Este modelo tiene la gran ventaja de tener herramientas periféricas propias del software, que permiten realizar análisis extras de manera automatizada.

Trabajo Futuro

Los resultados presentados en esta tesis son importantes porque con el avance experimental que se tiene en la auto-organización de hilos cuánticos de GaAs para tener arreglos uniformes y de acuerdo con las bases teóricas que predicen la cristalización de Wigner en estas nanoestructuras [30,34,35] esto nos motiva a tener el objetivo de estudiar experimentalmente el transporte electrónico en hilos cuánticos que presenten la cristalización de Wigner, dado que no existen reportes de transporte electrónico que presenten este fenómeno además de que servirá para corroborar las bases teóricas aquí mencionadas. Además, se pretende optimizar el modelado teórico realizado en esta tesis para explorar otras longitudes y niveles de dopaje.

Las imágenes 5.11 y 5.12 muestran dos ejemplos de trabajos experimentales relacionados con la exploración del cristal de Wigner, en ambos casos utilizan el principio de conductancia diferencial dI/dV . Para obtener el diagrama característico de la imagen 5.11, utilizaron la técnica de espectroscopia de tunelamiento en un nanohilo de InSb, en cambio en la imagen 5.12 para obtener dichos espectros diseñaron un sistema que comprende un microscopio de sonda de barrido, donde un nanotubo de carbono actúa como la punta y se encuentra perpendicular al nanotubo bajo estudio.





Referencias

- [1] Arun Goud Akkala, Sebastian Steiger, Jean Michel D Sellier, Sunhee Lee, Michael Povolotskyi, Tillmann Christoph Kubis, Hong-Hyun Park, Samarth Agarwal, Gerhard Klimeck, James Fonseca, Archana Tankasala, Kuang-Chung Wang, Chin-Yi Chen (2015), "1D Heterostructure Tool," <https://nanohub.org/resources/1dhetero>. (DOI: 10.4231/D3QR4NR6C).
- [2] Wilson Yeung-Sy Su, et al. (2020). Temperature-dependent charge-carrier transport between Si- δ -doped layers and AlGaAs/InGaAs/AlGaAs quantum well with various space layer thicknesses measured by Hall-effect analysis. *Scientific Reports*, 10(1).
- [3] Singh, B., Deb, S., Mishra, G.P., Sarkar, S. (2009). Effects of Double Delta Doping on Millimeter and Sub-millimeter Wave Response of Two- Dimensional Hot Electrons in GaAs Nanostructures. *International Journal of Nuclear and Quantum Engineering*. 3(4).
- [4] Chico, L. et al. (1993). On the theory of GaAs-based quantum wells with external delta-doping. *J. Phys. Condens. Matter* 5(49).
- [5] Henini, M., (2013), Molecular beam epitaxy: from research to mass production, Waltham, USA: Elsevier Inc.
- [6] Guo-Qiang Hai, Nelson Studart and Francois M. Peeters. (1995). Electron mobility in two coupled δ layers. *Physical review B*, 52(15).
- [7] V. Umansky et al. (2009). MBE growth of ultra-low disorder 2DEG with mobility exceeding $35 \times 10^6 \text{cm}^2/\text{Vs}$. *Journal of Crystal Growth*, 311(7).
- [8] Assender, H., Bliznyuk, V., y Porfyraakis, K. (2002). How Surface Topography Relates to Materials' Properties. *Science*, 297(5583).
- [9] E. Cruz-H, et al. (2012). "Highly ordered self-assembled nanoscale periodic faceting in GaAs(631) homoepitaxial growth". *Appl. Phys.* 101(7).
- [10] Y. Higuchi et al. (2003). V/III ratio dependence of surface migration length of As₄ molecules during molecular beam epitaxy of GaAsP on (411)A GaAs substrates. *Journal of Crystal Growth* 251(1).
- [11] Gong, Z., Niu, Z., & Fang, Z. (2006). Corrugated surfaces formed on GaAs(331)A substrates: the template for laterally ordered InGaAs nanowires. *Nanotechnology*, 17(4).
- [12] Yazdanpanah, V. R., Wang, Z. M., & Salamo, G. J. (2003). Highly anisotropic morphologies of GaAs(331) surfaces. *Applied Physics Letters*, 82(11).

- [13] Méndez-Camacho et al. (2016). New orientations in the stereographic triangle for self-assembled faceting. *AIP advances*, 6(6).
- [14] Adachi, S. (2005). Properties of Group-IV, III_V and II_VI Semiconductors. Chichester, Inglaterra: John Wiley and Sons Ltd.
- [15] V.-H.Méndez-García, et al., (2015). Si-doped AlGaAs/GaAs (631)A heterostructures grown by MBE as a function of the As-pressure. *Journal of Crystal Growth*. 425.
- [16] J. Kundrotas et al. (2011). Photoluminescence characterisation of GaAs/AlGaAs structures designed for microwave and terahertz detectors. *Lithuanian Journal of Physics*, 51(4).
- [17] L Pavesi, M. Guzzi. (1994). Photoluminescence of Al_xGa_{1-x}As alloys. *J. Appl. Phys.*, 75(10).
- [18] Aspnes, D. E. (1976). GaAs lower conduction-band minima: Ordering and properties. *Physical Review B*, 14(12).
- [19] Vignaud et al. (1998). Photoluminescence study of the interface in type II InAlAs–InP Heterostructures. *J. Appl. Phys.* 84 (4).
- [20] Neimantas vainorius et al. (2014) Observation of type-II recombination in single wurtzite/zinc-blende GaAs heterojunction nanowires. *Physical review B*, 89(165423).
- [21] Timothy H. Gfroerer. (2006). Photoluminescence in Analysis of Surfaces and Interfaces. Encyclopedia of Analytical Chemistry. John Wiley & Sons, Ltd.
- [22] E. Cruz-Hernández et al. (2012). Photoluminescence study of self-assembled GaAs quantum wires. *J. Vac. Sci. Technol. B* 30(2)
- [23] Prokhor A. Alekseev (2020). Effect of the Uniaxial Compression on the GaAs Nanowire Solar Cell. *Micromachines*, 11(581).
- [24] Abdullah Kahraman et al. (2016). Impurity-free quantum well intermixing for large optical cavity high-power laser diode structures. *Semicond. Sci. Technol*, 31(8).
- [25] Voss et al. (2013). Blue shift of GaAs micropillars strained with silicon nitride. *Appl. Phys. Lett.*, 103(21).
- [26] L. Zamora-Peredo et al. (2005) Photoreflectance investigations of HEMT structures grown by MBE. *Journal of Crystal Growth*, 278 (1).
- [27] J. Misiewicz et al. (2003). Semiconductor heterostructures and device structures investigated by photoreflectance spectroscopy. *Materials Science*, 21(3).
- [28] Sang Jo Lee et al. (2015). Temperature Dependence of the Photovoltage from Franz-Keldysh Oscillations in a GaAs p+-i-n+ Structure. *Journal of the Korean Physical Society*, 67(5).

- [29] E. Cruz-Hernández et al. (2010). Optical transitions in AlGaAs/GaAs quantum wires on GaAs(631) substrates studied by photoreflectance spectroscopy. *Physica E* 42.
- [30] Reyna méndez-camacho et al. (2017). Wigner crystallization in quantum wires within the Yukawa approximation. *Physical review B*, 95(8).
- [31] L. H. Kristinsdóttir, et al. (2011). Signatures of Wigner localization in epitaxially grown nanowires, *Phys. Rev. B*, 83 041101(R).
- [32] Shapir et al. (2019). Imaging the electronic Wigner crystal in one dimensión. *Science*, 364(6443).
- [33] Shchukin, V.A., Ledentsov N.N. y Bimberg, D. (2004), Epitaxy of nanostructures. New York, USA: Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [34] Reyna méndez-camacho et al. (2019). Many-electron effective potential in low-dimensional nanostructures: Towards understanding the Wigner crystallization *Physical review B*, 100(8).
- [35] Reyna méndez-camacho et al. (2020). Many-electron redistribution in n-doped semiconductor nanostructures under external electric field by using a center-of-mass approach. *Physical review B*, 102(3).

6. ANEXO

6.1. Determinación de velocidades de crecimiento

La técnica de caracterización RHEED fue utilizada para monitorear el crecimiento e indagar posibles reconstrucciones superficiales y también para determinar las velocidades de crecimiento de los compuestos III-V.

Para obtener las velocidades de AlGaAs y GaAs, se crecieron películas de estos compuestos sobre un sustrato GaAs(100) a la temperatura de 590°C; utilizando los siguientes parámetros: $BEP_{As} = 3.23 \times 10^{-6}$ Torr, $BEP_{Ga} = 1.16 \times 10^{-7}$ Torr, $BEP_{Al} = 4.27 \times 10^{-8}$ Torr, $T_{As} = 125^\circ\text{C}$, $T_{Ga} = 900^\circ\text{C}$ y $T_{Al} = 1015^\circ\text{C}$. El flujo del Arsénico se mantuvo constante debido a que en la temperatura en la que se encuentra el sustrato ($T_{sus} = 590^\circ\text{C}$) el Arsénico se empieza a desorber de la superficie. Por lo tanto, para crecer GaAs solo se abrió la celda de Galio en cambio para crecer AlGaAs se abrieron las celdas de Ga y Al al mismo tiempo. A partir de los patrones RHEED generados por estas películas se obtuvieron las gráficas mostradas en las figuras 6.1 y 6.2 que muestran las oscilaciones (intensidad versus tiempo) generadas durante el crecimiento epitaxial.

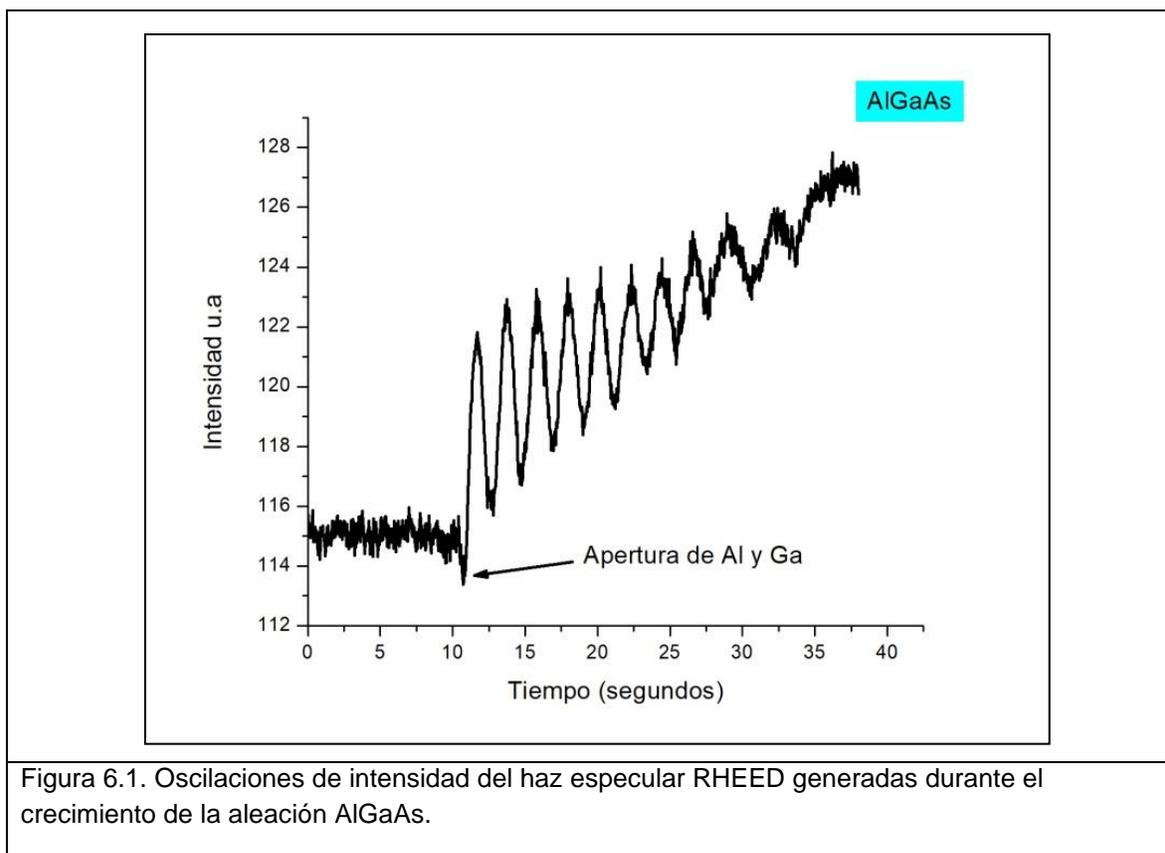
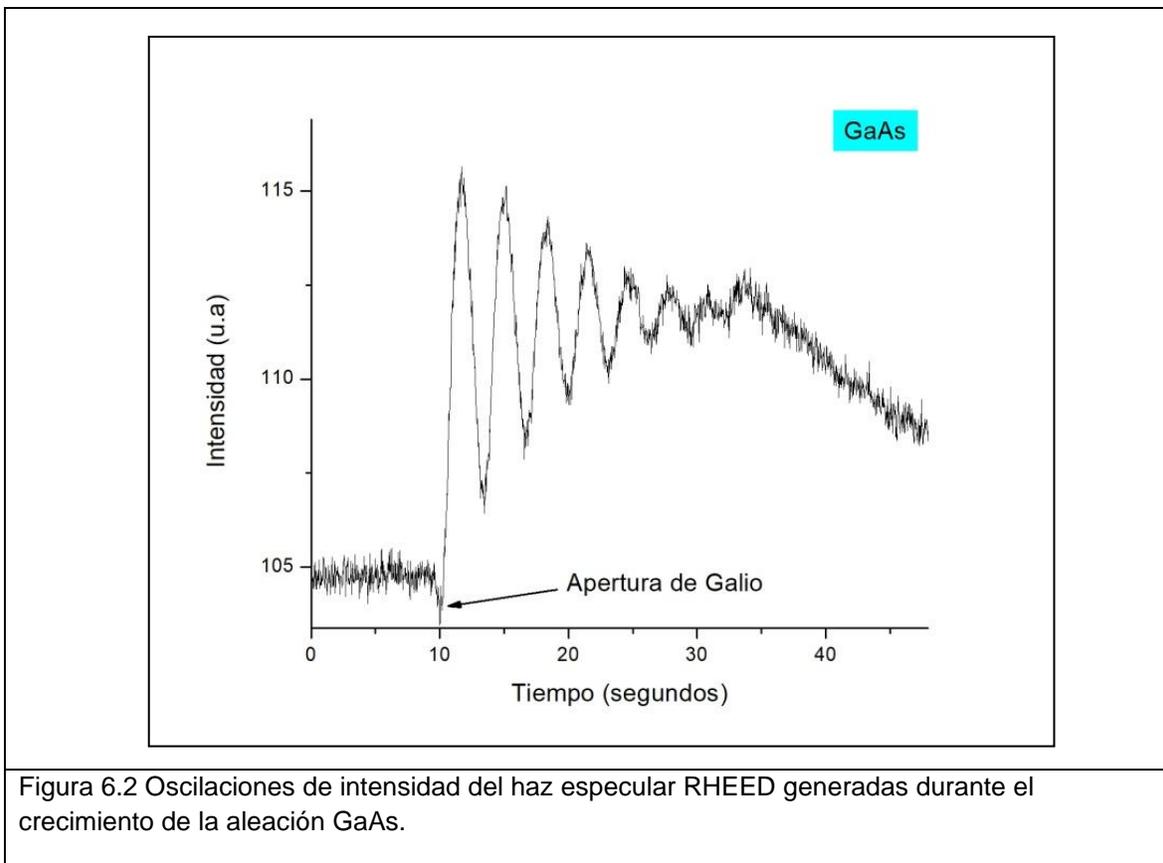


Figura 6.1. Oscilaciones de intensidad del haz especular RHEED generadas durante el crecimiento de la aleación AlGaAs.

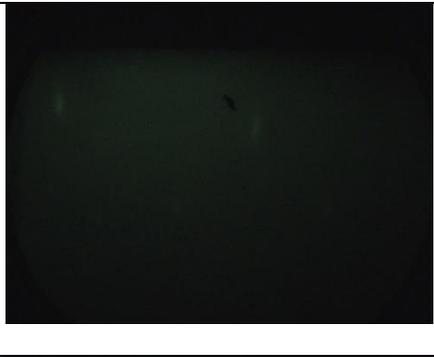
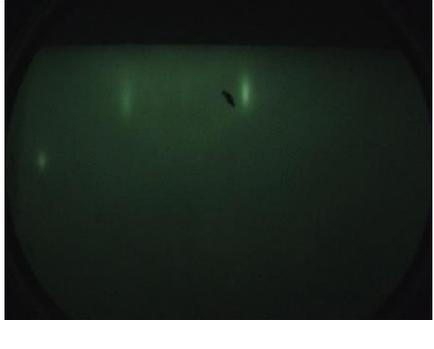


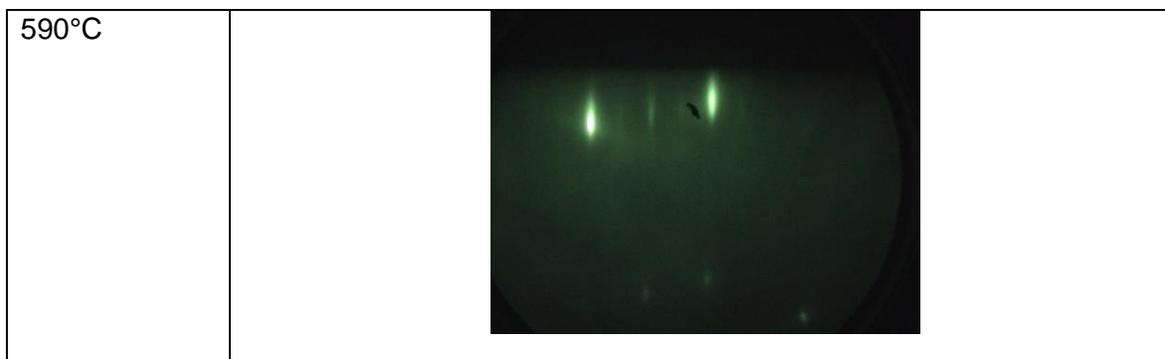
Se observa que la velocidad de crecimiento del AlGaAs es mayor que la de GaAs debido a que presenta más oscilaciones en un mismo intervalo de tiempo. El análisis de los máximos y mínimos de las oscilaciones permitió determinar las velocidades de crecimiento con exactitud, las velocidades obtenidas fueron: AlGaAs= 0.48 ML/s, GaAs=0.31 ML/s.

6.2. Desorción de óxidos

La tabla 6.1 muestra los patrones RHEED obtenidos en la etapa de desorción de óxidos.

Tabla 6.1. Evolución de los patrones RHEED obtenidos en la etapa de desorción	
Temperatura	Muestra GaAs/AlGaAs

520°C			
550°C			
570°C			
580°C			



De acuerdo al patrón RHEED obtenido a una temperatura de 520°C nos indica la presencia de una capa de óxido que cubre el sustrato debido a la dispersión difusa generada cuando el haz de electrones interacciona con el óxido de carácter amorfo, posteriormente hasta cuando se aumentó la temperatura a 570°C y 580°C aparecieron spots aún con un fondo difuso lo cual era indicativo de que empezaba a ocurrir la difracción generada por la estructura cristalina del GaAs pero aún con presencia de óxidos sobre la superficie generando el fondo difuso. En cambio cuando se aumentó la temperatura a 590°C y después de 5 minutos se observó un patrón de difracción bien definido, en este caso se trata de una reconstrucción superficial 2x, la cual es característica de una superficie limpia para sustratos GaAs(631) [1] [2]. Se utilizó como referencia y punto de monitoreo el ángulo azimutal (elegido por conveniencia como Az 0°) donde se presentó esta reconstrucción.

Referencias

- [1] Méndez, V. H., Ramírez, M. G., Gorbachev, A., Cruz, E., Rojas, J. S., Martínez, I., Zamora, L. y López, M. (2008). Molecular beam epitaxy growth of AlGaAs on the (631)-oriented GaAs substrates. *J. Vac. Sci. Technol. B.*, 26(3).
- [2] Cruz-Hernández et al. (2005). Molecular Beam Epitaxial Growth of GaAs on (631) Oriented Substrates. *Japanese Journal of Applied Physics*, 44(51).