



Memorias del V Taller Nacional de

Física y Ciencia de Materiales

para Estudiantes de Posgrado

**Instituto de Física
Universidad Autónoma de Puebla
13 al 15 de mayo del 2002**

**Editores
F. Pérez Rodríguez
J. A. Méndez Bermúdez
C. Romero Salazar**

Presentación

Este libro contiene artículos en extenso de trabajos de investigación que fueron presentados en el V Taller Nacional de Física y Ciencia de Materiales para Estudiantes de Posgrado (TNFCM-V), del 13 al 15 de mayo del 2002 en la ciudad de Puebla. A diferencia de los talleres anteriores, en el TNFCM-V se ha incluido el área de Ciencia de Materiales cuyo desarrollo en nuestro país se ha intensificado notablemente en los últimos años. Esta ampliación en los tópicos del evento permitió que estudiantes de posgrados de una variedad mayor de disciplinas afines pudieran participar.

Cumpliendo con el objetivo principal del taller, el cual consiste en que los estudiantes adquieran experiencia en la preparación, presentación y difusión de sus trabajos científicos, en esta ocasión se incluyó la publicación de artículos en extenso, elegidos a través de un proceso de arbitraje. Tengo la seguridad de que esta nueva actividad ha sido de gran beneficio para los estudiantes y que se mantendrá en los siguientes talleres.

Aprovecho esta oportunidad, para agradecer el apoyo otorgado por el Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla para la realización del TNFCM-V. Agradezco también a los estudiantes de doctorado, J. A. Méndez Bermúdez y C. Romero Salazar por su participación en el comité organizador, así como a los investigadores quienes revisaron los artículos en extenso que forman parte de este libro.

F. Pérez Rodríguez
Coordinador del TNFCM-V

Contenido

Presentación	iii
Contenido	v
Artículos en extenso	1
1. Sensor láser con rejillas de Bragg interrogado por la frecuencia de espaciado intermodal	3
Manuel May Alarcón, <i>et al</i>	
2. Crecimiento y caracterización de heteroestructuras AlGaAs/GaAs utilizadas en patrones de resistencia eléctrica basados en el efecto Hall cuántico.....	8
Luis Zamora Peredo, <i>et al</i>	
3. Estudio de películas SRO y su potencial uso como sensores de radiación	14
Francisco Flores García, <i>et al</i>	
4. Crecimiento y caracterización de puntos cuánticos de InAs sobre submonocapas de Si en GaAs (100)	21
Nadia Saucedo Zeni, <i>et al</i>	
5. Mediciones de propiedades eléctricas y ópticas de estructuras MIS con películas de Metallo-ftalocianinas (Me-Pc) como aislante.....	28
Guillermo Jiménez de los Santos, <i>et al</i>	
6. Aleaciones metálicas binarias CuX (X=Au, Pd, Pt, Rh): un estudio de primeros principios	35
Alejandro Bautista Hernández, <i>et al</i>	

7.	Modelado y caracterización eléctrica de la estructura Al/SRO/Si	41
	José Alberto Luna López, <i>et al</i>	
8.	Modelo de Bean generalizado para superconductores isotrópicos bajo campos magnéticos cruzados	51
	Carolina Romero Salazar	
9.	Detección subterránea de rayos cósmicos de alta energía en el CERN.....	55
	Sergio Román López, <i>et al</i>	
10.	Crecimiento y caracterización de aleaciones $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ obtenidas por pulverización catódica.....	61
	Héctor Pérez Ladrón de Guevara, <i>et al</i>	
11.	Caracterización estructural de aleaciones $\text{GaAs}_x\text{N}_{1-x}$ y $\text{GaP}_x\text{N}_{1-x}$ por difracción de rayos X de alta resolución	66
	Irving Paul Vargas Cruz, <i>et al</i>	
12.	Caracterización de pozos cuánticos múltiples de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs por medio de difracción de rayos X de alta resolución, fotoluminiscencia y fotorreflectancia.....	70
	Joel Ernesto Montaña Rivas, <i>et al</i>	
13.	Topografía y termodinámica de nanocúmulos en la superficie de energía potencial.....	74
	Aurelio Támez, <i>et al</i>	
14.	Comportamiento del equilibrio líquido-vapor de mezclas fuertemente inmiscibles.....	78
	José Antonio Moreno Razo, <i>et al</i>	
15.	Propiedades electrónicas de superficies semiconductoras ideales	84
	Xóchitl López Lozano, <i>et al</i>	
16.	Estudio de las propiedades eléctricas de la interfaz silicio-óxido de silicio nitrado obtenido térmicamente con óxido nítrico	89
	Adán Luna Flores, <i>et al</i>	
17.	Difusión térmica de partículas Brownianas interactuantes.....	94
	Omar A. Hernández Flores	

18.	Dispersión caótica de partículas clásicas en una guía de ondas con impurezas	98
	Gustavo Orellana Rivadeneyra, <i>et al</i>	
19.	Frecuencia de relajación superficial de excitones en películas delgadas	103
	Nicolás Atenco Analco	
20.	Acoplamiento fotón-fonón en superficies de semiconductores: Método de expansión en modos de bulto	109
	Fernando Luis Pérez Sánchez	
21.	Estudio preliminar de la estructura electrónica del compuesto CeFeGe ₃	113
	Ernesto Chigo Anota, <i>et al</i>	
22.	Nanopartículas bimetálicas coloidales de Cu/Pd y Ni/Pd recubiertas con polímero PVP: Estudio estructural a través de campos de fuerza	119
	Mirna López Fuentes, <i>et al</i>	
23.	Producción de entropía de un sistema de partículas esferocilíndricas en suspensión	125
	Jorge Mulia, <i>et al</i>	
24.	Respuesta óptica de magnetoexcitones en un pozo cuántico doble	130
	Benito Flores Desirena	
25.	Crecimiento por DBQ y caracterización de películas de CdSe con Cd/Se<1	135
	María Elena Hernández Torres, <i>et al</i>	
26.	Estudios de la adsorción de Cl, Cl ₂ y HCl sobre la superficie del Ge(001).....	140
	Ariadna Sánchez Castillo, <i>et al</i>	
27.	Concentración de radón-222 en Zacatecas: monitoreo con detectores de estado sólido.....	144
	María Luisa García Betancourt, <i>et al</i>	

28. Contraparte clásica de la matriz de probabilidades de dispersión y *funciones de onda* clásicas para billares bidimensionales caóticos abiertos..... 152
José Antonio Méndez Bermúdez, *et al*
29. Entropía y escalas de tiempo para la termalización de partículas en líquidos 158
Daniel Osorio González, *et al*
30. Cálculo de la estructura electrónica de la superficie (001) de MgO 164
María Luisa Roxana Licona, *et al*
31. Cálculos de primeros principios de la adsorción de metales del grupo III en Si (001) a temperaturas altas 167
Jorge Cotzomi Paleta, *et al*
32. Estructura de bandas fotónica para una fibra óptica de cristal fotónico..... 171
Briseida Meneses Alviso, *et al*
33. Cálculo de la concentración de impurezas incorporadas en una película delgada 176
Alberto Canizo Cabrera, *et al*

ARTÍCULOS EN EXTENSO

1. Sensor láser con rejillas de Bragg interrogado por la frecuencia de espaciamiento intermodal

M. May-Alarcón, E. A. Kuzin, R. A. Vázquez-Sánchez

*Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica, Apartado postal 51 y 216,
C.P. 72000, Puebla, Pue. México*

Resumen

Investigamos la frecuencia de espaciamiento intermodal a la salida de un láser de fibra dopada con erbio. Este sensor láser es formado por una rejilla de Bragg usada como referencia en un extremo de la cavidad y varias rejillas de Bragg usadas como sensores en el otro extremo. Cuando las rejillas sensores son estiradas se forma una excitación láser cuando alcanzan la longitud de onda de reflexión de la rejilla de referencia, además una frecuencia de espaciamiento intermodal es generada entre cada rejilla sensor y la de referencia. Con cavidades tan largas como 8.67km podemos colocar varias rejillas sensores con una separación mínima de 25m, esta separación es determinada por el ancho banda de la frecuencia intermodal generada por la cavidad. Un ancho de banda promedio de 250Hz fue encontrado experimentalmente.

Los sensores de rejillas de Bragg están actualmente siendo desarrollados para detectar un amplio rango de parámetros físicos tales como temperatura [1], tensión [2,3] y presión. Empleando rejillas de Bragg con amplificadores de fibra dopada con erbio es posible hacer sensores láser de fibra [4,5]. En este trabajo reportamos el desarrollo de un sensor láser de fibra multipunto el cual es interrogado por la frecuencia de espaciamiento intermodal generada por una cavidad, la cual es formada por una rejilla de referencia y una rejilla sensor que esté siendo estirada. En este experimento medimos la frecuencia de espaciamiento intermodal entre los modos longitudinales del láser con un analizador de radio frecuencia (*RF*). Los modos longitudinales son igualmente separados por la frecuencia de espaciamiento intermodal determinada por:

$$\mathbf{n}_F = \frac{c_0}{2nL_0} \quad (1)$$

donde c_0 es la velocidad de la luz, n el índice de refracción y L_0 es la longitud de la cavidad.

Cada rejilla de Bragg localizada remotamente que es estirada genera un laseo con una frecuencia de espaciamento intermodal específica determinada por la longitud de la cavidad. Para hacer un sensor láser de fibra multipunto es necesario conocer el ancho de banda de la frecuencia intermodal y sus armónicos generados por la cavidad, ya que esto nos permite colocar varias rejillas sensores con una mínima separación entre ellas sin que haya traslape de frecuencias.

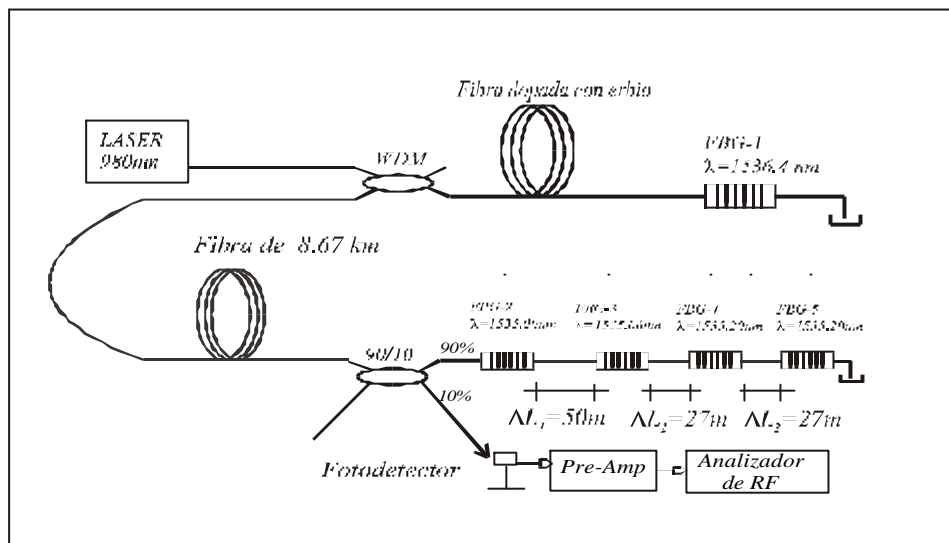


Figura 1. Arreglo experimental. La longitud de la cavidad es de 8.67km. Las rejillas de Bragg trabajan tanto como reflectores como sensores

En la figura 1 se muestra el arreglo experimental utilizado. El láser de fibra es bombeado con un láser de semiconductor a una longitud de onda de 980nm. La cavidad láser es formada por dos rejillas de Bragg y la fibra dopada con erbio es el medio amplificador. La longitud de la cavidad es determinada por la suma de la fibra dopada y la fibra estándar de 8.67km, la última es la que determina la longitud de la cavidad porque es mucho mayor que la primera. Para un sensor puntual, una cavidad es formada por la rejilla de referencia (FBG-1) y la rejilla sensor (FBG-2), mientras que para versión multipunto son colocadas varias rejillas en serie separadas por una longitud mínima de fibra estándar. Las rejillas usadas como sensores pueden tener la misma longitud de onda de reflexión entre ellas pero ésta debe ser menor que la longitud de onda de reflexión de la rejilla de referencia. Para este experimento la

rejilla de referencia tiene una longitud de onda de reflexión de $1536.4nm$ mientras que para las rejillas sensores son $FBG-2=FBG-3=1535.06nm$ y $FBG-4=FBG-5=1535.2nm$. Por lo tanto cuando una de las rejillas sensor es estirada, su longitud de onda se desplaza hasta alcanzar la longitud de onda de reflexión de la rejilla de referencia y entonces una generación láser es llevada a cabo. La salida del sistema es tomada por una terminal del acoplador 90/10 por un fotodetector de germanio, es amplificada y procesada por el analizador de RF.

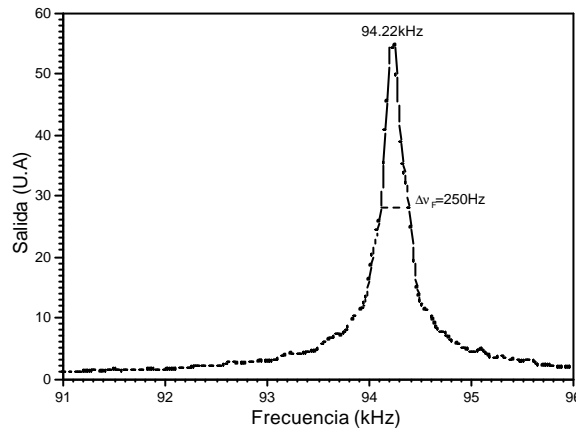


Figura 2. El octavo pico está centrado a $94.22kHz$ y tiene un ancho de banda de $250Hz$

En la figura 2 se muestra el espectro de salida del octavo armónico de la frecuencia fundamental. Aquí se puede observar que el octavo armónico está centrado a una frecuencia de $94.22kHz$ la cual es generada por una frecuencia de espaciamento intermodal experimental de $11.77kHz$. El ancho de banda del octavo armónico es aproximadamente de $250Hz$ y fue medido con el criterio del ancho total a la mitad del máximo (*FWHM*). El ancho de banda obtenido experimentalmente fue usado para calcular la longitud mínima de fibra, ya que colocando una segunda rejilla sensor (*FBG-3*) se genera una cavidad más larga la cual a su vez genera una frecuencia intermodal menor con respecto a la rejilla sensor *FBG-2*. La longitud mínima de fibra entre dos rejillas sensores para distinguir dos frecuencias sin traslape es determinada por:

$$\Delta L_0 = \frac{2nL_0^2}{Nc_0} \Delta n_F \quad (2)$$

donde $\Delta\nu_F$ es el ancho de banda de la frecuencia intermodal para el armónico N analizado. Realizando los cálculos (con $N=8$, $n=1.468$, $L_0=8,67\text{km}$ y $\Delta n_F=250\text{Hz}$) encontramos que la longitud mínima de fibra que debe ser colocada entre dos rejillas de 23m . Con esta longitud mínima podemos distinguir dos picos cerca del octavo armónico sin que haya traslape de las frecuencias intermodales.

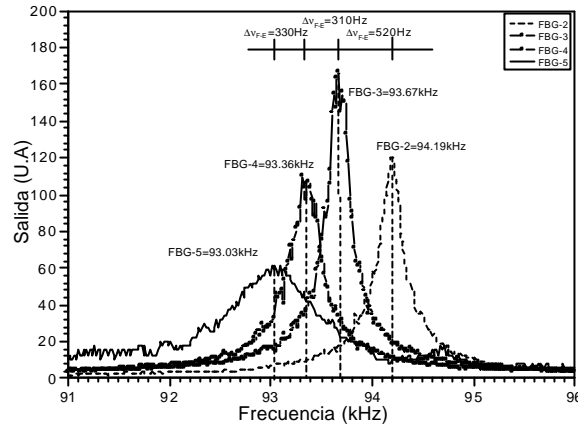


Figura 3. Cuatro picos son mostrados cuando 4 rejillas son estiradas en el experimento

En la figura 3 se muestra la gráfica donde las cuatro rejillas sensoras son estiradas para formar cavidades diferentes generando así 4 frecuencias de espaciamiento intermodal las cuales pueden ser perfectamente distinguidas en el octavo armónico con una diferencia de frecuencia mayor o igual a un ancho de banda de 250Hz . La rejilla *FBG-2* está separada por 50m de fibra estándar de la rejilla *FBG-3*, esta diferencia en longitud genera una diferencia en frecuencia teórica $\Delta\nu_{F,T}=546\text{Hz}$ la cual se obtiene despejando $\Delta\nu_F$ de la ecuación 2. En la gráfica se observa que la diferencia de frecuencia intermodal experimental es de 520Hz . La diferencia entre la frecuencia teórica y la experimental es debida principalmente a la resolución del analizador de RF (15.625Hz). Lo mismo ocurre para la separación entre las rejillas *FBG-3* y *FBG-4*, y para *FBG-4* y *FBG-5*.

En conclusión, hemos construido un sensor láser de fibra colocando un amplificador óptico dentro de una cavidad formada por dos rejillas de Bragg. La frecuencia de espaciamiento intermodal fue inversamente proporcional a la longitud de la cavidad. Comparando la frecuencia de espaciamiento intermodal teórica (11.78kHz) con la experimental (11.77kHz) encontramos que las dos concuerdan muy bien. El ancho de banda de la frecuencia intermodal y de los armónicos fue encontrado

experimentalmente y tuvo un promedio de 250Hz . Este ancho de banda impuso un límite en frecuencia para calcular la mínima longitud de fibra pasiva entre dos rejillas sensores consecutivas, la cual fue de 23m . La longitud mínima de fibra entre rejillas puede ser reducida si se analizan picos de mayor orden con otro analizador con ancho de banda más grande. Con distancias de separación de 50m y 27m fueron colocadas tres rejillas de Bragg para hacer un sensor multipunto con cuatro sensores.

Agradecimientos. Los estudiantes Manuel May Alarcón y Ruben A. Vázquez Sánchez agradecen al CONACyT por el apoyo económico otorgado a través de sus becas.

Referencias

- [1] A. Othonos, A.T. Alavie, S. Melle, S.E. Karr and R.M. Measures. *Opt. Engineer.* Vol. 32, No 11, 1993, 2841-2846.
- [2] A.D. Kersey and W.W. Morey. *Opt. Lett.* Vol. 29, No 11, 1993, 964-966.
- [3] A.D. Kersey and W.W. Morey. *Electronics Lett.* Vol. 29, No 1, 1993, 112-114.
- [4] G.A. Ball, W.W. Morey and P.K. Cheo. *IEEE Photon. Technol. Lett.* Vol. 5, No 2, (1993), 267-270.
- [5] T.A. Alavie, S.E. Karr, A. Othonos and R.M. Measures. *IEEE Photon. Technol. Lett.* Vol. 5, No. 9, 1993, 1112-1114.

2. Crecimiento y caracterización de heteroestructuras AlGaAs/GaAs utilizadas en patrones de resistencia eléctrica basados en el efecto Hall cuántico

L. Zamora-Peredo, N. Saucedo-Zeni, A. Lastras-Martínez, y V. H. Méndez-García

Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Karakorum 1470, Lomas 4ª Sección, San Luis Potosí, S.L.P., México

Resumen

En este trabajo se reporta el avance alcanzado en la optimización de heteroestructuras AlGaAs/GaAs que contienen un gas bidimensional de electrones (2DEG) de alta movilidad las cuales son ampliamente utilizadas como patrones estándar de resistencia eléctrica basados en el efecto Hall cuántico. Las estructuras crecidas y estudiadas en este trabajo son heteroestructuras donde se pone en contacto n-AlGaAs y GaAs para formar un 2DEG justo en la interfase de esta heterounión. La movilidad de los electrones que forman este gas es limitada por la interacción coulombiana que experimentan los electrones del gas y por los efectos de dispersión causados por las impurezas ionizadas de la barrera (n-AlGaAs). La técnica de dopaje modulado sugiere crecer una capa sin dopar (capa espaciadora) de AlGaAs en la interfase con el fin de disminuir los efectos de dispersión y modular la difusión de los electrones de la barrera hacia el gas bidimensional. En este trabajo reportamos el estudio de heteroestructuras AlGaAs/GaAs con diferentes espesores de la capa espaciadora, las cuales fueron caracterizadas mediante fotorreflectancia y mediciones Hall a 77 K.

Introducción

Las heteroestructuras AlGaAs/GaAs que contienen un gas bidimensional de electrones (2DEG) de alta movilidad en una de sus interfases, son ampliamente utilizadas como patrones estándar de resistencia eléctrica debido a que tienen la estructura apropiada para presentar el efecto Hall cuántico (QHE) [1].

Al igual que el efecto Hall clásico, el QHE está basado en determinar el voltaje perpendicular a la dirección de una corriente que es aplicada a una película delgada inmersa en un campo magnético perpendicular a la corriente y a la superficie de la muestra, sólo que para el caso cuántico las exigencias son extremas, es decir, la muestra debe ser efectivamente un sistema bidimensional, las temperaturas son bajas (~ 2 K) y los valores de campo magnético son intensos (~ 12 T). Bajo estas condiciones la resistencia Hall toma valores cuantizados dados por la expresión: $R_H = h/ie^2$, donde i es un número entero, h es la constante de Planck y e la carga del electrón. Puesto que el valor de R_H depende de constantes físicas bien establecidas (h, e), un dispositivo basado en este fenómeno puede servir como estándar de resistencia eléctrica invariable a parámetros externos como: presión, humedad, tiempo, entre otros.

Puesto que se necesitan valores altos de movilidad en estas heteroestructuras, la calidad cristalina de las películas debe ser muy buena, debido a que los defectos o cualquier impureza residual puede ser un centro dispersor y afectar la movilidad electrónica del 2DEG o canal. Una de las técnicas de crecimiento que tiene la capacidad de ofrecer excelente calidad es la técnica de epitaxia por haces moleculares (MBE), donde se tiene un cuidadoso control sobre la pureza de los materiales, la calidad de las interfaces y la rugosidad superficial de las películas.

Las estructuras crecidas y analizadas en este trabajo consisten básicamente de una heterounión n-AlGaAs/GaAs en la cual, al ponerse en contacto, existe difusión de portadores de la barrera (n-AlGaAs) hacia la interface con GaAs, donde son confinados por un potencial triangular formado por la diferencia en el nivel de Fermi de estos materiales. La movilidad de los electrones confinados en la interface es afectada por las impurezas ionizadas localizadas en la barrera y por la misma interacción entre ellos. La técnica de dopaje modulado, propuesta por Dingle y Störmer [2], sugiere la utilización de una capa espaciadora de AlGaAs en la interface de la estructura para modular la difusión de portadores y disminuir los efectos de dispersión originados por las impurezas ionizadas.

En este trabajo presentamos el estudio de heteroestructuras AlGaAs/GaAs con capas espaciadoras de diferente espesor (60 Å, 120 Å y 180 Å), caracterizadas mediante fotorreflectancia (FR) a temperatura ambiente y mediciones de efecto Hall a 77 K.

Detalles experimentales

Las heteroestructuras AlGaAs/GaAs fueron crecidas mediante la técnica de MBE (en un sistema Riber 32P) sobre substratos semi-aislantes de GaAs a una temperatura de crecimiento de 600°C. La estructura de las muestras consiste de una capa colchón de GaAs de 3 μm de espesor, seguida por una capa espaciadora de AlGaAs de espesor Σ (ver tabla 1), después se depositó 1000 Å de AlGaAs dopado con Si y finalmente 100 Å de n-GaAs para evitar la oxidación del AlGaAs. La Tabla 1 presenta los valores de la concentración de Al x y el espesor de la capa espaciadora Σ para cada muestra, así como de otros parámetros determinados por la caracterización óptica y eléctrica que se analizarán más adelante. Las mediciones de FR a temperatura ambiente fueron hechas bajo un arreglo experimental típico^[3] y con un láser de HeCd (línea de emisión en 425 nm) de 5 mW como fuente moduladora. La movilidad electrónica fue evaluada por mediciones de efecto Hall clásico a 77 K realizadas con una corriente de 0.1 mA en un campo magnético de 2000 gauss.

Resultados y discusión

La estructura esquemática de las muestras y su respectivo diagrama de bandas, se muestran en la Figura 1. La diferencia entre las brechas de energía entre el GaAs y AlGaAs causan la discontinuidad en las bandas que da origen a un pozo cuasi-triangular de potencial justo en la interface entre estas dos capas donde los electrones provenientes del n-AlGaAs son restringidos a moverse en un plano bidimensional paralelo a la interface, formando un 2DEG.

Como lo muestra la Tabla 1, se crecieron dos muestras con una capa espaciadora de 60 Å de espesor (M1 y M2), pero con diferente concentración de aluminio ($x = 0.30$). Mientras que otras dos (M3 y M4) con la misma concentración que M2, pero el espesor de la espaciadora es de 120 Å y 180 Å, respectivamente. El nivel de dopaje fue el mismo para las cuatro muestras ($N = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). De las mediciones Hall a 77 K se encontró que la muestra con menor movilidad μ fue M1 (70 000 cm²/V.seg) y la que presentó el mayor valor (120 000 cm²/V.seg) fue M3.

La profundidad del pozo depende de la discontinuidad de la banda de conducción y ésta a su vez de la brecha de energía del AlGaAs y por lo tanto de la concentración de Al; basados en lo anterior podemos decir que M2, M3 y M4 tienen un pozo triangular de potencial con las mismas características y que lo único que los hace diferentes es la población de sus niveles, para M2 la población es mayor debido a que tiene la capa espaciadora de menor espesor, M3 tiene un nivel de población intermedia y M4 es la

muestra con menor población en el 2DEG. De los valores de movilidad podemos observar que una espaciadora de 120 Å es la que mejor modula la población en el pozo y minimiza la interacción coulombiana entre los electrones del canal y los efectos de dispersión con las impurezas del AlGaAs, para estos niveles de dopaje y concentración de aluminio. La muestra M1 tiene un pozo de menor profundidad y la espaciadora con menor espesor, por tanto una sobrepoblación de electrones que afecta la movilidad del gas, es por eso que tiene el menor valor de movilidad electrónica (70 000 cm²/V seg).

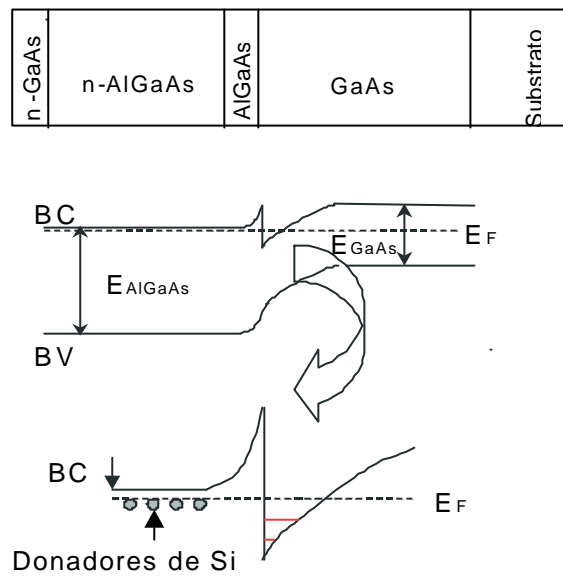


Figura 1. Estructura de las muestras estudiadas en este trabajo y su respectivo diagrama de bandas. El 2DEG se forma en un pozo quasi-triangular de potencial

	Σ (Å)	Al (x)	N (cm ⁻³)	μ (cm ² /V seg)
M1	60	0.27	1x10 ¹⁸	70 000
M2	60	0.30	1x10 ¹⁸	105 000
M3	120	0.30	1x10 ¹⁸	120 000
M4	180	0.30	1x10 ¹⁸	100 000

Tabla 1. Características de las muestras: espesor de la capa espaciadora Σ , concentración de Al x, nivel de dopaje N y la movilidad electrónica del 2DEG μ a 77 K

La Figura 2 muestra los espectros de FR a temperatura ambiente correspondiente a las muestras estudiadas en este trabajo, donde podemos destacar las regiones de energía asociadas al GaAs (~ 1.42 eV) y AlGaAs (1.8 eV). La zona correspondiente al GaAs presenta una señal muy estrecha, evidencia de una buena calidad cristalina en las películas. Mientras que en la región de AlGaAs se presenta una señal muy intensa y con oscilaciones Franz-Keldysh (FK) bien definidas originadas por campos eléctricos intensos, consecuencia del alto dopaje. Mediante el modelo propuesto por Aspnes y Studna [4], determinamos la concentración de Al y el valor del campo eléctrico en esa región, el cual resulta ser del orden de 1.4×10^7 V/m. Otra región de interés se localiza entre las dos regiones descritas anteriormente (GaAs-AlGaAs) en donde se presentan otras oscilaciones FK. Hwang *et al* han atribuido esta señal a la capa protectora de GaAs [5], sin embargo últimamente Estacio *et al* se las han asociado a la región del 2DEG [6]. Estas oscilaciones parecen tener el mismo origen que las que se presentan en el AlGaAs, dado que los campos eléctricos obtenidos son del mismo orden ($\sim 10^7$ V/m), y este origen en común puede ser la región de carga espacial localizada en la interfaz donde se forma el 2DEG.

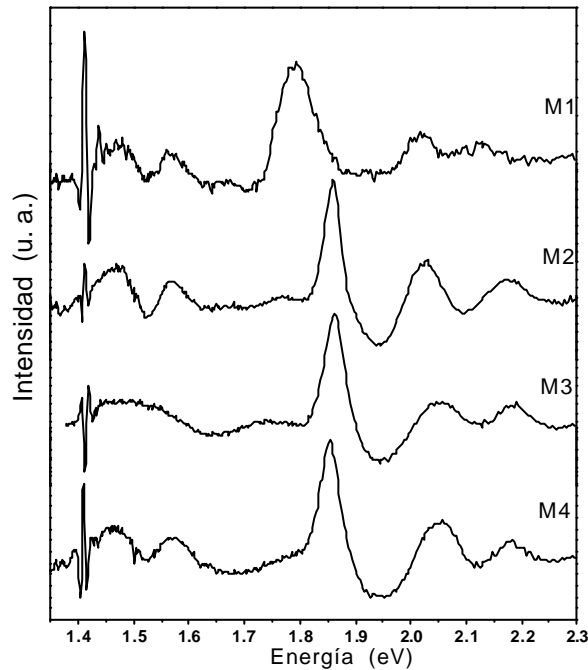


Figura 2. Espectros de fotorreflectancia a temperatura ambiente para M1, M2, M3 y M4 con $\Sigma = 60, 60, 120$ y 180 \AA , respectivamente

Aún no es claro qué señal es la que proporciona información específica del 2DEG [7], mas sin embargo FR tiende a ser la técnica más efectiva para caracterizar este tipo de dispositivos.

Conclusiones

Hemos crecido y caracterizado heteroestructuras AlGaAs/GaAs que contienen un gas bidimensional de electrones de alta movilidad, las cuales tienen la estructura adecuada para presentar el efecto Hall cuántico y por tanto pueden ser utilizadas como patrón estándar de resistencia eléctrica. Mediciones Hall mostraron que el espesor de la capa espaciadora juega un papel relevante en la movilidad del 2DEG, para una concentración de Al y un dopaje determinado. La técnica de fotorreflectancia fue utilizada para conocer las características ópticas de las muestras, mediante la cual se encontraron campos eléctricos del orden de $\sim 10^7$ V/m en una de las interfaces. Lo cual prueba una vez más que FR es una técnica muy útil en el estudio de este tipo de heteroestructuras.

Agradecimientos. Este trabajo fue apoyado parcialmente por el CONACyT.

Referencias

- [1] K. Von Klitzing, K. G. Dorda, y M. Pepper, *Phys.Rev.Lett.*, 45(1980) 495.
- [2] R. Dingle, H. L. Störmer, A. C. Gossar y W. Wiegmann, *Appl.Phys.Lett.* 33 (1978) 665.
- [3] J. L. Shay, *Phys. Rev. B* 2, (1970) 803
- [4] D. E. Aspnes, y A. A. Studna, *Phys. Rev. B* 7, (1973) 4605.
- [5] I. Hwang, J. Kim, H. Y. Park y S. K. Noh, *Solid State Comm.*, Vol. 103 (1997) 1.
- [6] E. Estacio, M. Bailon, A. Somintac, R. Sarmiento y A. Salvador, *J. Appl. Phys.* 91 (2002) 3717.
- [7] A. Guillén-Cervantes, Z. Rivera-Alvarez, F. Hernández, J. Huerta, V. H. Mendez-García, A. Lastras, L. Zamora, N. Saucedo, M. Meléndez Lira, y M. López-López, *Rev. Mex. Fis.* 47 (2001) 548.

3. Estudio de películas SRO y su potencial uso como sensores de radiación

^a F. Flores Gracia, ^b M. Aceves, ^a J. Carrillo ^c C. Falcony ^d C. Domínguez

^a Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores BUAP, Puebla, Mexico

^b Departamento de Física, CINVESTAV, D.F., México

^c Centro Nacional de Microelectrónica, España

Resumen

Se realizaron estudios de fotoluminiscencia en películas SRO (Silicon Rich Oxide, óxidos ricos en silicio) para evaluar la posibilidad de usarlas en sensores de radiación. Las películas se obtuvieron por implantación de silicio en óxido térmico, LPCVD y PECVD. También se estudiaron películas super enriquecidas de silicio obtenidas al implantar silicio en películas depositadas por LPCVD y PECVD en las que ya hay un exceso de silicio uniforme. Las películas con excesos de silicio entre 4 y 10 % at. presentan mayor luminiscencia. Se encuentra también que tratamientos térmicos en N₂ por 60 minutos provocan que la intensidad de luminiscencia sea máxima. Se hacen estudios de fotoluminiscencia con aplicación de voltaje de polarización y se encuentran variaciones en la posición de los picos de emisión para películas con el mismo rango de exceso de silicio.

Procedimiento experimental

Todas las películas con espesor de 550 nm. Todas las implantaciones con 150 KeV de energía (rango proyectado de 238.5 nm), se obtuvieron por:

1. Implantación de silicio en óxidos térmicos de 550 nm (Películas SITO). Energía de 150 keV (rango proyectado de 228.5 nm) y dos diferentes dosis: $1 \times 10^{16}/\text{cm}^2$ y $1 \times 10^{17}/\text{cm}^2$.
2. Depósito de películas por LPCVD a las que se les implanta además silicio (películas SISRO-LPCVD). Se usaron las razones de flujos $R_o = \text{N}_2\text{O}/\text{SiH}_4$ [1] de 10, 20 y 30. En un grupo de películas SRO-LPCVD se implantó Si con dosis de $5 \times 10^{15}/\text{cm}^2$ y en otro con dosis de $2 \times 10^{16}/\text{cm}^2$.

- Depósito de películas por PECVD (Películas SRO-PECVD). Las películas SRO-PECVD se obtuvieron en un sistema de PlasmaLab 80, Oxford Instruments a 13.56 MHz de frecuencia. Se usaron razones de flujo de N_2O/SiH_4 (R_o) de 5, 14 y 59. Temperatura de depósito de 300 °C, presión total de 0.2 Torr, flujo total de 300 sccm.
- Implantación de silicio en películas PECVD en las que se tiene un exceso de silicio previo (Películas SISRO-PECVD). A un grupo de películas SRO-PECVD se les implantó Si con dosis $2 \times 10^{16} / cm^2$ (Películas SISRO-PECVD).

Los excesos de silicio se muestran en la Fig. 1. A todas las películas se les aplicó tratamiento térmico en atmósfera de N_2 por 30, 60 y 180 minutos a 1100 °C.

El porcentaje volumétrico de las fases amorfa y cristalina en las películas SITO se obtuvo por elipsometría espectroscópica en un sistema Uvisel Spectroscopic Ellipsometer.

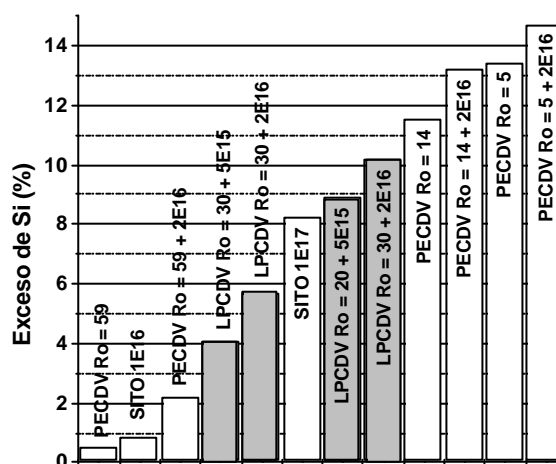


Figura 1. Exceso de silicio en las películas SRO. Se obtienen los resultados a partir de simulaciones con SRIM [2,3]

En las películas SITO de ambas dosis de implantación, se detectó la fase amorfa del silicio sólo en el caso de películas sin tratamiento térmico en N_2 . En las películas SITO de dosis baja el porcentaje volumétrico es muy pequeño (0.03%) mientras que en las películas de dosis alta, el porcentaje es mayor (1.13%). Después de los tratamientos térmicos no se detectó la fase amorfa en ninguna de las muestras, independientemente de la dosis.

La fase cristalina no se observó en ningún caso en las muestras con dosis baja de implantación. La fase cristalina del silicio está presente en las muestras con dosis alta después de los tratamientos térmicos.

Espectros de elipsometría espectroscópica realizados en el CNM [4] de las muestras depositadas con razones de flujo bajas ($R_o=5$), indican la presencia de aglomerados de silicio en la matriz de óxido, previo a los procesos térmicos. Las capas obtenidas con razones de 14 y 59 no presentan evidencia de la presencia de aglomerados de Si, ni antes ni después de los tratamientos térmicos.

Resultados de espectroscopía de fotoelectrones llevadas a cabo en el mismo Centro [4], mediante la cual se determina la composición de los óxidos de Si, corroboran la existencia de diferentes compuestos en las capas obtenidas con $R_o=5$. Se detecta:

- Silicio elemental: formando aglomerados Si_n ($n \geq 3$), que actúan como precursores de los nanocristales de silicio.
- Silicio divalente (Si^{2+}): correspondiente a estructuras tipo $O_2Si-Si-H$, responsable de la formación de centros P_b tras el tratamiento térmico.
- Silicio trivalente (Si^{3+}): asociado a defectos E' : $(Si-O)_3 \equiv Si^+ \cdot Si \equiv (Si-O)_3$, que son parcial o totalmente eliminados durante el tratamiento térmico.
- Silicio tetravalente (Si^{4+}): entorno propio del óxido de silicio estequiométrico.

Para películas con $R_o=14$ y $R_o=59$ se detecta la presencia de óxido de silicio, y no sufren alteración tras el tratamiento térmico.

Se realizaron mediciones de fotoluminiscencia (FL) a temperatura ambiente en cada una de las etapas del experimento. Los espectros de FL se obtuvieron con un equipo Perkin Elmer modelo LS50B con excitación de 250 nm (4.96 eV) y filtro de 430 nm. La excitación de 250 nm proporciona las señales más intensas.

Se obtuvieron espectros de fotoluminiscencia aplicando voltaje de polarización a las muestras. El objetivo de este experimento es observar los cambios en las bandas de FL producidos por la aplicación de voltaje. Si es posible que varíe la posición de las bandas de emisión, es posible que aplicando voltaje se pueda sintonizar un detector de radiación. Los voltajes aplicados fueron en ambas polaridades y con valores absolutos entre 0 y 5.0 V. Se aplicó el voltaje en pasos de 0.1 V. Los espectros se obtuvieron en el mismo equipo en que se obtienen los espectros de FL sin polarización.

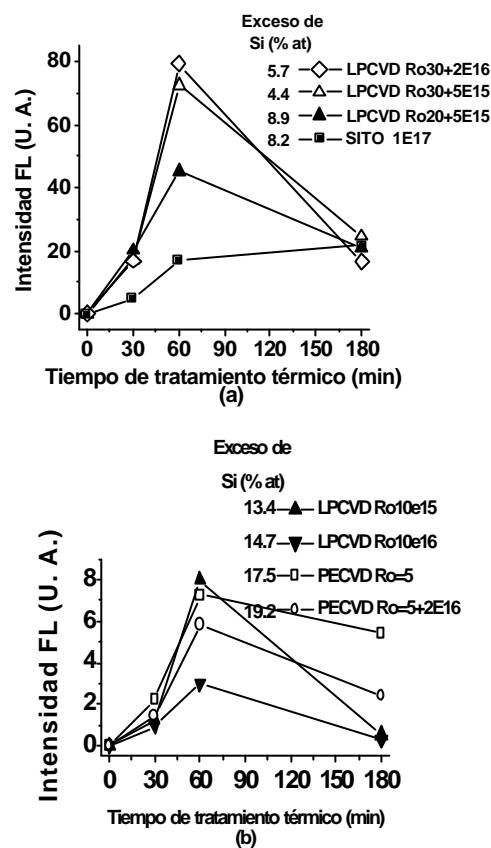


Figura 2. Intensidad de FL vs. tiempo de aleación. La intensidad es máxima para 60 minutos de tratamiento térmico. Note el cambio de escala en la gráfica b

Resultados

Los principales resultados obtenidos muestran que la intensidad de la luminiscencia está relacionada con el exceso de silicio. Las intensidades más grandes se obtienen con excesos de silicio entre 4 y 10 % at. (corresponden a las columnas en gris en la Fig. 1). Se observaron bandas en 1.9 y 2.4 eV que corresponden claramente a defectos pues éstas desaparecieron con tratamientos térmicos en N₂ a alta temperatura. Se obtiene evidencia que bandas en 1.7 eV tienen su origen en efectos combinados en los

que intervienen procesos de confinamiento cuántico y defectos que rodean a los nanocristales. La intensidad es mayor cuando se tienen tratamientos térmicos por 60 minutos y después decrece para tratamientos térmicos por mayor tiempo (Fig. 2). Las bandas de fotoluminiscencia no sufren cambios de posición con los diferentes tratamientos térmicos.

Los espectros de fotoluminiscencia muestran cambios en posición e intensidad al aplicar polarización. Al aplicar polarización hasta 1 V, el espectro no se modifica. Los cambios inician al superar este valor de voltaje. Se observa una disminución en intensidad y un desplazamiento de la banda hacia la región azul (Fig. 3), aunque más bien parece que la polarización afecta los componentes más bajos de energía (región roja). Después de superarse el valor de 1.5 V, la señal de fotoluminiscencia desaparece. Los cambios son reversibles.

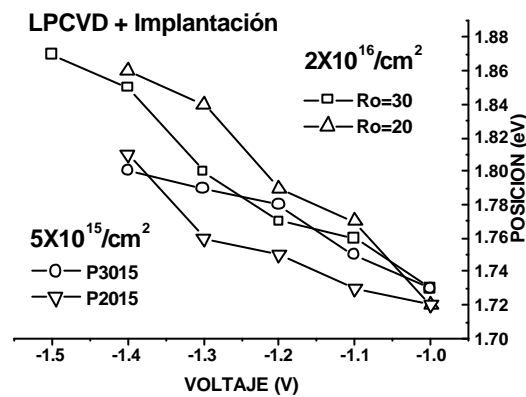


Figura 3. Posición de la banda de FL en 1.7 eV en películas LPCVD con polarización

Conclusiones

Los mecanismos de emisión de las películas SRO no han sido del todo aclaradas por los diversos autores que han trabajado sobre estas investigaciones. Se sabe que estos efectos dependen del tamaño de los nanocristales; el efecto se presenta para nanocristales del tamaño comparable con el radio de Bohr para el silicio. Recordemos que se hace similitud con el átomo de hidrógeno para el caso de impurezas o excitones en los semiconductores. El radio de Bohr excitónico del silicio es de alrededor de 5 nm [5]. Cuando los nanocristales tienen tamaños de alrededor de 1 nm o cuando son mucho mayores que el radio de Bohr (un valor de más de 15 nm, según

algunos autores), los efectos de confinamiento cuántico desaparecen. Esta puede ser la causa de que nosotros hayamos encontrado ciertos valores en el exceso de silicio y en los tiempos de tratamiento térmico para una gran amplitud de emisión. Esta idea explica también porqué las películas LPCVD con bajo exceso de silicio, debido al proceso de depósito CVD pero con implantación, producen las bandas de mayor amplitud. Este proceso de obtención, en este tipo de películas, no se había aplicado con anterioridad. Las películas de estas características parecen tener el exceso de silicio adecuado para la emisión. También se encontró que con 60 minutos de tratamiento térmico en N_2 , la intensidad es máxima. Esto significa que con tiempos de tratamiento térmico menores, no hay una gran densidad de nanocristales del tamaño adecuado para radiar en esa banda. Al dar tratamientos térmicos por 60 minutos se llega a un máximo en la densidad de este tipo de nanocristales. Cuando el tiempo de tratamiento térmico se incrementa, otra vez disminuye la densidad de los nanocristales adecuados para la radiación en 1.7 eV pues ahora debe incrementarse la población de nanocristales de mayor tamaño.

Sin embargo, no encontramos corrimientos importantes en las bandas al variar los excesos de silicio en las películas o variando los tiempos de tratamiento térmico en N_2 . El incremento en el tiempo de tratamiento térmico en N_2 debe llevar a un aumento en el tamaño de los nanocristales y por tanto en un corrimiento de la posición de las bandas hacia el rojo. Puesto que no observamos ese efecto, la emisión debe producirse en otro lugar distinto a los nanocristales. Nuestro modelo propone que la emisión se da por interacciones del nanocristal con defectos que lo circundan [6].

Al aplicar voltaje de polarización a las películas sí encontramos corrimientos en la banda de emisión. Más bien parece haber un efecto sobre las componentes de energía más bajas en las bandas. Este efecto no había sido reportado para estos materiales. A este respecto también proponemos que intervienen efectos de confinamiento cuántico. Este efecto podría utilizarse para la detección de radiación si puede obtenerse alguna señal eléctrica. Si variando la polarización podemos variar de alguna forma la conductividad del material, podríamos obtener diferentes niveles de señal dependiendo de la frecuencia de la luz incidente.

Referencias

- [1] D. Dong, E. A. Irene, and D. R. Young. *J. Electrochem. Soc.: SOLID STATE SCIENCE AND TECHNOLOGY*. May 1978. Vol. 125, N° 5, pp 819-823
- [2] SRIM. The Stopping and Range of Ions in Matter. James F. Ziegler. IBM-Research. Yorktown, NY, 10598, USA. Ziegler@Watson.IBM.Com.

- [3] J. F. Ziegler, J., P. Biersack y U. Littmark. "THE STOPPING AND RANGE OF IONS IN SOLIDS", Pergamon Press, Nueva York, 1996.
- [4] Benmessaoud A., Llobera A., Riera M., Mestres N., Pascual J., Domínguez C., Rodríguez J. A. "Tratamiento térmico de capas de subóxidos para aplicaciones optoelectrónicas"; Proc. Optoel' 01, Comunicación Oe-75.
- [5] Kenta ARAI, Junichi OMACHI, and Shunri ODA. "Manifestation of the Quasi-Direct Recombination in Nanocrystalline Silicon Dots by Reducing the Core Diameter". Research Center for Quantum Effect Electronics, Tokyo Institute of Technology. 2-12-1, O-okayama, Meguro-ku, Tokyo 152-8552, JAPAN.
- [6] J. F. Flores, M. Aceves, J. Carrillo, C. Domínguez, C. Falcony, W. Calleja. "LUMINESCENCE STUDIES IN THERMAL OXIDE FILMS WITH Si IMPLANTATION", Modern Physics Letters B, Vol 15, Numbers 17, 18 & 19 August 20 2001.

4. Crecimiento y caracterización de puntos cuánticos de InAs sobre submonocapas de Si en GaAs (100)

N. Saucedo-Zeni, L. Zamora, A. Lastras-Martínez, C. I. Medel-Ruiz, V. H. Méndez-García

Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Karakorum 1470, Lomas 4^a. Sección, San Luis Potosí, S.L.P., México 78210

Resumen

En este trabajo investigamos los efectos inducidos por el Si en la formación de puntos cuánticos autoensamblados (QDs) de InAs crecidos por epitaxia de haces moleculares sobre substratos de GaAs (100). Previo a la deposición del InAs la superficie del GaAs es expuesta a un flujo molecular de Si. El tiempo de exposición es de algunos segundos por lo que se estiman espesores de Si menores a una monocapa (submonocapas de Si). La idea detrás de esto es inducir una mayor tensión en las capas de InAs por depositar, con lo cual se esperarían cambios en el autoensamble de los puntos cuánticos. Además el estado químico de la interfaz InAs/GaAs podría verse modificada con la presencia de átomos del grupo IV.

La técnica de reflexión de electrones difractados de alta energía (RHEED) fue utilizada para caracterizar in-situ los procesos en la superficie de las muestras. La densidad y dimensiones de las islas fueron determinadas utilizando microscopía de fuerza atómica (AFM), mientras que el confinamiento electrónico de los puntos cuánticos fue corroborado por medio de fotoluminiscencia (PL). Por último, la anisotropía óptica de los puntos cuánticos fue estudiada utilizando espectroscopía de reflectancia diferencial (RDS).

Introducción

Recientemente, los puntos cuánticos semiconductores (QDs del inglés: *quantum dots*) han despertado gran interés debido a que sus propiedades difieren de las del material de bulto y proveen la posibilidad de crear nuevos dispositivos optoelectrónicos [1]. Estas propiedades únicas se deben a que si los electrones son confinados a una región lo suficientemente pequeña, sus niveles de energía se cuantizarán, algo similar a lo que ocurre con los niveles de energía de un átomo y la separación de estos niveles

dependerá en forma inversa del tamaño del punto [2]. Una manera de hacer tal átomo artificial o punto cuántico es cubrir la vecindad del punto cuántico con otro semiconductor de mayor ancho de banda prohibida [3]. Para que el confinamiento exista, los tamaños de los QDs deben de ser comparables al radio del excitón de Bohr, que es del orden de 10 nm en la mayoría de los semiconductores. Los QDs contienen solamente unos pocos miles de átomos y son capaces de emitir luz a longitudes de onda determinadas por la energía de los niveles en el punto y no por la energía de la banda prohibida del material. Las aplicaciones más prometedoras de los QDs son los transistores de un electrón (*single-electron transistors*) [4] y los láseres de puntos cuánticos [5][6], dado que el crecimiento exitoso de QDs ofrece la posibilidad de ajustar la longitud de onda y con ello expandir el desempeño de los láseres.

El crecimiento de QDs de InAs mediante la técnica de Stranski-Krastanow, también llamada proceso de autoensamble, aparece como una de las formas más sencillas y eficientes para fabricar estas nanoestructuras [7][8]. El proceso de autoensamble explota el carácter tridimensional en forma de islas que tiene lugar con el depósito de semiconductores con un desacople de red grande. El crecimiento de InAs sobre GaAs es un ejemplo típico en donde el desacople entre las constantes de red es de ~7%. De esta manera, las islas de InAs se forman coherentemente, libres de dislocaciones sobre el sustrato de GaAs acompañadas por una capa de mojado.

El proceso de crecimiento descrito ha sido utilizado para formar los QDs de InAs sobre sustratos de GaAs (100). Se propone un novedoso tratamiento de la superficie del sustrato de GaAs que consiste en depositar Si en pequeñísimas cantidades previo a la deposición del InAs. La idea detrás de esto es cambiar el estado químico de la superficie del sustrato, dado que es considerada como un factor clave en el proceso de nucleación de las islas [9][10]. Consideramos que éste podría ser un excelente sistema para estudiar los efectos de la tensión dado que el desacople de red entre el InAs y el GaAs es del 7%, mientras que el desacople de red entre el InAs y el Si es de ~11.5%. De esta forma, las submonocapas de Si inducirían un desacople de red más grande, que es algo de suma importancia en el modo de crecimiento Stranski-Krastanow.

La morfología de las superficies fue evaluada *ex-situ* por medio de microscopía de fuerza atómica (AFM del inglés: *atomic force microscopy*) en el modo de contacto. Los resultados mostraron una mayor densidad para la muestra que se expuso al flujo del Si antes de depositarse el InAs. Por otra parte, las mediciones de fotoluminiscencia (PL del inglés: *photoluminescence*) confirmaron el confinamiento cuántico de los puntos mientras que los espectros de reflectancia diferencial (RDS del

inglés: *reflectance difference spectroscopy*) mostraron que también las anisotropías ópticas fueron modificadas debido al diferente tratamiento del sustrato.

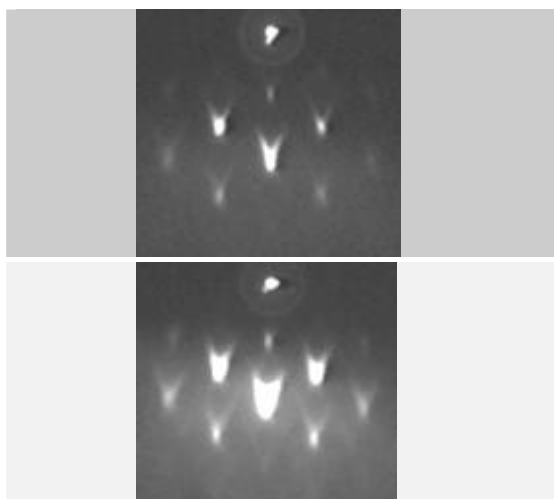


Figura 1. Patrones RHEED observados durante la formación de los QDs de la muestra (arriba) N198 y (abajo) S200. Se observa una mayor intensidad en el patrón RHEED correspondiente a la muestra S200

Procedimiento experimental

Para la epitaxia por haces moleculares se utilizó un sistema MBE RIBER 32-D. Los sustratos de GaAs (100) fueron atacados químicamente en una solución de H_2O : H_2SO_4 : H_2O_2 (1:5:1), enjuagándose abundantemente con agua desionizada. Inmediatamente después se pegaron con In en un molyblock y se introdujeron al sistema de MBE. La desorción de los sustratos se realizó a una temperatura de 585°C , temperatura según pirómetro, bajo un flujo de As de $\sim 7 \times 10^6$ Torr. En ambas muestras se creció una capa colchón (BL del inglés: buffer layer) de GaAs con un espesor de $0.5 \mu\text{m}$ a una temperatura de 600°C . Después de esto vienen las diferencias entre las dos muestras: N198 y S200. La muestra N198 corresponde a un crecimiento convencional de QDs, es decir, una vez concluida la deposición de la BL de GaAs la temperatura se disminuye hasta $\sim 480^\circ\text{C}$, posteriormente se abre el obturador de In depositándose aproximadamente 2.2 ML de InAs, dando origen a los QDs autoensamblados. Mientras que para la muestra S200, después de haber sido crecida la BL de GaAs, la temperatura del sustrato se eleva hasta $\sim 650^\circ\text{C}$ en donde la superficie es expuesta al flujo molecular del Si durante 10 segundos. Luego se

disminuye la temperatura hasta $\sim 480^\circ\text{C}$ a fin de depositársele el InAs. Las velocidades de crecimiento para el InAs y para el GaAs fueron de $0.5 \mu\text{m/h}$.

La técnica *in-situ* de reflexión de electrones difractados de alta energía (RHEED) fue utilizada para monitorear el estado de la superficie de las muestras durante los crecimientos, pudiéndose de esta forma observar la transición de un crecimiento pseudomórfico a un crecimiento en 3D que tuvo lugar con la aparición de los QDs. Los espectros de RD fueron tomados en ambiente de ultra-alto vacío 3 horas después de haber terminado los crecimientos. El tamaño y densidad de las islas fueron evaluados por AFM *ex-situ*, mientras que para los espectros de fotoluminiscencia se utilizó un láser de He-Ne con una potencia de 30mW.

Resultados y discusión

Al exponer la superficie de la muestra *S200* al flujo molecular del Si, teniendo una temperatura de sustrato de 650°C y estando cerrada la celda de As, observamos un cambio considerable en la reconstrucción de superficie que estuvo acompañada por una pequeña disminución en la intensidad del haz especular del RHEED. La reconstrucción de superficie cambió de una estructura $C(2\times 8)$ estable en As a una estructura (2×1) con las líneas de medio orden un poco difusas. Estos cambios podrían ser una consecuencia de la exposición al Si, o mejor aún, podrían haber sido ocasionados por la evaporación del As debido a las altas temperaturas del sustrato. Al depositarse el InAs, observamos como el patrón RHEED cambió de un patrón lineal $C(4\times 4)$ a un patrón puntual indicándonos la aparición de las islas de InAs. Esta transición de un patrón lineal a uno puntual ocurrió después de haber depositado ~ 1.7 ML de InAs. Las Figs. 1 (a), (b) muestran patrones RHEED típicos que se observaron durante el crecimiento de las muestras *N198* y *S200* respectivamente, a lo largo de la dirección $[1\bar{1}0]$ después de haberse depositado 2.2 ML de InAs. Se puede ver una mayor intensidad del patrón RHEED correspondiente a la muestra *S200*, lo que podría estar relacionado con la mayor densidad de QDs que se obtuvo para esta muestra. En las Figs 2 (a) y (b) se muestran las imágenes de AFM correspondientes a la muestra *N198*, que tiene 2.2 ML de InAs depositado directamente sobre el GaAs, y a la muestra *S200*, en donde el sustrato de GaAs(100) fue expuesto al Si. Para la muestra *N198* observamos una distribución de islas de tamaños casi uniformes, estas islas tienen una altura de ~ 7 nm y un diámetro promedio de 33 nm, mientras que la densidad correspondiente es de 7×10^{10} islas/ cm^2 . Por otro lado, de la Fig. 1 (b) podemos observar una mayor variación en los tamaños de las islas cuyas alturas fluctúan entre 8 y 11 nm, mientras que sus diámetros promedio son de 28 nm y su densidad es de $\sim 11\times 10^{10}$ islas/ cm^2 . De esta manera tenemos que uno de los visibles

efectos que pudieran atribuírsele al Si es el de un significativo cambio en la morfología de los QDs: una mayor densidad de islas así como una mayor altura de los QDs.

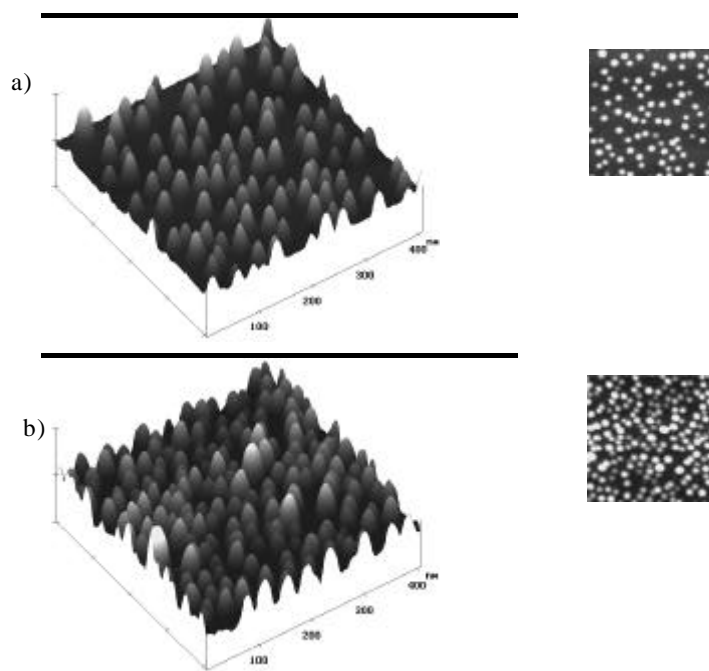


Figura 2. Imágenes de AFM para las muestras (a) *N198* y (b) *S200*. El área de barrido es de $400 \times 400 \text{ nm}^2$

Por otro lado, la Fig. 3 muestra los espectros de PL de las muestras *N198* y *S200* tomados a una temperatura de 77K. Los picos de emisión están alrededor de los 0.89 y 1.11 eV para las muestras *N198* y *S200*, respectivamente. La emisión de los QDs de la muestra *S200* muestra un corrimiento hacia la región del azul, que podría estar relacionado con una mayor concentración de Ga en los puntos de la muestra *S200*. Esto es debido a que durante la exposición al Si la celda de As permaneció cerrada, y debido a la temperatura alta ($\sim 650^\circ\text{C}$) hubo una evaporación de As de la superficie quedándonos una superficie rica en Ga. De esta manera, una vez que se empieza a depositar el InAs, se esperaría una mayor concentración de Ga en los puntos, ocasionando que el pico de emisión se desplazara a mayores energías.

La Fig. 4 muestra las mediciones de RDS para las muestras *N198* y *S200* que fueron realizadas una vez terminados los crecimientos. Podemos observar 2 picos: uno en ~ 2.6 eV y otro en ~ 4 eV. Está reportado que la amplitud de la señal que aparece ~ 4 eV tiene que ver con las características de la estructura mientras que la señal de RDS en ~ 2.6 eV ha sido relacionada con la energía de los dímeros de As [1]. Así mismo, se puede observar que la amplitud de la señal de la muestra *S200* es mayor que la de la muestra *N198* en la región de los 2.6 eV. Dado que la señal en 2.6 eV ha mostrado ser muy sensible a la formación de las islas, una mayor amplitud de la muestra *S200* parece indicar que la formación de las islas ocurrió primero en esta muestra. De esta manera, es posible que la tensión adicional causada por la incorporación de los átomos de Si en la interfase InAs/GaAs pudiera haber acelerado el proceso de nucleación de las islas.

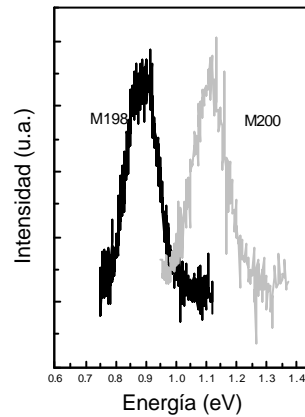


Figura 3. Espectros de fotoluminiscencia que se obtuvieron para las muestras *N198* y *S200* a una temperatura de 77K

Conclusiones

Investigamos los efectos de la exposición de la superficie de GaAs al flujo de Si previo a la formación de los InAs QDs. Con el uso del Si se obtuvo una mayor densidad de QDs, así mismo, se consiguió reducir los tamaños de las bases y aumentar las alturas de estos puntos. En los espectros de PL, observamos un corrimiento hacia mayores energías en la emisión de los QDs de la muestra *S200*, esto se explica considerando la difusión de los átomos de Ga en los QDs. La incorporación de los átomos de Si en la capa de mojado así como los campos de tensión producto de

la interacción entre los puntos pudieron también haber ocasionado este corrimiento hacia la región del azul. Finalmente, por RDS se observó que la nucleación de las islas ocurrió primero en la muestra S200 que fue expuesta al flujo de Si.

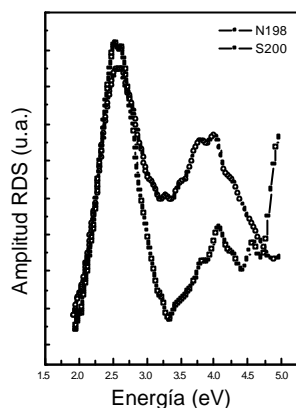


Figura 4. Mediciones de RDS realizadas a una temperatura de 210°C

Referencias

- [1] D. Pal, D. Pan, E. Towe, S. J. Chen, *Journal of Crystal Growth* 233 (2001) 34.
- [2] M. Suguwara: Self-assembled InGaAs/GaAs quantum dots, *Semiconductors and Semimetals* 60, Academic Press, 2000.
- [3] H. S. Nalwa, "Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices", Volume 2: Semiconductor Devices, Academic Press, 2001.
- [4] K.K. Likharev, *IEEE Trans. Mag.* 23 (1987) 1142.
- [5] D. Bimberg, N. Kirstaedter, N.N. Ledentsov, Z.I. Alferov, P.S. Kopev, V.M. Ustinov, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 3 (1997) 196.
- [6] D. Pan, E. Towe, S. Kennerly, *Electron. Lett.* 34 (1998) 1019.
- [7] G. Yusa, H. Sakaki, *Appl. Phys. Lett.* 70 (1997) 345.
- [8] D. Leonard, M. Krishnamurthy, C.M. Reaves, S.P. DenBaars, and P.M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* 63 (1993) 3203.
- [9] T. Kita, K. Tachikawa, H. Tango, K. Yamashita, T. Nishino, *Appl. Surf. Sci.* 159 (2000) 503.
- [10] J. S. Kim, P. W. Yu, J. Y. Leem, J. I. Lee, S.K. Noh, J.S. Kim, G.H. Kim, S.K. Kang, S.I. Ban, S.G. Kim, Y. D. Jang, U.H. Lee, J.S. Yim, D. Lee, *J. Cristal Growth* 234 (2002) 105.
- [11] D. I. Westwood, Z. Sobiessierski, E. Steimetz, T. Zettler, W. Richter, *Appl. Surf. Sci.* 123/124 (1998) 347.

5. Mediciones de propiedades eléctricas y ópticas de estructuras MIS con películas de Metalofalocianinas (Me-Pc) como aislante

G. Jiménez¹, A. Malik², J. L. Sosa¹, S. Alcántara¹

¹Universidad Autónoma de Puebla, 72570 Puebla, Pue.

²Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica

Resumen

En la búsqueda de materiales propios para sensores, las películas orgánicas de la familia de las ftalocianinas (Pc) tienen especial interés, ya que éstas presentan efectos eléctricos importantes en la conversión de parámetros físicos o químicos en señales eléctricas y ofrecen también excelente estabilidad térmica y química. En este trabajo se prepararon estructuras MIS por sublimación de las ftalocianinas metálicas (CoPc, NiPc, PtPc y LaPc), sobre sustratos de silicio tipo n y se caracterizaron los efectos de fotocorriente y tensorresistivo.

Introducción

Entre los materiales orgánicos de mayor importancia en la investigación de materiales sensores, la familia de las ftalocianinas (Pc), son unos de los más intensamente investigados como películas orgánicas delgadas, puesto que éstas ofrecen excelentes propiedades de crecimiento o depósito con alta estabilidad térmica y química, además, se le han encontrado efectos eléctricos importantes en la conversión de parámetros físicos o químicos en señales eléctricas [1].

La molécula de ftalocianina tiene una estructura cíclica que deja en el centro un espacio donde puede acomodarse un metal o semimetal. En el estado sólido, las unidades de ftalocianina se apilan formando columnas intercaladas en un arreglo que exhibe propiedades anisotrópicas [2].

En un sustrato monocristalino de silicio, la película crece en una estructura ordenada. Estas moléculas ordenadas causan una fuerte anisotropía en las propiedades

de transporte las cuales son diferentes a lo largo y con respecto a la normal a los planos de moléculas [3]. Así es posible esperar una ligera conductividad transversal en una estructura *metal-MePc-semiconductor*, similar a las estructuras *metal-aislante-semiconductor* (MIS) de aislante con fuga. Esto es muy atractivo para usarse en diferentes tipos de sensores fáciles de fabricar.

En los dispositivos MIS comúnmente se emplean aislantes con transporte de portadores controlado, es decir, se provoca el tuneo de portadores a través de películas aislantes muy delgadas, de espesores menores a $10\mu\text{m}$, que requiere de procesos complicados de fabricación. Al utilizar MePc como aislante, el tuneo de portadores es cambiado por conductividad controlable en películas gruesas, la fabricación de estas películas es sencilla y reproducible.

Bajo ciertas condiciones de razón de generación óptica, se puede promover la acumulación de portadores minoritarios fotogenerados en la frontera aislante/substrato, causando una transición de una estructura MIS a una estructura convencional de condensador MOS.

La presión mecánica también tiene efecto sobre la conductividad eléctrica de películas de MePC [4], en la aplicación de compresión uniaxial sobre la estructura *metal-MePc-Si*; portadores $C_N = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, pulida por ambas caras, y con difusión de fósforo para contacto óhmico en la cara posterior. Sobre la película de MePc se depositó titanio semitransparente, fig 1.

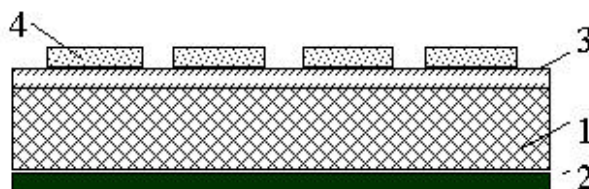


Figura 1. Sección transversal del dispositivo investigado: 1 sustrato de silicio; 2 electrodo metálico posterior; 3 Película MePc y 4 electrodo metálico.

La medición dinámica IV, fue realizada con un generador de funciones pulsante, y un osciloscopio Tektronix TDS 3012. Se polarizó inversamente respecto al sustrato aterrizado. Un monocromador y un LED emisor de luz infrarroja, fueron utilizados para mediciones fotoeléctricas. La compresión uniaxial se aplicó con un dispositivo como el que se ilustra en la figura 2.

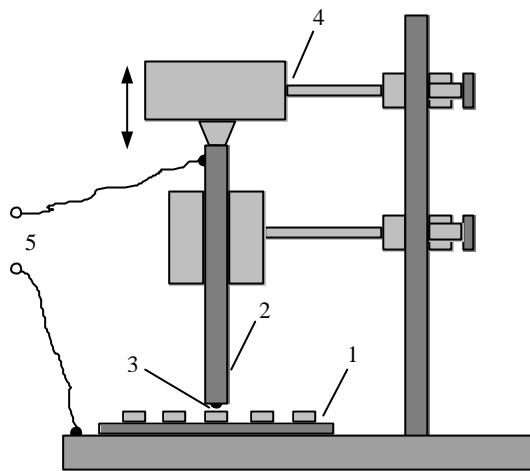


Figura 2. Esquema del dispositivo mecánico para aplicar la presión: 1–la estructura investigada; 2–punta, 3–balín, (d = 1 mm); 4–transductor de presión y 5–contactos eléctricos

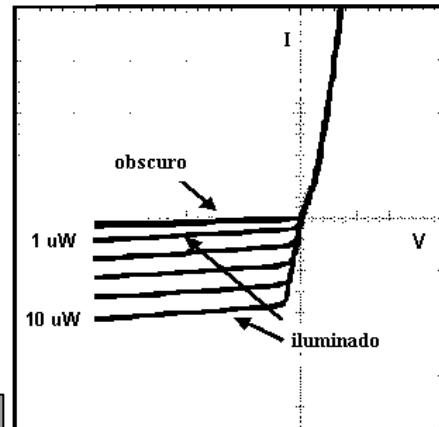


Figura 3. I-V dependencias del sensor Ti/CoPC/nSi

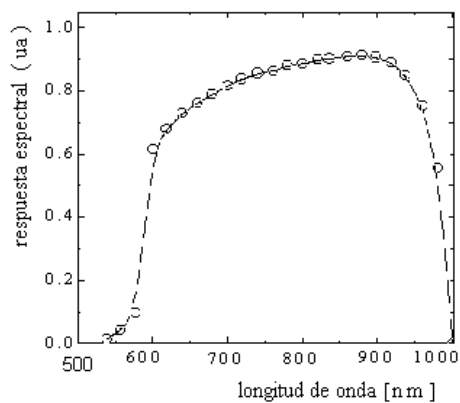


Figura 4. Respuesta espectral del sensor de Ti/CoPC/nSi

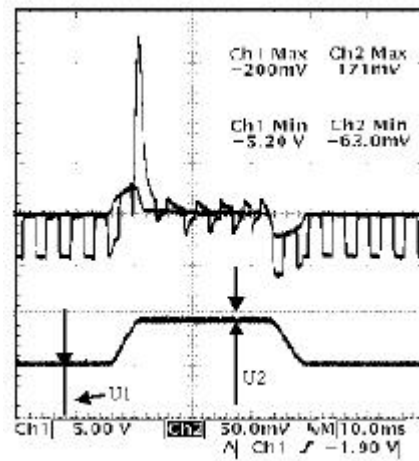


Figura 5. Características dinámicas I-V del sensor: Al/LaPC/nSi

Resultados experimentales

Síntesis de las ftalocianinas y preparación de las películas delgadas

Se sintetizan las ftalocianinas metálicas en nuestro laboratorio a partir de ftalonitrilo y una sal que contiene el metal en cuestión. Posteriormente, se sublima con una evaporadora Edwards (Auto 306). La sublimación se realiza a una presión de 10-5 mB. Las películas se depositan en los sustratos: de Ito sobre vidrio, sobre una tableta de cobre, sobre vidrio y sobre mica. Posteriormente se les metaliza para formar los contactos.

Propiedades Fotoeléctricas

En la figura 3 se muestra las características $I-V$ (resistor de carga 50 Ω) con diferentes niveles de iluminación (LED, $\lambda = 930$ nm), para un sensor Ti/CoPc/nSi.

La respuesta espectral de este tipo de sensor (0.3 A/W en $\lambda = 930$ nm) limitada por la transparencia del titanio, se muestra en la figura 4.

En estructura con LaPc como película aislante es mucho menor el efecto de fotoconductividad transversal. En la gráfica de la figura 5, bajo ciertas condiciones de voltaje, es posible observar una acumulación de huecos fotogenerados en la frontera LaPc/Si, en la cual aparece una capa de inversión superficial en el silicio igual al comportamiento de una estructura condensador MOS.

La polarización al sensor es negativa de $U1 = -5.20V$ pulsantes, tipo trapezoidal, como se ve en la figura 5 durante un tiempo t .

Se puede observar que cuando el nivel de voltaje de polarización cambia de $U1 = -5V$ a $U2 = -0.20V$, con una velocidad de cambio dU/dt (transición de comportamiento MIS a MOS), aparece un pico de corriente de despolarización. La amplitud pico (I) depende de la razón dU/dt y de la capacidad (C) de la estructura en un modo de inversión ($I \cong C \times dU/dt$). El valor de la capacidad está determinado por la carga Q acumulada en el potencial de polarización $U1$. $Q = I_{ph} \times T_{stor}$, donde I_{ph} es el valor de fotocorriente y T_{stor} es el intervalo de tiempo en que está aplicado $U1$ (tiempo de almacenaje).

La figura 6 muestra el pico de fotocorriente de despolarización en diferentes valores de tiempo T_{stor} , para un sensor Al/LaPC/nSi iluminado con IR con potencia incidente de 2×10^{-7} W.

La respuesta espectral del sensor calculada fue de ~ 40 A/W, el cual es muy alto y por lo tanto, útil en la detección de señales ópticas muy débiles.

Propiedades tensiométricas

Las propiedades de las características I-V de estructuras metal/MePC/nSi, dependen de la fuerza uniaxial aplicada al metal de contacto sobre la película MePc. En la figura 7 se muestra la gráfica I -V de una estructura Ti/NiPc/nSi sin y con presión (de un balín de aprox. 20 grs) en el punto del electrodo.

En la figura 7, la punta con la que se aplica la presión puntual se utiliza también como uno de los electrodos (ver figura 2), para descartar cualquier efecto de daño a la integridad de la película; también, se conectaron los electrodos en forma independiente de la punta de presión puntual, el resultado es similar y se muestra en la figura 8.

Conclusiones

Se confirmó por RF y UV que las películas obtenidas por sublimación a partir del material cristalino sintetizado en este centro, son efectivamente de metal-ftalocianinas (MePc).

Existe el efecto tensorresistivo en las películas de metalo-ftalocianinas.

Los cambios drásticos tensiométricos en las características I-V, pueden estar conectados a los efectos encontrados por Berling *et al* [4] en películas MePc de metales divalentes. Suponiendo un crecimiento de morfología ordenada (ver introducción), es posible explicar que la presión uniaxial reduce el traslapamiento de moléculas próximas del orbital π causando el incremento de la movilidad de portadores y conductividad en la dirección normal a los planos moleculares.

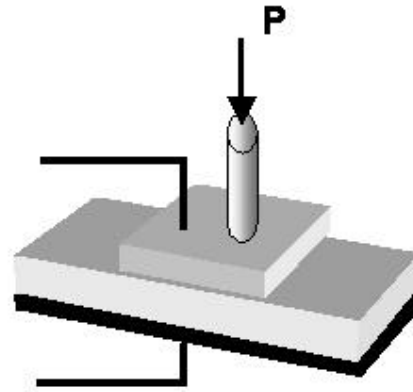
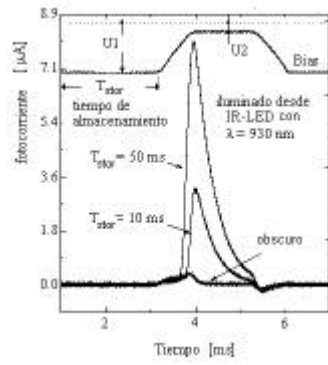


Figura 6. Fotocorriente de despolarización de un Sensor Al/LaPC/nSi LED iluminado

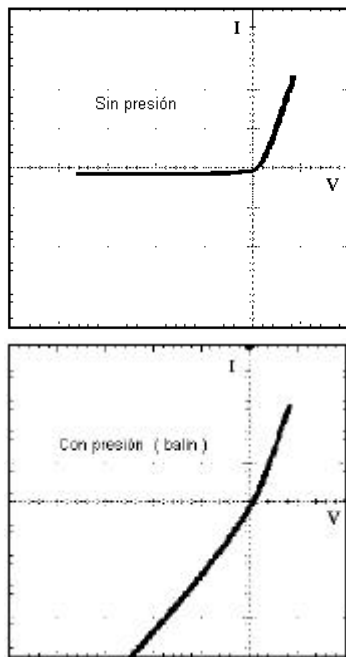


Figura 7. Características I-V del sensor sin y con presión

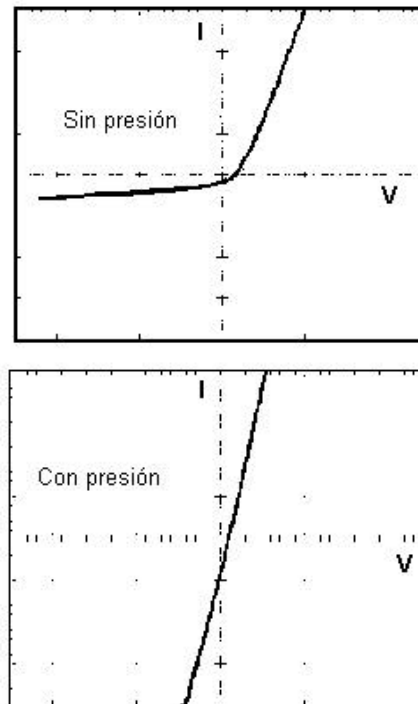


Figura 8. Esquema de la caracterización I-V con compresión uniaxial en un lugar diferente

Referencias

- [1] *Phthalocyanines*, editado por C.C. Leznoff and A.B.P. Lever, VCH Publishers, Weinheim, Germany, 1989-1996, Vols. 1-4.
- [2] J. Simon, J-J. André, *Molecular Semiconductors*, Springer-Verlag, Berlin, Germany, 1985.
- [3] H. Peisert, T. Schwieger, J.M. Auerhammer, M. Knupfer, M.S. Golden, y J. Fink, "Order on disorder: Copper phthalocyanine thin films on technical substrates", *J. Appl. Phys.*, AIP, USA, Vol. 90, 2001, pp. 466-469.
- [4] Y.A. Berlin, N.G. Danielan, *et al.*, "High pressure sensitivity of conductivity observed for phthalocyanine complexes with divalent metals", *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, Nauka, Moscow, SSSR, Vol. 282, 1985, pp. 347-349.

6. Aleaciones metálicas binarias CuX (X=Au, Pd, Pt, Rh): un estudio de primeros principios

Alejandro Bautista Hernández y J.F. Rivas Silva

Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, C.P. 72570, Ciudad Universitaria, Puebla, Pue., México.

Resumen

Se estudia la estabilidad de fase de aleaciones metálicas binarias por medio de cálculos de primeros principios, en base a su entalpía de formación. Para cada aleación se obtienen las fases más estables (algunas nuevas) y se comparan con resultados teóricos existentes en la literatura. Se obtiene un buen acuerdo con los diagramas de fases experimentales.

Introducción

El arreglo de los átomos en un cristal es probablemente la propiedad más importante por entender a escala atómica. Es conocido que en la mayoría de los casos dentro de la Ciencia de Materiales, especialmente en problemas que involucran superficies, adsorción molecular, interfaces, defectos y la fabricación de nuevos materiales, las posiciones atómicas no son conocidas de manera precisa y en algunos casos es difícil determinarlas aun experimentalmente [1]. De acuerdo a la Química Cuántica [2], la mayoría de las propiedades físicas y químicas de un material (al menos las de su estado base) dependen de la conformación geométrica de sus componentes y por lo tanto su determinación es muy importante. Una forma de determinar las posiciones atómicas de un material (no experimental) es por medio de la modelación computacional. En este caso, por medio de teorías físicas de primeros principios (teoría de funcionales de la densidad, DFT), es decir, teorías libres de ajuste de parámetros experimentales, es posible calcular las posiciones atómicas de un material, encontrando las posiciones de equilibrio en donde tienen un mínimo de energía. En el caso de estructuras atómicas ordenadas (cristales) es posible entonces calcular la geometría óptima variando el volumen de su celda unitaria y hallando el mínimo de

energía en una curva Energía vs volumen (Fig. 1). Esta metodología puede aplicarse a metales, semiconductores y aislantes.

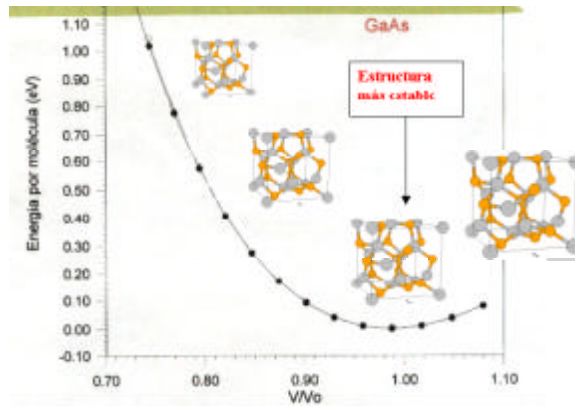


Figura 1. Curva de energía total vs volumen de la celda unitaria, en la cual el mínimo nos proporciona el valor de la constante de red óptima. Se muestra el caso para el GaAs.

En lo que se refiere al caso de las aleaciones metálicas binarias, las teorías clásicas de química y metalurgia, no pueden explicar cierta selectividad estructural observada en aleaciones tales como CuAu, CuPd, CuPt y AlNi. El problema principal radica en que dichos metales en estado puro tienen igual estructura (fcc), pero cuando se mezclan para formar aleaciones 50%-50%, por ejemplo, las estructuras observadas experimentalmente difieren mucho entre sí (diferente simetría) [3]. Entonces, por medio de la teoría DFT, es posible explicar la formación de aleaciones binarias con diferente estructura, calculando su entalpía de formación, la cual está dada por:

$$\Delta H_{\sigma} = E_{\sigma}(a^{\sigma}_{eq}) - [(1-x)E_A(a^A_{eq}) + xE_B(a^B_{eq})]$$

en donde $E_{\sigma}(a^{\sigma}_{eq})$ es la energía de la aleación, $E_A(a^A_{eq})$ es la energía del elemento puro A, $E_B(a^B_{eq})$ es la energía del elemento puro B y x es la composición. El subíndice eq indica que se ha optimizado la geometría tanto de la aleación como la de sus componentes puros. Por lo tanto, cuando ΔH es negativa indica la formación estable de una aleación y cuando ΔH es positiva indica una separación de fases. Entonces por un lado, es posible predecir las aleaciones más estables termodinámicamente a composición fija y por el otro es posible predecir el “estado base” para una aleación dada con composición variable. Con esta metodología es posible predecir nuevas fases de una aleación, tal como lo demuestra el trabajo de Zunger *et al* [3]. En este trabajo preliminar, estudiamos la estabilidad de fases de las

aleaciones CuPd, CuPt, CuAu, y CuRh por medio de cálculos de primeros principios (teoría DFT). Comparamos nuestros resultados con los de Zunger [3] y con los diagramas de fases experimentales, obteniéndose un buen acuerdo entre lo observado experimentalmente y nuestros cálculos.

En todos nuestros cálculos, hemos usado el programa CASTEP de CERIUS para las optimizaciones de geometrías. En el caso de los semiconductores hemos utilizado pseudopotenciales de Vanderbilt [4] con la aproximación LDA (Local Density Approximation). En el caso de las aleaciones metálicas, hemos utilizado pseudopotenciales de Vanderbilt con la aproximación GGA (Generalized Gradient Approximation) en el marco de la Teoría de Funcionales de la Densidad. El programa CASTEP hace una expansión de la función de onda basada en ondas planas de los electrones de valencia. La elección de uno y otro funcional se debió a que en cada caso se obtenían mejores resultados en la optimización de geometrías.

Resultados y discusión

Debido a que en la optimización de la geometría tenemos que la presión P de la celda es cero y por lo tanto dicha energía es igual a la entalpía de formación, obtenemos gráficas de entalpías de formación en función de la composición. En el caso de la aleación CuPd tenemos que las estructuras con entalpía menor que cero (fases más estables con composición fija) son "D7" (CuPd₇), L1₂ (CuPd₃), B2 (CuPd) y L1₂ (Cu₃Pd). La más estable de todas ellas (composición variable) es la B2. Como nuestros cálculos son a temperatura igual a cero, entonces estas fases se comparan con las que se observan experimentalmente a bajas temperaturas. En el caso del diagrama de fases experimental de la aleación CuPd las fases observadas son la B2 (CuPd) y L1₂ (CuPd₃ y Cu₃Pd), lo que concuerda con lo obtenido teóricamente. La aleación D7 (CuPd₇) es una predicción teórica hecha por Zunger y colaboradores. En el caso de la estructura D7 de la aleación CuPt (fase nueva) ya fue descubierta experimentalmente, reforzando la validez de la teoría. Para las aleaciones CuPd y CuPt observamos que las entalpías de formación son más grandes comparadas con las de Zunger. También se muestra en cada gráfica la entalpía experimental (en diamante) y podemos notar que nuestros cálculos se acercan más al valor experimental (CuPd y CuPt).

Para la aleación CuPt las estructuras predichas por la teoría son: D7 (CuPt₇), L1₂ (CuPt₃), L1₁ (CuPt), L1₂ (Cu₃Pt) y "D1" (Cu₇Pt). Las estructuras observadas experimentalmente son: L1₁ (CuPt) y L1₂ (Cu₃Pt), lo que concuerda con nuestros resultados. Por otro lado, se predice también que a bajas temperaturas aparecerán las

estructuras $L1_2$ (CuPt_3), "D1" (Cu_7Pt) y D7 (CuPt_7), siendo las dos últimas fases nuevas.

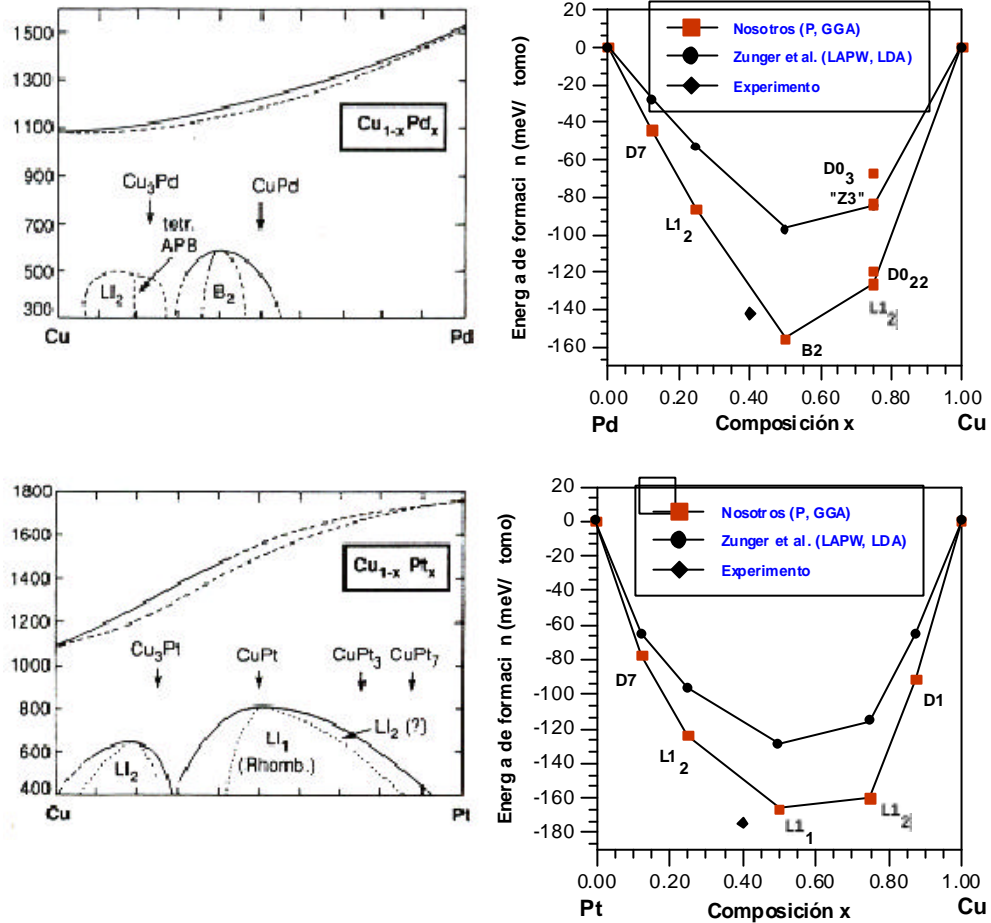


Figura 2. Cálculo de la energía de formación (entalpía de formación) en función de la composición para las aleaciones CuPd y CuPt. A la derecha se muestra el diagrama de fases experimental, cuyo eje vertical corresponde a la temperatura (grados Celsius) y el eje horizontal corresponde a la composición atómica.

En el caso de la aleación CuAu, tenemos que las estructuras predichas son: $L1_2$ (CuAu_3), $L1_2$ (Cu_5Au) y $L1_0$ (CuAu), lo que concuerda con lo observado en el diagrama de fases experimental.

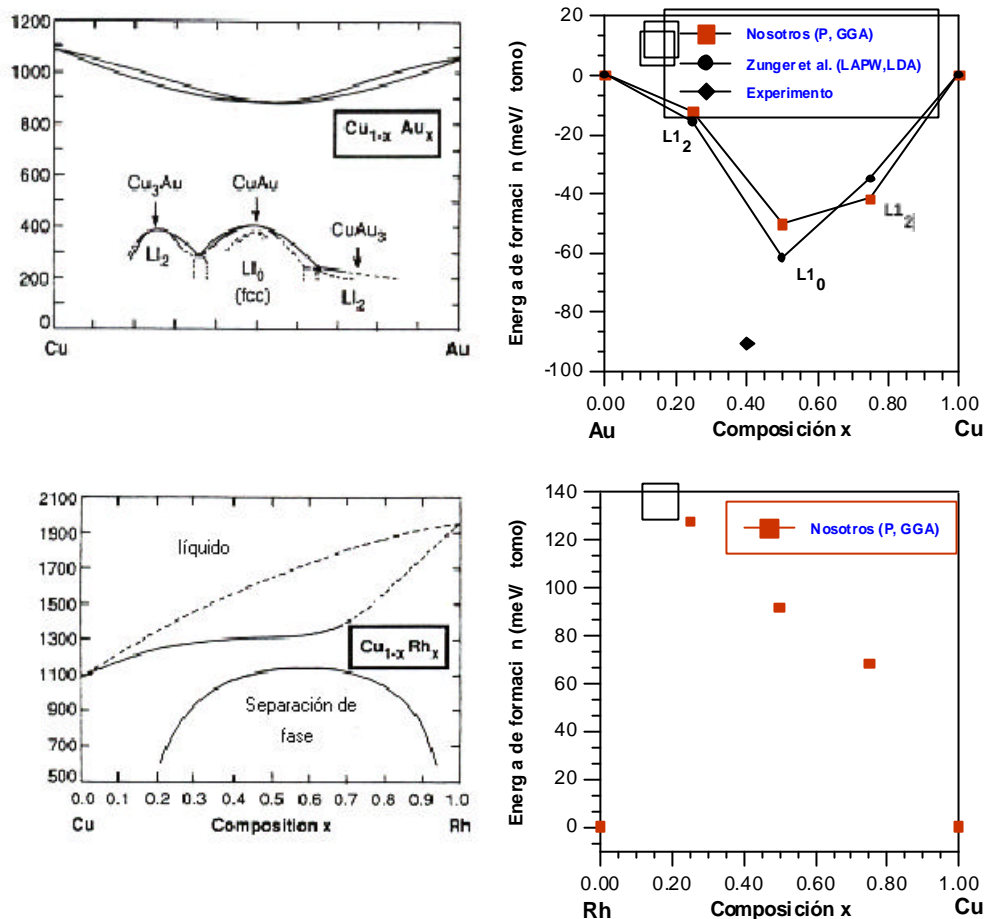


Figura 2 (Continuación). Cálculo de la energía de formación (entalpía de formación) en función de la composición para las aleaciones CuAu y CuRh. A la derecha se muestra el diagrama de fases experimental, cuyo eje vertical corresponde a la temperatura (grados Celsius) y el eje horizontal corresponde a la composición atómica.

Finalmente, en el caso de la aleación CuRh, todas las entalpías de formación calculadas son positivas, en el intervalo de $x=0.2$ hasta aproximadamente 0.8. Por lo tanto, se tiene una separación de fases tal como se observa en el diagrama de fases

experimental (todos los diagramas de fases experimentales se han tomado de la referencia [5]).

Conclusiones

Hemos realizado un estudio preliminar a partir de primeros principios de aleaciones metálicas binarias basadas en Cu. Mientras que las teorías clásicas de química y metalurgia no pueden explicar la aparición de cierta selectividad estructural en aleaciones metálicas, vemos que de forma natural se pueden explicar por medio de teorías electrónicas. En este sentido, el uso de estas teorías permiten estudiar no sólo las fases más estables de una aleación, sino también fases metaestables y de ahí su importancia, debido a que algunas fases son nuevas y no existen reportes experimentales.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido parcialmente apoyado por CONACyT y por la BUAP (VIEP).

Referencias

- [1] B. Winkler, V. Milman, "Ab initio modeling in Crystallography" (Molecular Simulations Inc., 1996).
- [2] James B. Foresman and AE Frisch, "Exploring Chemistry with Electronic Methods" (Gaussian Inc., 1996, Pittsburgh, PA), pag. 7
- [3] Z. W. Lu, S.-H. Wei, Alex Zunger, S. Frota-Pessoa and L. G. Ferreira, *Phys. Rev. B* **44** (1991) 512; Z. W. Lu and Alex Zunger, *Phys.Rev. B* **50** (1994) 6626; C. Wolverton, V. Ozolins and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **57** (1998) 4332.
- [4] D. Vanderbilt, *Phys. Rew. B* **41** (1990) 7892.
- [5] Binary Alloys Phase Diagrams, editado por J. L. Murray, L. H. Bennett y H. Barker (American Society for Metals, Metals Park, OH, 1986).

7. Modelado y caracterización eléctrica de la estructura Al/SRO/Si

^a J. A. Luna-López, ^a J. Carrillo-López y ^b M. Aceves-Mijares

^a Centro de investigaciones en Dispositivos Semiconductores, ICUAP, Apdo. Postal 1615 Puebla, Pue., 7200 México

^b Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Apdo. Postal 51, Puebla, Pue., 7200 México

Resumen

Dispositivos de Aluminio/Óxido de silicio rico en Silicio/Silicio (Al/SRO/Si) se caracterizaron experimentalmente midiendo sus curvas características I-V y C-V., Se utilizaron varios R_0 's. Dependiendo del exceso de silicio, el dispositivo se comporta de acumulación a inversión como un capacitor MOS en deserción profunda o como una unión inducida PN en polarización inversa. El modelado se realizó suponiendo que la región de carga especial (W) varía como la de una unión PN polarizada en inversa y como un capacitor MOS en deserción profunda. La aproximación como una unión PN da una mejor aproximación entre los resultados experimentales y las curvas teóricas. Este dispositivo puede ser usado también como una herramienta analítica. Aquí se estiman características como el tiempo de vida de generación de portadores minoritarios.

Introducción

El óxido de silicio fuera de estequiometría u óxido rico en silicio (SRO) también conocido como polisilicio semiaislante (SIPOS), es un material de dos fases formado por dióxido de silicio con exceso de silicio [1]. El exceso de silicio puede ser tan alto como 90 % para SIPOS [2]. Este material se obtiene normalmente por depósito químico en fase vapor (chemical vapor deposition, mejor conocido por sus siglas CVD) con silano y óxido nitroso como gases reactivos. En este método, la razón de flujo de gas $R_0 = [N_2O]/[SiH_4]$, es usada como un parámetro que determina el exceso de silicio. El SRO obtenido por implantación de silicio en óxido de silicio ha sido también reportado [3].

El comportamiento de esta estructura ya ha sido comparado a una estructura MOS regular [4-6], los dispositivos obtenidos por depósito de SRO sobre silicio y cubierto con un electrodo superficial, muestran diferentes propiedades dependiendo en las características de ambos materiales.

El dispositivo Al/SRO/Si depende del exceso de silicio, la R_o y del tipo y concentración de impurezas en el sustrato de silicio.

Dos dispositivos de mayor importancia han sido desarrollados usando la estructura SRO/Si, uno es el supresor de picos [7], y el otro es un sensor de radiación [10]. Estos dispositivos tienen un comportamiento específico dependiendo de la R_o y la característica del sustrato de silicio. Sin embargo, hasta ahora no hay un modelo que tome en cuenta la R_o y el sustrato de silicio para explicar el comportamiento de la unión SRO/Si.

Uno de estos comportamientos es doble, i.e., tiene un comportamiento dual: como un capacitor MOS y como una unión inducida PN polarizada inversamente. Este dispositivo al cual llamamos capacitor-PN, puede producir una capa de inversión en la superficie del silicio bajo la apropiada polarización; en nuestro caso, el contacto superficial es negativo con respecto al sustrato tipo n. Bajo estas condiciones, la corriente de fuga de la unión PN es conducida a través de la capa SRO. Así el Capacitor-PN podrá detectar radiación [11,12].

En este trabajo, se presentan características experimentales del diodo SRO/Si para diferentes R_o . Un enlace entre el comportamiento de capacitor MOS y unión P-N se realiza. La comprensión del fenómeno físico que ocurre en la unión SRO/Si contribuirá a mejorar el diseño de los dispositivos novedosos mencionados previamente.

Procedimiento experimental

Preparación de las muestras

Películas de SRO fueron depositadas con $R_o = 15,20$ y 30 sobre silicio tipo N (100) con una concentración de impurezas 10^{15} cm^{-3} . Se usó un sistema de paredes calientes de depósito químico en fase vapor (LPCVD) y los gases reactivos usados fueron óxido nítrico y silano. La temperatura de depósito fue de $700 \text{ }^\circ\text{C}$, la presión fue variada de 1.9 a 2.4 Torr. Se diseñaron compuertas de Aluminio sobre la capa de SRO

con área de $9 \times 10^{-4} \text{ cm}^2$. También fue evaporado Aluminio en el contacto trasero. Finalmente las muestras fueron sinterizadas a $450 \text{ }^\circ\text{C}$ en forming gas. El espesor del SRO fue medido después del depósito, usando un elipsómetro Gaetner L117 con un láser de He-Ne a 632.8 nm . El promedio del espesor se presenta en tabla 1.

Mediciones

Las características I-V y C-V fueron medidas usando un sistema controlado por computadora. Para las mediciones de corriente se utilizó un electrómetro Keithley 617, y una fuente de voltaje Keithley 230. Una rampa de paso de voltaje de dos segundos se aplicó para las curvas de IV. Las mediciones C-V se realizaron a una frecuencia de 100 KHz . Se utilizó un analizador C-V Keithley 590 y una fuente de voltaje Keithley 230. Las muestras fueron medidas primero de acumulación a inversión. También se midieron de inversión a acumulación con iluminación al comenzar cada medición para evitar la deserción profunda.

Resultados

Las figuras 1, 2 y 3 muestran características I-V y C-V típicas de los dispositivos $\text{SRO}_{15, 20, 30}$ (el subíndice indica $R_0 = 15, 20$ y 30). Se muestran la corriente y capacitancia sobre la misma gráfica para su comparación. En general para R_0 mayores, la corriente es menor que para R_0 menores como se puede observar en las figuras antes mencionadas. Para estas gráficas es posible obtener el V_{on} el cual se define como el voltaje donde el régimen de alta corriente comienza [4,5] cuando el capacitor está en acumulación. Además, para la curva de capacitancia en acumulación la constante dieléctrica del SRO es obtenida con la bien conocida fórmula:

$$\epsilon_{\text{SRO}} = \frac{t_{\text{SRO}} C_{\text{max}}}{\epsilon_0 A} \quad (1)$$

donde t_{SRO} es el espesor del SRO, C_{max} es la capacitancia en acumulación y A es el área del capacitor. El promedio de la constante dieléctrica y el V_{on} son almacenados en la Tabla 1 para cada R_0 . En polarización inversa, esto es, cuando el capacitor está en inversión superficial, la capacitancia varía como una función del voltaje. Además, cuando R_0 aumenta, la corriente se reduce y la variación de la capacitancia es menos dependiente sobre el voltaje aplicado. Por ejemplo, para SRO_{15} en polarización directa, esto es, cuando la superficie está en acumulación, la corriente a 40 volts está en el rango de 10^{-5} A , pero a -40 volts , es sólo de 10^{-9} A . Para SRO_{20} a 40 volts la corriente es de 10^{-8} A y para -40 volts es sólo de 10^{-10} A . Pero para SRO_{30} , la

corriente, a 70 y -85 volts, es de alrededor de 10^{12} A en polarización inversa, y no hay mucha variación con respecto al voltaje aplicado.

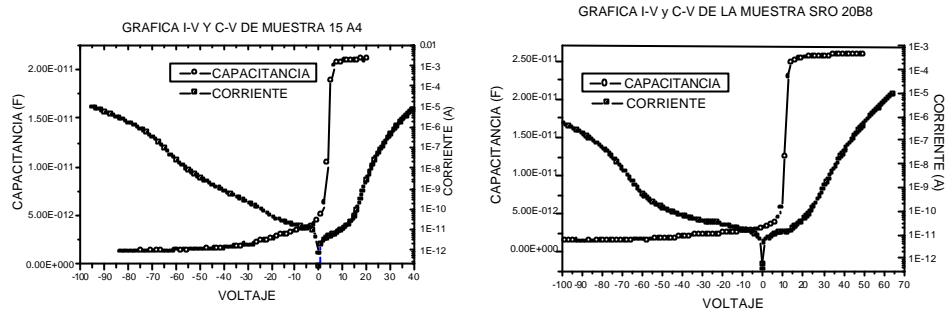


Figura 1. (Izquierda) Características típicas I-V y C-V para Al/SRO₁₅/Si. La corriente se ve claramente asimétrica para voltaje positivo y negativo. $V_{on}=14$ volts. La curva de capacitancia vs. voltaje fue obtenida comenzando en acumulación y finalizando en inversión.

Figure 2. (Derecha) Características típicas I-V y C-V para Al/SRO₂₀/Si. La corriente muestra una clara asimetría para el voltaje negativo y positivo. $V_{on}=16$ volts. La curva de capacitancia vs. voltaje fue obtenida comenzando en acumulación y finalizando en inversión.

Para SRO₃₀ tenemos dos características diferentes de C-V: en la figura 3(a) es medida de acumulación a inversión. La curva C-V se observa similar a SRO_{15 y 20} en la figura 1 y 2. La corriente es la más pequeña para las Ro presentadas. En polarización directa no hay V_{on} antes de 100 volts, este es el voltaje máximo de nuestro equipo. Unos cuantos dispositivos dan un V_{on} mayor a 100 volts, por lo tanto, éstos no se tomaron en cuenta en el promedio tratado en la tabla 1. En la figura 3(a) observamos también que de 0 a 15 volts la corriente disminuye y entonces ligeramente aumenta como se discute en [4]. La corriente en polarización inversa es tan baja como algunos picoamperes a -100 volts. Sin embargo, en la figura 3(b) se tiene otro comportamiento del dispositivo con SRO₃₀. En este caso la medición fue realizada de inversión a acumulación, y la carga atrapada positiva en el SRO produce la forma de la curva C-V en la dirección negativa. La forma de la curva C-V es debido a la carga atrapada como observamos en [4, 5]. Como es de esperarse, el efecto de la carga atrapada es menor conforme baja la Ro. La figura 3(b) es interesante, en ésta se exhibe claramente el comportamiento de la capa SRO sobre el silicio. La capa SRO con $R_o = 30$ tiene una gran resistividad. Debido a la carga positiva fija en la capa de SRO, la superficie de silicio está en acumulación para voltajes mayores que -55 volts. Hasta aquí la capacitancia es máxima, ésta es de la capa de SRO únicamente. Entre -60 volts y -95 volts, la capacitancia se reduce a cerca de 7 pf. Debido a la capa de

inversión en la superficie de silicio acorde a la teoría de la capacitancia MOS. En parte de esta región, la corriente externa es alrededor de 10^{-11} A, pero para -85 volts, la corriente externa comienza a drenarse de la capa de inversión. Sin embargo, es sólo hasta cerca de -95 volts, que la capacitancia decrece del valor de inversión de 7 pf.

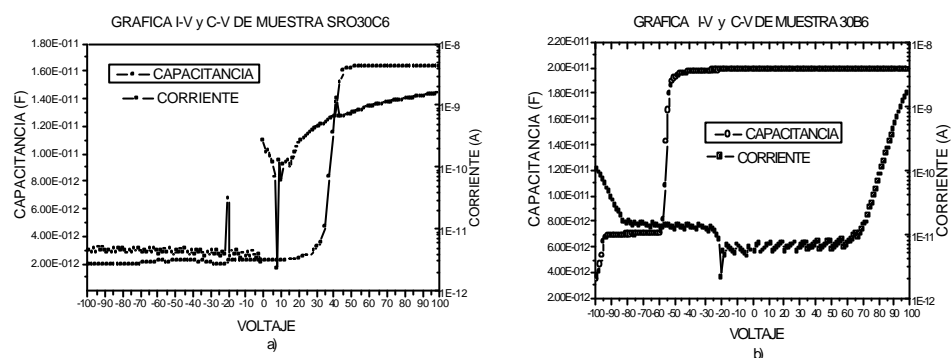


Figura 3. Características típicas I–V y C–V para Al/SRO₃₀/Si. La corriente muestra una clara asimetría para voltaje positivo y negativo. (a) La curva capacitancia vs. voltaje fue obtenida comenzando en acumulación y finalizando en inversión. Específicamente para este dispositivo el V_{on} es mayor a 100 volts. (b) $V_{on}=67$ volts. La capacitancia muestra una clara forma debido a la carga atrapada en el SRO comparada con (a), La curva C–V fue realizada de inversión a acumulación.

Discusión de resultados

La capa de inversión en el dispositivo SRO/Si dependerá de varios parámetros como: tipo de silicio, concentración del sustrato, resistividad del SRO y voltaje aplicado. Por otra parte, la corriente a través del SRO es limitada por los mecanismos de conducción. Básicamente los electrones pueden moverse en el SRO, pero no los huecos. Se aprecia en las figuras que en polarización inversa, esto es cuando el capacitor está en inversión superficial, la capacitancia varía con el voltaje. Además cuando R_o aumenta, la corriente se reduce (estos cambios en la corriente también pueden estar afectados por el espesor de la película de SRO) y la capacitancia es menos dependiente del voltaje aplicado. Para la capa SRO/Si-N considerada en la figura 3, una capa de inversión se forma y se mantiene a -100 volts aplicados. En la figura 3(b), igual que el SRO, drena corriente a cerca de -80 volts, la curva C-V no cambia hasta -95 volts. Esto indica que la capa de deserción no varía, y la inversión

superficial es sostenida hasta -95 volts. Esto da lugar a una capa inducida P^+ asociada a una capa de deserción en sustrato tipo N, similar a la unión P-N. Este deberá ser un mecanismo de recombinación de huecos de la capa de inversión y electrones moviéndose a través de la compuerta de Aluminio hacia el SRO. El factor limitante de esta recombinación, será la resistividad del SRO y el proceso de generación en la región de deserción del silicio. El proceso de generación proveerá los nuevos huecos para reemplazar la recombinación de huecos en la capa de inversión superficial. La resistividad del SRO tendrá que ser bastante alta para tener el flujo de electrones bajo. Cuando aumenta en magnitud el voltaje, la corriente aumenta, esto hace posible que la capa de inversión sea conservada. Ver, por ejemplo, la figura 3(b) para voltaje de -95 a -100 volts. En este caso, la capa de deserción crecerá y un comportamiento similar a una unión P-N polarizada inversamente, tendrá lugar. No es el caso en la figura 1, donde la corriente crece rápido para tener la capa de inversión. En este caso, es necesario buscar más, antes de decir que SRO/N-Si no tiene el comportamiento de una unión P-N. Para SRO₁₅ la corriente a voltajes negativos aumenta continuamente lo que nos lleva a pensar que la capa de inversión no se forma. A pesar de este hecho, observamos un comportamiento similar a una capacitancia MOS en deserción profunda. En contraste, para las estructuras SRO_{20,30}, la corriente aumenta lentamente bajo la aplicación de cierto voltaje, entonces la pendiente cambia, y la corriente aumenta rápidamente. Se puede suponer que la corriente aumenta más rápido porque la capa de inversión fue barrida completamente. En el régimen de baja corriente antes del V_{on} , el aumento de la corriente es predominantemente debido a la generación en la región de deserción, como en una unión P-N. Entonces es posible estudiar los dispositivos desde dos puntos de vista: Uno con SRO₁₅ como un capacitor MOS en probable deserción profunda, y los dispositivos SRO_{20,30} como un capacitor MOS y una unión inducida P-N dependiendo del voltaje aplicado.

Análisis para SRO₁₅

Para la curva C-V, es posible estimar el ancho de deserción por la bien conocida fórmula:

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{max}} + \frac{1}{C_S} \approx \frac{1}{C_S} \quad (2)$$

donde C_S es la capacitancia del semiconductor.

Además, el voltaje en la superficie del silicio, V_s , puede encontrarse sustrayendo el voltaje a través de la capa SRO del voltaje aplicado. El voltaje a través de la capa SRO se encuentra de las características I-V del dispositivo SRO-Si, cuando el voltaje aplicado es positivo y la superficie del silicio está en acumulación. Se asume que el voltaje a través del silicio es despreciable bajo esta condición. El voltaje de banda

plana de la curva de capacitancia será usado correctamente para cualquier carga fija. La región de carga espacial en deserción, W_d , que se obtiene de las mediciones de la capacitancia contra raíz cuadrada del voltaje V_s para la muestra 15 A4, aparece en la figura 4, también la curva teórica en deserción profunda es obtenida de:

$$W = \sqrt{\frac{2e_{Si} V_s}{qC_B}} \quad (3)$$

La figura 4 muestra la curva experimental W_d , la cual se aproxima a la curva teórica en deserción profunda.

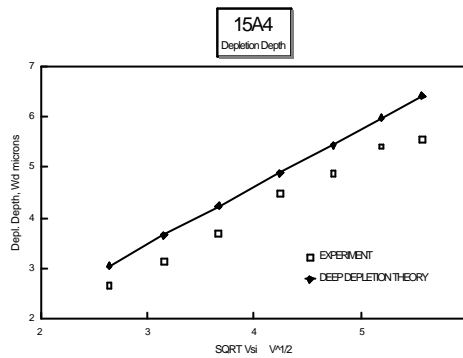


Figura 4. Gráfica del ancho de deserción como una función de la raíz cuadrada del voltaje para la muestra 15 A4, la aproximación de la deserción profunda es para $C_B=1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

Análisis para SRO₂₀ Y SRO₃₀.

El ancho de deserción para estos dispositivos se trata en la figura 5 como una función del voltaje. Dos regiones se pueden observar: Región capacitor MOS y la región de una unión PN. En la región que corresponde al capacitor MOS, una capacitancia constante debida a un ancho de deserción máximo se observa y, en la región de unión P-N, un ancho variable en función del voltaje aplicado se presenta. Una aproximación simple es modelada de la región de deserción como un capacitor MOS y como una unión PN, en las regiones de voltaje respectivo. En la unión inducida PN el ancho de deserción es obtenido de la ecuación [14].

$$W(V) = \sqrt{\frac{2e_{Si} |\phi_b - V|}{qC_B}} \quad (4)$$

donde ϕ_b es el potencial Inter-construido y V es el voltaje aplicado. En este caso, ϕ_b no tiene el mismo significado como en una unión PN, porque en una unión PN normal, la ϕ_b es el resultado de la transferencia de carga entre los semiconductores P y N, y depende sólo de la concentración del sustrato. En la región del capacitor- PN, la

unión PN es un resultado del voltaje inducido en la superficie de inversión, y depende del voltaje aplicado y la concentración del sustrato, entre otros parámetros. Dicho de una manera simple, el voltaje donde el comportamiento PN comienza, deberá ser considerado como ϕ_b para estos dispositivos.

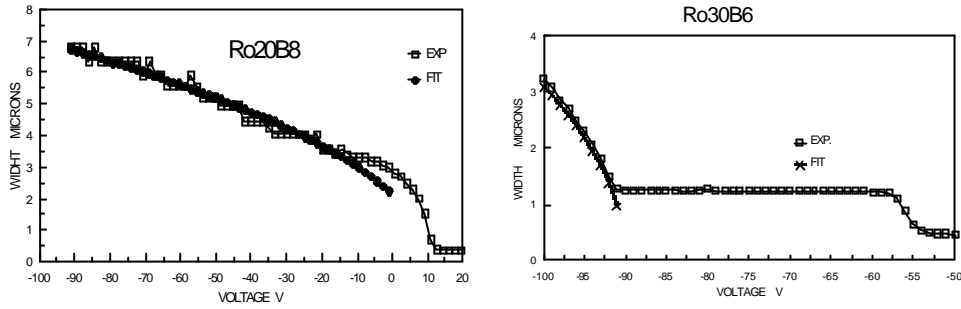


Figura 5. Ancho de desercion como una función del Voltaje usando la aproximación PN, (a) Muestra 20B8, $C_B = 2.8 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $\phi_b = 10 \text{ V}$. (b) Muestra 30B6, $C_B = 1.3 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $\phi_b = 90 \text{ V}$.

Para (4) gráficamos W^2 vs V y obtenemos una función lineal con pendiente m , entonces:

$$C_{Befe} = \frac{2}{qm e_{si}} \quad (5)$$

donde C_{Befe} es la concentración efectiva del sustrato, es decir, el voltaje aplicado afecta al sustrato y una diferente concentración en el sustrato se obtiene para cada muestra. Se anota en el pie de la figura 5 la concentración efectiva del sustrato para cada muestra especificada.

Ya ha sido propuesto que por debajo del voltaje de inversión, la corriente es limitada por la generación térmica en la región de deserción [4, 15], entonces la corriente puede ser expresada como:

$$I = \frac{qn_i W(V)}{2t_g} A \quad (6)$$

Entonces el tiempo de vida de generación, τ_g , puede ser estimado como:

$$t_g = \frac{qn_i W(V)}{2I} A \quad (7)$$

de las figuras, W e I son conocidas y entonces el tiempo de vida se muestra en la tabla 1. En otros trabajos [16] encontramos para este tipo de obleas $\tau_g \approx 1 \times 10^{-6}$ segundos.

Conclusiones

Curvas características I-V y C-V fueron obtenidas para el dispositivo Al/SRO/Si con varias R_o . El ancho de deserción fue obtenido para estas curvas. Los anchos fueron modelados usando una aproximación en deserción profunda junto con una unión PN encontrando un buen acuerdo entre el resultado experimental y las curvas teóricas obtenidas. En la región PN una concentración efectiva en el sustrato se tuvo que utilizar. Cuando R_o aumenta el MOS tiende a dominar la estructura, y la carga atrapada es más relevante. Conforme R_o disminuye, es posible que el comportamiento PN no sea obtenido, y la carga atrapada no tendrá un papel importante. Fue tratado también que es posible utilizar la estructura Al/SRO/Si para estimar características constantes de los materiales constituyentes, por ejemplo el tiempo de vida de generación.

R_o	t_{SRO} Å	ϵ_{SRO}	V_{on} Volts	V_{on} Max V	V_{on} Min V	τ_g μ seg
15	1584	4.81	11.3	16.5	5.0	2.23
20	1207	4.31	19.75	21.0	15.0	8
30	1587	3.85	66.5	74.5	53.0	2.8

Tabla 1. Valores promedio para diferentes parámetros

Agradecimientos. Damos las gracias a Pablo Alarcón y Mauro Landa por la ayuda prestada en la preparación de las muestras. Proyecto apoyado por CONACyT.

Referencias

- [1] D. Dong, E. A. Irene, D. R. Young, J. "Preparation and some properties of CVD Si – Rich and Si_3N_4 films" *Electrochem. Soc.* 125, 819 (1978).
- [2] M. Hamasaki, T. Adachi, S. Wakayama, M. Kikuchi, "Crystallographic study of Semi insulating Polycrystalline Silicon (SIPOS) doped with oxygen atoms" *J. Appl. Phys.* 49, 3987 (1978).
- [3] Kalnitsky, A. R. Boothroyd, J. P. Ellul. "A model of charge transport in thermal SiO_2 implanted with Si" *Solid-State Electronics* 33, 893 (1990).
- [4] M. Aceves, C. Falcony, A. Reynoso, W. Calleja, A. Torres. "The conduction properties of the silicon /off – Stoichiometric SiO_2 diode" *Solid-State Electronics* 39, 637 (1996).
- [5] M. Aceves, C. Falcony, J. A. Reynoso, W. Calleja, R. Pérez. "New Experimental Observations on the Electrical Characteristics of The Al/SRO/Si Diode, and Annealing Effects" *Material science in semiconductor processing* 2 173 (1999).
- [6] M. Aceves, J. Bedraza, J. Apolinar Reynoso-Hernandez, C. Falcony, and W. Calleja. "Study on the Al/Silicon Rich Oxide/Si structure as a surge suppresser, DC, frequency response and modeling." *Microelectronics Journal* 30 855 (1999)

- [7] J. Méndez, M. Aceves, J. Pedraza. "Electronic Model of a surge suppressor made of silicon rich oxide(SRO) and Silicon" 2000 IEEE Microelectronics Reliability and Qualification Workshop pp.P5. Glendale, CA. USA Noviembre 2000.
- [8] M. Aceves, J. Pedraza, A. Malik, J. Carranza, F. Flores, J. Méndez, J. Carrillo, C. Domínguez, C. Falcony. "Some scientific and technological results of the research on the off stoichiometry silicon oxide" A ser publicado en Computer and systems
- [9] M. Aceves, A. Malik , J. Carrillo1, F. Flores, J. Carranza. "New radiation sensor using transparent electrode and the induced p – n junction in a silicon rich oxide/si structure". Ibersensor 2000, pp. 112-115.. Buenos aires argentina.
- [10] M. Aceves, J. Carrillo, W. Calleja, C. Falcony, P. Rosales. "Duality MOS – PN Junction in the Al/SRO/Si Structure as a Radiation Sensor" Thin Solid Films, Vol. 373, No. 1 pp.134 – 136 (2000).
- [11] M. Aceves, W. Calleja, C. Falcony, J. A. Reynoso – Hernández "The Al/Silicon Rich Oxide/Si P - N Induced Junction As A Photodetector" Revista Química Analítica, 18, (Suppl.1):5. (1999).
- [12] Hielscher F. H. Preier H. M. " Non equilibrium C – V and IV Characteristic of metal Insulator Semiconductor capacitors" Solid State electronics Vol. 12, pp 527 – 538, (1969)
- [13] Mariano Aceves Ph.D. Tesis, CICESE, Mexico 1997
- [14] "Physics of semiconductor devices" S.M. Sze. John Wiley (1969)
- [15] M. Aceves, A. Malik, R. Murphy ."The FTO/SRO/Si Structure as a Radiation Sensor". A ser publicado
- [16] P. Peykov, T. Dias, M. Aceves. "Influence of segregation annealing time on the gettering process" Revista Mexicana de Física. Vol. 46, No 5, pp 485 – 489 (2000).

8. Modelo de Bean generalizado para superconductores isotrópicos bajo campos magnéticos cruzados

Carolina Romero Salazar

Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Post J-48, Puebla, Pue. 72570

Resumen

Se estudia la respuesta magnética de superconductores duros isotrópicos sometidos a campos magnéticos que varían en magnitud y dirección resolviendo las ecuaciones de Maxwell junto con la ecuación constitutiva que propone el modelo generalizado de estado crítico de Bean. Con este modelo se reproduce exitosamente el fenómeno del colapso del momento magnético anunciado en literatura reciente.

Las propiedades electromagnéticas de los superconductores tipo II irreversibles también llamados “duros”, han sido estudiadas experimental y teóricamente desde hace mucho tiempo. Con el descubrimiento de los materiales superconductores de altas T_c , el estudio de la respuesta electromagnética de los superconductores duros ha obtenido un renovado impulso. El modelo más simple para explicar las curvas de magnetización irreversibles de superconductores duros es el modelo fenomenológico del estado crítico de Bean [1] el cual utiliza solamente un parámetro, la densidad de corriente crítica J_c . En el trabajo original de Bean [1] se trató el caso de una muestra superconductora sometida a campos magnéticos paralelos; en esta geometría y de acuerdo con el modelo de Bean la densidad de corriente J , que es paralela al campo eléctrico E , puede tomar los valores $\pm J_c$. Bean generalizó su modelo de estado crítico [2] para el caso en que el campo magnético aplicado varía no sólo en magnitud sino también en dirección suponiendo que el vector de densidad de corriente \mathbf{J} siempre apunta en dirección del campo eléctrico inducido \mathbf{E} y que su magnitud es $|\mathbf{J}|=J_c$. La ecuación material que describe este modelo generalizado de Bean puede escribirse como [3]:

$$\mathbf{J} = J_c(B) \frac{\mathbf{E}}{|\mathbf{E}|}. \quad (1)$$

A pesar de su simplicidad, el modelo (1) ha permitido interpretar fenómenos tan complicados como el colapso del momento magnético de un superconductor sometido a un campo magnético estático H_z y a otro alterno perpendicular al primero H_y [3]. En el trabajo [3] se dedujo cualitativamente que la supresión del momento magnético está asociada a la formación de zonas de colapso donde la magnitud de la inducción magnética se vuelve constante y que el modelo (1) genera dichas zonas. Recientemente [4], se observó experimentalmente la evolución del momento magnético $\langle M_z \rangle$ conforme oscilaba el campo magnético H_y . Por tal razón, es de gran interés comparar las predicciones del modelo de Bean (1) con el experimento y las de otros modelos [4] presuntamente más sofisticados.

El objetivo de este trabajo es estudiar el comportamiento del momento magnético para diferentes estados iniciales (paramagnético y diamagnético) de un superconductor sujeto a la acción de campos magnéticos cruzados.

Empleando las ecuaciones de Maxwell y la ecuación constitutiva (1), se calcula la inducción magnética \mathbf{B} dentro de una placa superconductora de espesor d a la que se le aplica un campo magnético $\mathbf{H}_a = H_y \mathbf{y} + H_z \mathbf{z}$. Además, se utiliza una densidad de corriente crítica dependiente de la inducción magnética de la forma:

$$J_c(\mathbf{B}) = \frac{J_c(0)}{\left(1 + \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{B}^*}\right)^n}, \quad (2)$$

donde $J_c(0)$, n y \mathbf{B}^* son parámetros de ajuste. Dando los parámetros \mathbf{B}^* , n y el primer campo de penetración (valor tomado de las curvas experimentales), la densidad de corriente crítica máxima se obtiene con la expresión:

$$J_c(0) = \frac{\mathbf{B}^*}{(n+1)\mu_0 x_m} \left[\left(1 + \frac{\mathbf{B}_p}{\mathbf{B}^*}\right)^{n+1} - 1 \right], \quad (3)$$

con $x_m = d/2$. Se calcula la magnetización promediada sobre el espesor de la placa, $\langle \mathbf{M} \rangle$, dada por la fórmula:

$$\langle \mathbf{M}(\mathbf{H}) \rangle = \int_0^d \left(\frac{\mathbf{B}(x)}{\mu_0} - \mathbf{H} \right) dx. \quad (4)$$

La figura 1 exhibe el ciclo de histéresis de la componente $\langle M_z \rangle$ de la magnetización promedio $\langle \mathbf{M}(\mathbf{H}) \rangle$ (4) de una placa superconductora de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ de espesor d a

la que se le aplica un campo magnético H_z paralelo a la superficie de la muestra (paralelo al plano **ab** en donde la capacidad de conducción de corriente del YBCO puede considerarse isotrópica). Para obtener la figura 1 se han utilizado los parámetros $d=3 \times 10^{-4}$ m, $n=0.5$ y $B^*=0.2$ T, la densidad de corriente crítica máxima $J_c(0)$ se ha ajustado al valor del campo de penetración $B_p \equiv \mathbf{m}_0 H_p = 8.565 \times 10^{-2}$ T de la muestra. Se observa que variando cíclicamente a H_z en el rango $[-0.26 \ 0.26]$ T se genera el ciclo de histéresis el cual se une a la curva, que inicia en $\mathbf{m}_0 H_z = 0$ T, en el valor $\mathbf{m}_0 H_z = 8.549 \times 10^{-2}$ T que es muy cercano al valor del campo de penetración B_p obtenido experimentalmente. En la curva de magnetización (figura 1), obtenida teóricamente, se muestran los puntos **P** y **D** de las ramas paramagnética y diamagnética, respectivamente, que corresponden a los estados iniciales de la muestra antes de experimentar las oscilaciones del campo perpendicular H_y .

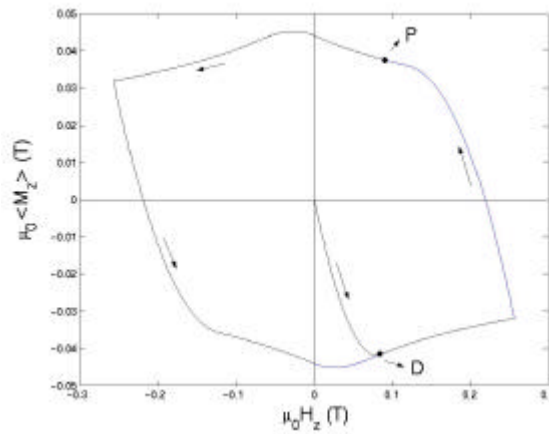


Figura 1 Curva de magnetización $\langle M_z \rangle$ de una placa superconductora de YBCO sometida a un campo magnético $H_z \parallel$ plano **ab**

La figura 2 presenta la evolución de la componente $\langle M_z \rangle$ del momento magnético de los estados paramagnético y diamagnético de la placa superconductora de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (la misma que en la figura 1) conforme se aplica el campo magnético transversal H_y con una amplitud máxima de oscilación $H_{y, \text{máx}}$ ($H_{y, \text{máx}} < H_z = H_p$). Los datos utilizados para d , n , B^* y B_p son los mismos que para la figura 1.

El resultado (figura 2) reproduce exitosamente el fenómeno del colapso de la magnetización promedio $\langle M_z \rangle$ observado en el experimento [4]. Se ve claramente que al oscilar el campo H_y con una amplitud máxima $H_{y, \text{máx}} = 2.569 \times 10^{-2}$ T, la disminución de la magnetización desde los estados iniciales paramagnético **P** y

diamagnético **D** ocurre cuasi-simétricamente. Este resultado es mejor que los obtenidos usando otras teorías más sofisticadas; los modelos empleados en la referencia [4] sólo logran una descripción cualitativa de este fenómeno.

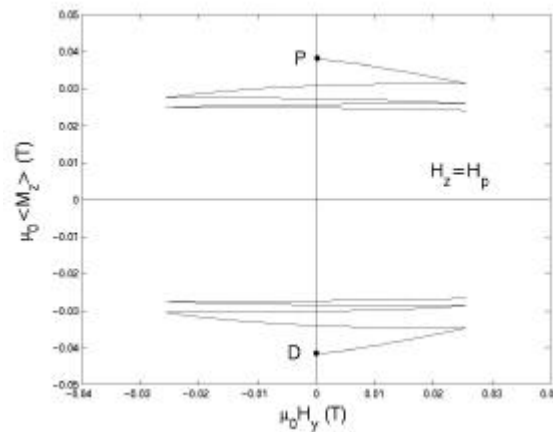


Figura 2. Dependencia de $\langle M_z \rangle (H_y)$ sobre los ciclos de un campo magnético transversal H_y con $m_p H_z = 8.565 \times 10^{-2}$ T. Las curvas P y D corresponden a los estados iniciales paramagnético y diamagnético, respectivamente

Se puede concluir que el cálculo numérico, usando el modelo generalizado de estado crítico de Bean para superconductores duros sujetos a campos magnéticos cruzados, logra reproducir de manera exitosa el fenómeno del colapso del momento magnético.

Agradecimientos. Agradezco al Dr. Felipe Pérez Rodríguez por su apoyo en la planeación y realización de este manuscrito, así como sus valiosas sugerencias.

Referencias

- [1] C. P. Bean, *Phy. Rev. Lett.*, **8**, 250 (1962).
- [2] C. P. Bean, *J. Appl. Phys.*, **41**, 2482 (1970).
- [3] L. M. Fisher, A. V. Kalinov, I. F. Voloshin, I.V. Baltaga, K. V. Il'enko, and V.A. Yampol'skii, *Solid State Commun.*, **97**, 833 (1996), y sus Refs. 1-4.
- [4] L. M. Fisher, K. V. Il'enko, A.V. Kalinov, M. A. R. Le Blanc, F. Pérez-Rodríguez, S. E. Savel'ev, I. F. Voloshin and V.A. Yampol'skii, *Phy. Rev. B*, **61**, 15382 (2000).

9. Detección subterránea de rayos cósmicos de alta energía en el CERN

S. Román¹, A. Fernández², E. Gámez², E. Linares³, R. López², A. Rosado¹ y A. Zepeda³

¹*Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", BUAP*

²*Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, BUAP*

³*Depto. Física, CINVESTAV-IPN, México*

Resumen

En el presente trabajo se exponen los resultados de la operación de un detector de muones subterráneo instalado en la caverna de UA2 (BA4), situado a 50 m de profundidad, en CERN, Suiza. Estos muones, son producto de la interacción de rayos cósmicos con las moléculas de la atmósfera. Con este detector se obtiene información para la posible construcción de un detector híbrido para el estudio de rayos cósmicos entre el intervalo de energía de 10^{14} y 10^{16} eV. Este prototipo consta de 4 cámaras de arrastre puestas una encima de la otra, de 6m x 4m, usadas en el experimento UA1, junto con dos módulos de otro tipo de cámaras de arrastre, doble plano, usadas en el experimento DELPHI, colocadas arriba del arreglo anterior. Además, se incluyeron en este diseño, tres contadores de plástico centellador que sirvieron de "disparo" para el diseño experimental. Se describe el trabajo realizado dentro de la construcción, puesta en marcha del detector, así como el análisis de los datos obtenidos en este detector, haciendo énfasis en los siguientes puntos: i) encontrar una mezcla de gas no inflamable que no redujera la eficiencia de las cámaras; ii) encontrar una densidad máxima de muones (trazas o trayectorias) que pudieran ser reconstruídas en las cámaras y iii) posible uso de un material absorbente que pudiera eliminar chubascos inducidos en las cámaras. Finalmente, se discute el procedimiento de toma de datos y el análisis de reconstrucción de trazas de muones en las cámaras.

Introducción

Los rayos cósmicos, hasta el día de hoy, siguen siendo un gran misterio, aún se desconoce la fuente que los produce, su naturaleza y los mecanismos de aceleración para alcanzar las energías tan elevadas que poseen estas partículas (esta energía puede estar entre 10^{14} y 10^{20} eV). La medición precisa del espectro de energía de los rayos cósmicos y la composición química de estos en la vecindad de 10^{15} a 10^{20} eV puede

descifrar ligeramente el origen de estos rayos y por consiguiente sus mecanismos de aceleración, ya que al conocer estos datos, se puede saber si su origen es galáctico o extragaláctico. Esta composición es conocida en mediciones directas por medio de satélites y experimentos en globo sólo para energías inferiores a 10^{14} eV. Sin embargo, para energías más altas, debemos estudiarlos con detectores colocados en la superficie y/o subterráneos.

Los chubascos son caracterizados por la distribución de las componentes muónica y electromagnética a nivel del suelo y por distribuciones de muones en diferentes niveles dentro de la tierra. Por lo que se puede pensar que con experimentos a profundidades modestas, podrían ser complementarios a los muchos estudios previos ya existentes, tanto subterráneos como en la superficie.

De acuerdo a lo expuesto anteriormente, se tiene la propuesta de construir un experimento que empleará dos tipos de detección y en dos regiones, una en la caverna de PA4 en el túnel del nuevo acelerador LHC del CERN, usando un arreglo de cámaras de arrastre y otro en la superficie arriba del anterior, usando un arreglo de plásticos centelladores. Este trabajo, por consiguiente, pretende demostrar que tan viable puede ser el uso del arreglo de cámaras de muones.

Diseño experimental

Se instaló un prototipo en la parte subterránea del área de UA2 (BA4) en CERN, Francia-Suiza, a una profundidad de 50 m, utilizando cámaras de muones empleadas en los experimentos de UA1 y DELPHI, ambos detectores son cámaras de arrastre multiplacas con "espacio de arrastre" de ± 7.5 cm (UA1) y ± 10 cm (DELPHI).

La figura 1 muestra una fotografía del prototipo en el área de UA2. Cuatro cámaras de muones (4m x 6m) están localizadas una encima de la otra con una precisión de 0.5 mm. Estas cámaras están compuestas de tubos de aluminio individuales los cuales están pegados uno con otro para formar una cámara rígida y robusta conformada con cuatro planchas, dos por proyección. Dos planos adyacentes ayudan a resolver la ambigüedad inherente de izquierda-derecha en las cámaras.

Además de las cámaras que se mencionaron anteriormente, se utilizaron dos módulos de cámaras tipo "doble plano" usadas en el experimento DELPHI, éstas fueron montadas arriba del arreglo anterior. La información que nos proporcionan estas cámaras es la posición de los registros, en la dirección transversal se obtiene por

medio del tiempo de arrastre y a lo largo del ánodo, por medio de la diferencia de tiempos entre los dos extremos del alambre.



Figura 1. La última versión del diseño experimental en el área de UA2, en esta fotografía sólo se puede apreciar un plástico centellador que sirvió de disparo, está sobre la mesa, los otros dos están en el techo, arriba del experimento.

Para tener suficiente información acerca de un posible uso de un absorbente (acero), se hicieron dos tipos de arreglos experimentales, la diferencia entre éstos consistió, desde luego, en el absorbente y en la distribución de los contadores que sirvieron de disparo, éstos fueron plásticos centelladores.

Todo el arreglo en su conjunto, así como ambos diseños, fueron disparados por contadores localizados entre y fuera de las cámaras, estos contadores consisten en plásticos centelladores de dos medidas, tres de 4m x .3m (PC1) y tres de 1m x .52 m (PC2). Se colocan de la siguiente manera, PC1: uno junto al arreglo de las cámaras, paralelo al lado de 4m de UA1 y otros dos en otro plano (arriba del diseño experimental) y los PC2 quedaron detro del arreglo de las cámaras UA1, uno en la parte superior, otro encima de la tercera cámara y el último encima de la primera.

Resultados

Se probaron diferentes porcentajes de mezcla de gas, quedando por último de la siguiente forma 90% Ar/5% CO₂/ 5% CH₄. Para esta mezcla se obtuvo la eficiencia mostrada en las figuras 2 para las cámaras UA1 y DELPHI. La resolución espacial está dada en la siguiente tabla.

Detector	cámaras UA1		cámaras DELPHI	
Condición	$ a < 15^0$	$15^0 < a < 30^0$	ánodos	Línea de retraso
RMS de distribución residual	0.81 mm	0.84 mm	0.79 mm	8.4 mm

Tabla 1: Resolución espacial de las cámaras de arrastre (a ángulo de la traza con respecto a la vertical).

Con el absorbente pudimos eliminar dubascos inducidos dentro de la caverna, de esta forma realizamos un buen análisis con los datos obtenidos.

Trabajando con la eficiencia máxima obtenida con la mezcla dada anteriormente, se corrió el experimento durante un tiempo efectivo de 3.7×10^6 seg, grabándose cerca de 2.4×10^6 eventos. Con estos eventos, nuestro siguiente paso era reconstruir trazas producidas por muones, cabe mencionar que las cámaras de arrastre son aparatos para reconstruir las trayectorias de varias partículas.

Para reconstruir las trazas en eventos de multimuones, se ha desarrollado un algoritmo basado en el método de filtro Kalman. Todas las trazas candidatas, con $\pm 50^0$ de la vertical, son agrupadas usando algunos de los dos registros de los diferentes planos. Las trazas candidatas son entonces prolongadas a través de los otros planos y los registros son rechazados si $\chi^2 > 10$ considerando un error de medición de 1 mm. Las trazas candidatas son aceptadas si ellas tienen al menos 5 registros de los posibles 8 y al menos un registro en cada cámara. Esto produce una eficiencia en la reconstrucción de las trazas de $\sim 95\%$ para una eficiencia de la cámara de 90%.

Después de que todas las trazas candidatas han sido encontradas, son usadas para encontrar la dirección más probable para el "mechón de muones". Un factor de calidad en la traza es entonces calculado basado en el número de registro en la traza candidata, el ajuste χ^2 de la traza y su desviación de la dirección más probable. Las trazas candidatas son entonces ordenadas de acuerdo a la calidad, la mejor traza es aceptada y sus registros son sustraídos de aquellos de las otras candidatas. La calidad de las otras son entonces recalculadas y el procedimiento es repetido hasta que todas las trazas candidatas han sido examinadas. Las trazas aceptadas son usadas para refinar la estimación de la dirección más probable del "mechón" y el procedimiento es repetido, con el requisito adicional que las candidatas estén con 0.5^0 de la dirección más probable, con esto quitamos algunos registros, después volvemos hacer lo mismo con los registros que quedaron fuera, los volvemos a analizar, ajustándonos ahora a la dirección del mechón (figs. 3).

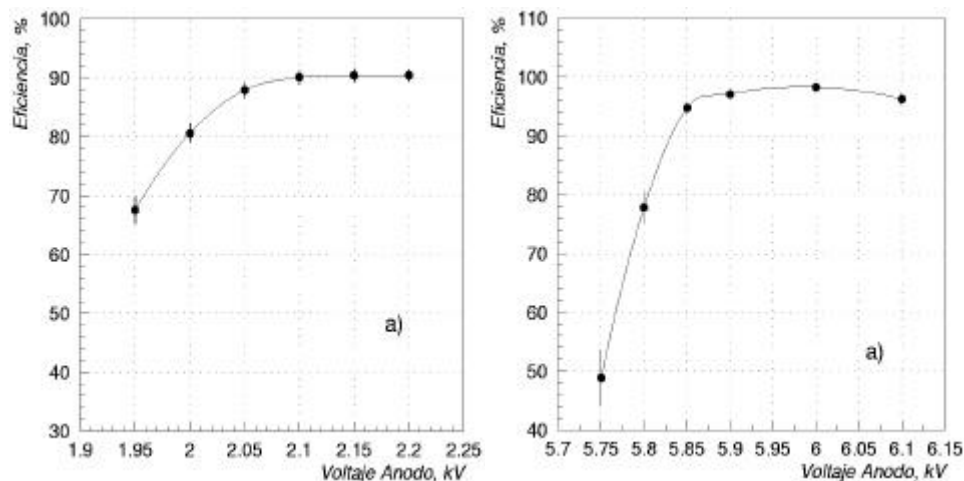


Figura 2. Calibración de las cámaras UA1 (izquierda) y DELPHI (derecha) como función del voltaje del ánodo para la mezcla de gas Ar:CO₂:CH₄ 90:5:5%.

Conclusiones

De acuerdo a los resultados obtenidos, se pudo encontrar una mezcla de gas inflamable que dió una muy buena eficiencia en las cámaras. Durante la operación del primer prototipo, sin el absorbente, teníamos datos con chubascos electromagnéticos inducidos dentro de la caverna, lo cual dificultaba la reconstrucción de trazas. Estos eventos pudieron ser filtrados colocando como absorbente una plancha de acero de 10 cm de espesor. Por último, se pudo conocer la densidad de los mechones de muones a la distancia en que se operó el prototipo (50 m), donde se pudo reconstruir hasta 100 trazas en un evento. Se debe de considerar que con un arreglo de este tipo, conociendo el momento del muón con que pueda sobrevivir a cierta profundidad y la densidad de trazas de mechones de muones en comparación con la cantidad de partículas recolectadas en la superficie, se puede determinar la naturaleza de la partícula primaria dentro del intervalo que se propone a investigar ($10^{14} - 10^{16}$ eV).

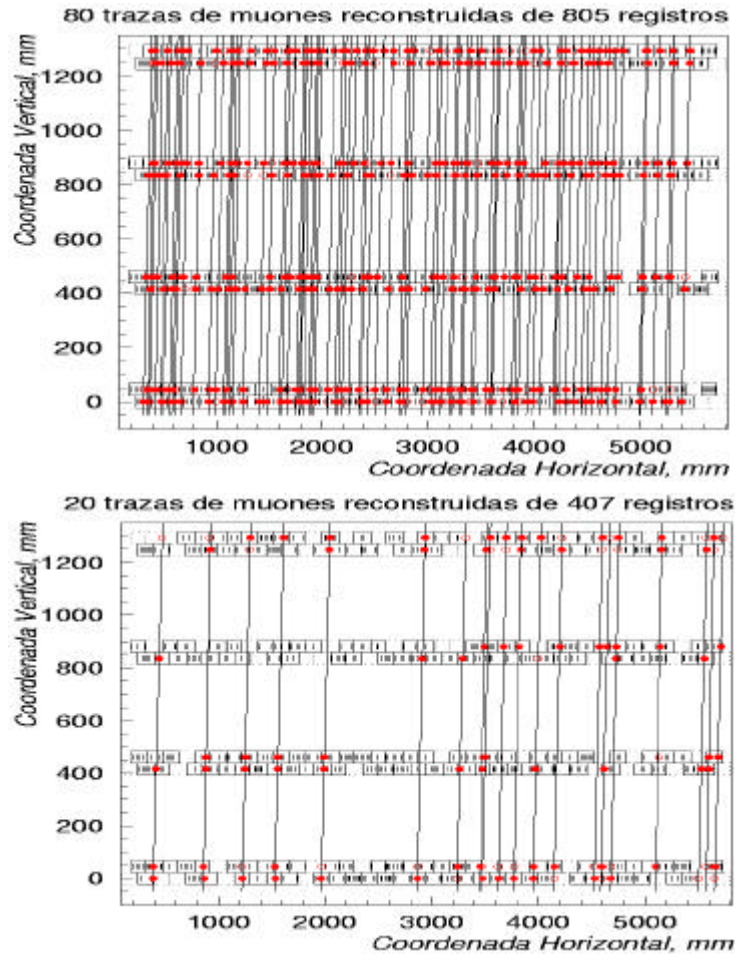


Figura 3. Evento con la más alta multiplicidad registrado (100 trazas). Arriba: trazas reconstruidas después de la primera iteración. Abajo: trazas adicionales después de la segunda iteración.

Referencias

- [1] S. Román *Detección Subterránea de Rayos Cósmicos de Alta Energía en el CERN* Tesis Maestría. Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”. Universidad Autónoma de Puebla. (2002).

10. Crecimiento y caracterización de aleaciones $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ obtenidas por pulverización catódica

H. Pérez Ladrón de Guevara, H. Navarro-Contreras, M. A. Vidal

Instituto de Investigación en Comunicación Óptica (IICO), Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP), Alvaro Obregón 64, San Luis Potosí, S.L.P.

Una de las ideas más fascinantes de la física moderna de semiconductores es la obtención de un material de ancho de banda prohibido directo basado en aleaciones de la columna IV. Es por eso que aleaciones entre Ge y Sn representan un reto de gran interés actualmente. Estas aleaciones metaestables adicionalmente tienen la ventaja de modificar el ancho de banda prohibido con la concentración de Sn. Se ha demostrado que prevalece una transición directa a concentraciones por debajo del 0.15 de Sn, con variaciones en el ancho de banda prohibido que van de 0.35 a 0.79 eV. Adicionalmente se predice una disminución de la masa efectiva de los electrones conforme aumenta la concentración de Sn con la consecuencia de un aumento importante en la movilidad electrónica.

Sin embargo, el crecimiento de esta aleación tiene grandes problemas, ya que el desajuste reticular es de 14.7 % y el límite de solubilidad del Sn en Ge es de aproximadamente el 1%, y tiende a segregarse a la superficie. Además, se tiene que a bajas temperaturas, el Sn cambia de fase de estructura diamante α -Sn (Sn gris) a estructura tetragonal centrada en el cuerpo β -Sn (Sn blanco) a 13.2°C. Sin embargo en sistemas de crecimiento fuera de equilibrio como MBE o pulverización catódica, como en nuestro caso, se ha logrado crecer esta aleación a temperaturas entre 100°C y 200°C, y con concentraciones hasta del 12% de Sn, con la importante característica de ser películas monocristalinas.

Desarrollo experimental

En un sistema de crecimiento por pulverización catódica (R.F. magnetron sputtering) se han logrado crecer aleaciones que han alcanzado concentraciones de 0.12. Se ha

determinado esta concentración a partir de encontrar los parámetros de red en el volumen usando difracción de rayos X de alta resolución (HRXRD). También se han determinado los anchos de banda prohibida de las aleaciones mediante caracterizaciones ópticas de las aleaciones. La espectroscopía Raman se usó también con el fin de correlacionar los anteriores resultados encontrándose que el Sn se segrega a la superficie.

Utilizando la separación angular que existe entre la señal del pico de difracción correspondiente al sustrato y a la película en las reflexiones asimétricas [Fig 1], se obtienen de su análisis, los parámetros de red de la aleación, así como la concentración de Sn presente en la película, asumiendo un comportamiento lineal en las constantes de red (ley de Vegard) y en las constantes elásticas de los materiales que forman la aleación, los datos obtenidos se muestran en la tabla I.

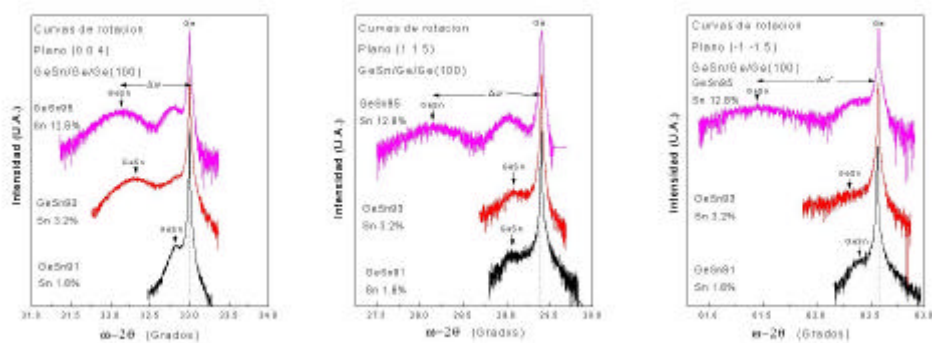


Figura 1. Curvas de rotación obtenidas por HRXRD en el plano simétrico (004), y los planos asimétricos (115) y (-1-15)

Muestra	Constante de red perpendicular (a_{\perp})	Constante de red paralela (a_{\parallel})	Constante de red en bulto (a_0)	Porcentaje de Sn en la aleación
GeSn91	5.68514 Å	5.65209 Å	5.67093 Å	1.6 %
GeSn93	5.68705 Å	5.68157 Å	5.68474 Å	3.2 %
GeSn95	5.77589 Å	5.7492 Å	5.76441 Å	12.8 %

Tabla 1. Constantes de red y porcentaje de Sn en las películas

Se puede apreciar, en base a los datos obtenidos por HRXRD, que las películas no son pseudomórficas. Utilizando espectroscopía Raman [Fig 2], y sabiendo que en las

aleaciones de $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ no estresadas, el corrimiento Raman obedece la relación lineal $\Delta\omega_{\text{GeSn}} = -76.8x \text{ cm}^{-1}$, se obtiene la concentración de Sn correspondiente al corrimiento del pico de la aleación con respecto a la posición del Ge [Fig 3]. Esta concentración es mayor a la determinada por HRXRD, y se puede atribuir a que el Raman sólo muestra un análisis estructural de unos cuantos nanómetros de profundidad.

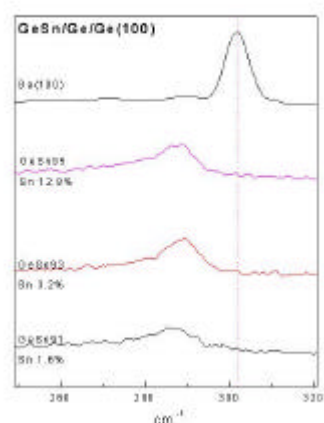


Figura 2. Corrimiento Raman de las aleaciones $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$.

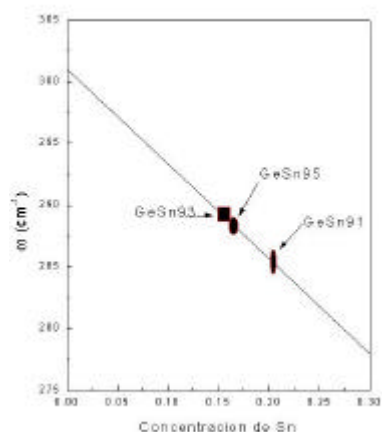


Figura 3. Concentración de Sn correspondiente al corrimiento Raman para aleaciones $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ no estresadas.

A partir de la medición de la transmitancia [Fig 4], se ha determinado el coeficiente de absorción de las películas [Fig 5], en el cual se aprecia un cambio en el ancho de banda prohibida directa e indirecta, que no corresponde al del Ge puro, y muestra un corrimiento hacia bajas energías, como se espera que suceda a medida de que aumenta la presencia de Sn en la aleación.

Resultados

Se han logrado crecer películas monocristalinas de $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ en las cuales se ha alcanzado una concentración de hasta el 12% de acuerdo a los análisis por HRXRD.

El ancho de banda prohibida, de acuerdo con las mediciones del coeficiente de absorción, se ha corrido de 0.79 eV hasta 0.57 eV, correspondiente a una concentración de Sn del orden del 13%.

Aunque el corrimiento Raman indica una mayor concentración, ésta sólo está presente en la superficie, ya que el Raman únicamente muestra un análisis estructural de unos cuantos nanómetros de profundidad, mientras que el análisis por HRXRD, y la determinación del coeficiente de absorción muestran una información general de la película, lo cual hace suponer que el Sn se encuentra segregado en la superficie.

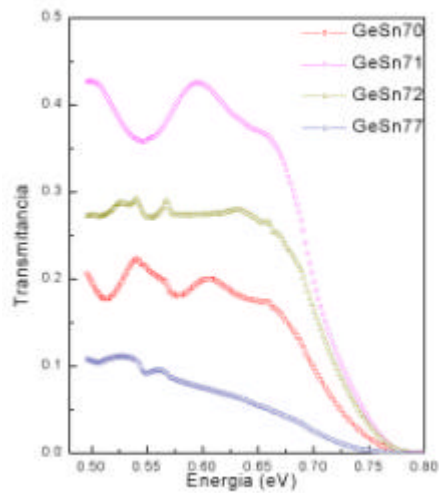


Figura 4. Medición de la transmitancia en las aleaciones $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$.

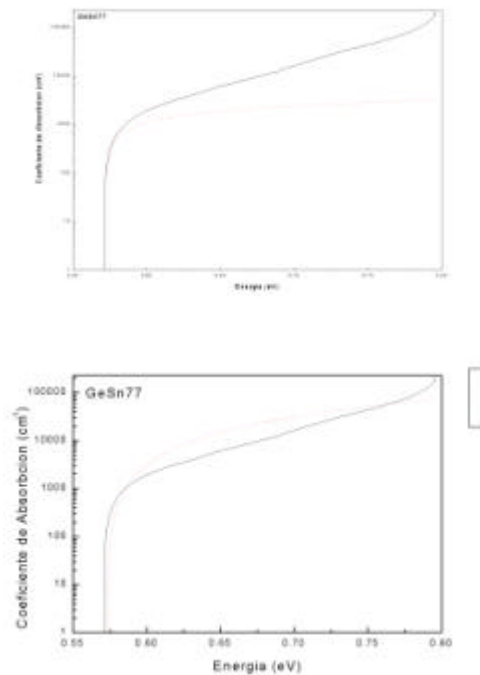


Figura 5. Ajuste del ancho de banda prohibido directo e indirecto a partir de la determinación del coeficiente de absorción.

Referencias

- [1] S.I. Shah and J.E. Greene, *Journal of Crystal Growth* **83**, 3 (1987).
- [2] Gang He and Harry A. Atwater, *Appl. Phys. Lett.* **68**, 8 (1996).
- [3] Gang He and Harry A. Atwater, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1937 (1997).
- [4] Gang He and Harry A. Atwater, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 3418 (2000).

- [5] O. Gurdal, M-A. Hasan, M.R. Sardela, Jr., and J.E. Greene, Appl. Phys. Lett. **67**, 956 (1995).
- [6] David W. Jenkins and John D. Dow, Phys. Rev. B **36**, 7994 (1987).
- [7] Richard A. Soref and Clive H. Perry, J. Appl. Phys. **69**, 539 (1991).
- [8] O. Gurdal, P. Desjardins, J.R.A. Carlsson, and N. Taylor, J. Appl. Phys. **83**, 162 (1998).
- [9] P.R. Pukite Alex Harwit, and S.S. Iyer, Appl. Phys. Lett. **54**, 2142 (1989).
- [10] P. Desjardins, T. Spila, O. Gurdal, N. Taylor, and J.E. Greene, Phys. Rev. B **60**, 15993 (1999).
- [11] X. Deng, B.-K. Yang, S.A. Hackney, and M. Krihnamurthy, Phys. Rev. Lett. **80**, 1022 (1998).
- [12] B.A. Orner, D. Hits, and J. Kolodzey, J. Appl. Phys. **79**, 8656 (1996).

11. Caracterización estructural de aleaciones $\text{GaAs}_x\text{N}_{1-x}$ y $\text{GaP}_x\text{N}_{1-x}$ por difracción de rayos X de alta resolución

Irving Paul Vargas Cruz y Miguel Angel Vidal Borbolla

Instituto de Investigación en Comunicación Óptica (IICO), Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP)

Introducción

El estudio de los Nitruros de Galio actualmente ha tomado gran interés en los últimos años por la gran cantidad de aplicaciones optoelectrónicas debidas al rango azul de emisión en el espectro electromagnético. Sin embargo, uno de los principales problemas que se presenta en el crecimiento de películas epitaxiales basadas en Nitruros de Galio, es la falta de un sustrato adecuado sobre el cual depositar la aleación dado que el GaN tiene un parámetro de red de 4.5 \AA , los sustratos usados generalmente provocan muchas dislocaciones, así como defectos en las estructuras siendo éstos una de las principales razones por las cuales la calidad de los dispositivos optoelectrónicos no ha podido competir con otras tecnologías comerciales que actualmente existen, además de que esta ha sido una de las razones por las cuales las cualidades cristalinas del GaN no se han podido obtener con exactitud. En este trabajo se realizaron mediciones acerca del acople al parámetro de red en sustratos de Si, GaAs y GaP, al formar aleaciones ternarias de GaAsN y GaPN, de forma que por medio de Rayos X de alta resolución se determinó el parámetro de red de las películas observando la forma en que se tensa la película para ajustarse a los diferentes tipos de sustratos (cálculos realizados por medio de la teoría de Macrander), además de esto, se obtuvo la concentración de nitrógeno para cada una de las películas, corroborando que la concentración nominal que se reportaba era la correcta.

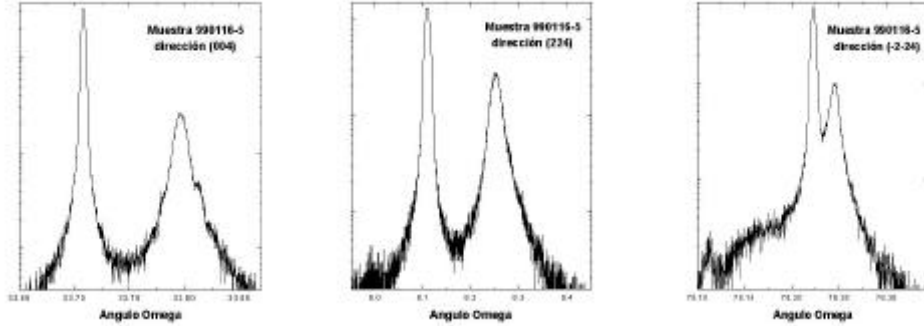
Procedimiento experimental

Las muestras fueron medidas mediante un difractor de Rayos X de alta resolución donde se procedió a medir la dirección de difracción de mayor intensidad que en este caso para cada una de las muestras, fue la dirección (0 0 4) de forma que se obtuvieron un pico para la película del ternario y otro para el sustrato, la separación angular nos da información sobre el parámetro de red de la película crecida, de manera análoga se midieron las direcciones asimétricas de las muestras correspondientes a la dirección (2 2 4) y (-2 -2 4), donde las separaciones angulares de éstas nos proporcionaron información de los parámetros de red tanto perpendicular como paralelo, luego se procedió a calcular el parámetro de red en bulto y, utilizando la ley de Vegard, se obtuvieron las concentraciones de nitrógeno en las muestras.

Las muestras presentan las siguientes características: la 125-1 fue crecida sobre un sustrato de GaAs(1 0 0) con una capa buffer de GaAs de 100 nm y con una capa de GaAs_{0.98}N_{0.02} de 500 nm, la segunda, la cual identificamos con el nombre de 1203-3, fue crecida sobre un sustrato de GaP(1 0 0) con una capa buffer de 10 nm, seguida de una capa de GaP_{0.98}N_{0.02}, la tercera muestra analizada, la 116-5, fue crecida sobre Si(1 0 0) con una inclinación de 4° respecto al plano [0 1 1], a la cual se le creció una capa buffer de Si de 3.2 μm, después una capa de 20 nm y finalmente una capa de GaP_{0.972}N_{0.028} de 300 nm, la cuarta y última muestra analizada fue crecida sobre un sustrato de Si con las mismas características que la muestra 116-5, esta muestra la identificamos con el nombre de 603-3, se le creció una capa buffer de Si de 3.2 μm, una capa de GaP de 20 nm, así como una película de GaP_{0.972}N_{0.028} de 400 nm, encima de esta se creció una capa de 16 nm y una de Si de 300 nm. A todas estas muestras se les realizó el análisis antes mencionado.

Resultados y discusión

De las películas analizadas, se obtiene que las separaciones angulares de los difractogramas (que se presentan en las gráficas correspondientes) en las direcciones asimétricas nos proporcionan los valores de θ^+ y θ^- , los cuales a su vez, sirven para calcular los valores de θ y ϕ que se obtienen de las ecuaciones presentadas a continuación.



Separación angular de ??

Separación angular de ??

Separación angular de ??

Las ecuaciones usadas para realizar los cálculos son las siguientes:

$$\Delta t = \frac{\Delta w^+ - \Delta w^-}{2}, \quad \Delta q = \frac{\Delta w^+ + \Delta w^-}{2}.$$

Al aplicar las formulas de Macrander para obtener los parámetros de red se tiene que:

$$a_{\perp} = a_s \frac{\cos t}{\cos(t + \Delta t)} \frac{\text{Sen} q_s}{\text{Sen}(q_s + \Delta q)}, \quad a_{\parallel} = a_s \frac{\text{Sen} t}{\text{Sen}(t + \Delta t)} \frac{\text{Sen} q_s}{\text{Sen}(q_s + \Delta q)},$$

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_o = (P) \left(\left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\perp} - \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel} \right) + \left(\frac{\Delta a}{a}\right)_{\parallel}.$$

Con el parámetro de red en bulto calculado a partir de las ecuaciones de Macrander, podemos suponer que estas películas siguen la ley de Vegard para poder determinar las concentraciones de nitrógeno que contienen las muestras. La ley de Vegard supone una relación lineal entre las concentraciones de la película y el parámetro de red, por lo que se pueden calcular las concentraciones reales de nitrógeno de las muestras.

Muestra	Parámetro de red del sustrato (Å)	Parámetro a_{\perp} (Å)	Parámetro a_{\parallel} (Å)	Parámetro de red en Bulto (Å)
		5.60475	5.65365	5.6280
000125-1	5.6535	5.6085	5.6085	5.6296
001203-3	5.4505	5.40958	5.449	5.4281
000603-3	5.43105	5.42604	5.43092	5.4282
990116-5	5.43105	5.419	5.43102	5.4242

En esta tabla se muestran las concentraciones obtenidas por Rayos X y las concentraciones nominales de nitrógeno de las películas.

Muestra.	Parámetro de red en Bulto (Å).	Concentración Nominal de nitrógeno.	Concentración de nitrógeno.
000125-1	5.6280	0.02	0.022
	5.6296		0.021
001203-3	5.4281	0.02	0.024
000603-3	5.4282	0.028	0.024
990116-5	5.4242	0.028	0.028

Conclusiones

Podemos decir que en conclusión se determinaron los parámetros de red perpendicular a_{\perp} y paralelo a_{\parallel} de las muestras, demostrando que las películas estudiadas crecieron pseudomórficas, lo que representa que, para bajas concentraciones de nitrógeno, la capa del Nitruro III-V crece tensionada y se acopla al sustrato, lo que hace que se puedan usar sustratos más comunes en el desarrollo de aleaciones con GaN, además de corroborar que la concentración nominal de nitrógeno reportada coincide con los resultados obtenidos por rayos X de alta resolución.

Referencias

- [1] Héctor Pérez Ladrón de Guevara, Efectos Estructurales de Diferentes Capas Amortiguadoras sobre Películas de ZnSe (2000).
- [2] Miguel Angel Vidal Borbolla, Curso de Elementos de Difracción de Rayos X de Alta Resolución, Sociedad Mexicana de Cristalografía (1997).
- [3] H. Heinke, M.O. Möler, D. Hommel y G. Landwehr, Journal of Crystal Growth **135**, pag. 41 - 52 (1994).
- [4] V. Holý y Kubena, E. Abramof, Lischka y A. Pesek, E. Koppensteiner, J. Appl. Phys. **74** (3), pag. 1736 – 1743 (1993).
- [5] H. Lahèche, G. Naftaf, E.Feltin, B. Beaumont, P. Gibart, Journal of Crystal Growth **231**, pag. 329-334 (2001).
- [6] E. Koppensteiner, A. Schuh, G. Bauer, V. Holý, G. P. Watson y E. A. Fitzgerald, j. Phys. D: Appl. Phys. **28**, A114 – A119 (1995).

12. Caracterización de pozos cuánticos múltiples de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs por medio de difracción de rayos X de alta resolución, fotoluminiscencia y fotorreflectancia

Joel Montaña-Rivas, A. G. Rodríguez y M. A. Vidal

Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Álvaro Obregón 64, Centro Histórico, San Luis Potosí, S.L.P.

Resumen

Se presentan resultados parciales de la caracterización de dos heteroestructuras de capas alternadas de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ / GaAs por medio de difracción de rayos X de alta resolución (HRXRD), fotoluminiscencia (PL) y fotorreflectancia (PR). Las heteroestructuras forman pozos cuánticos múltiples (MQW) con concentraciones nominales de 10 % y 20 % de Indio en las capas epitaxiales que firman los pozos cuánticos. Dichas heteroestructuras fueron crecidas por medio de epitaxia por haces moleculares (MBE).

La técnica de HRXRD proporcionó información estructural de las muestras como los parámetros de red paralelo, perpendicular y en bulto; así como la concentración y la relajación de las películas de la aleación ternaria. Los espectros de PL y PR identificarán transiciones ópticas de las heteroestructuras conforme éstos evolucionan en temperatura desde 13 K hasta 300 K.

Introducción

Con el perfeccionamiento de técnicas de crecimiento de cristales tales como la epitaxia por haces moleculares (MBE), ha sido posible la obtención de películas delgadas de distintos semiconductores con alta calidad cristalina. Al formarse heteroestructuras de materiales con diferente parámetro de red se producen esfuerzos, cambiando las propiedades ópticas y electrónicas de las mismas.

Una de las heteroestructuras más interesantes para su estudio es la formada por GaAs y la aleación ternaria $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y su interés radica en sus aplicaciones tecnológicas a la optoelectrónica. Alternando capas de GaAs y de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ durante el crecimiento de las películas se pueden formar pozos cuánticos múltiples (MQW) debido a las diferencias entre los anchos de banda prohibidos de estos materiales y los espesores

de cada capa, comportándose de manera distinta y presentando efectos adicionales como el confinamiento cuántico.

Procedimiento experimental

Las dos muestras correspondientes a los crecimientos 255 y 256 (estructura 1 y 2, respectivamente) con valores nominales de 20 % y 10 % de Indio en la aleación (figura 1), fueron sometidas a la técnica de HRXRD obteniéndose sus curvas de rotación para incidencia y salida rasante de las direcciones asimétricas (224) para la estructura 1 y las direcciones asimétricas (115) para la estructura 2 (figura 2).

Por medio de las fórmulas de Macrander y con ayuda de la ley de Vegard para la constante de red en función de la concentración se obtuvieron los parámetros de red de las aleaciones así como su concentración.

$$a_{\perp} = a_s \frac{\cos t_s}{\cos(t_s + \Delta t)} \frac{\text{sen } q_s}{\text{sen}(q_s + \Delta q)}, \quad a_{\parallel} = a_s \frac{\text{sen } t_s}{\text{sen}(t_s + \Delta t)} \frac{\text{sen } q_s}{\text{sen}(q_s + \Delta q)},$$

de manera que:

$$\cos t_s = \frac{l}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad \Delta q = \frac{\Delta w^+ + \Delta w^-}{2}, \quad \Delta t = \frac{\Delta w^+ - \Delta w^-}{2},$$

y h, k, l, son los índices de Miller.

Las transiciones ópticas presentes en las estructuras se pretenden determinar de los espectros obtenidos de las mediciones de espectroscopía de fotoluminiscencia y fotorreflectancia. Obsérvese los espectros mostrados para fotoluminiscencia y fotorreflectancia a diferentes temperaturas en las figuras 3 y 4 respectivamente.

Resultados

Se determinaron los parámetros de red paralelo, perpendicular y en bulto de la aleación de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ para ambas estructuras cristalinas. La concentración de Indio de la aleación ternaria fue determinada. Se obtuvo el valor correspondiente a la relajación. Se determinó la incertidumbre en los datos obtenidos por medio de los modelos teóricos. Se observa que la concentración de Indio para la estructura 2 difiere 0.02 de la nominal (tabla 1). Las estructuras cristalinas están parcialmente relajadas.



Figura 1. La estructura de las muestras.

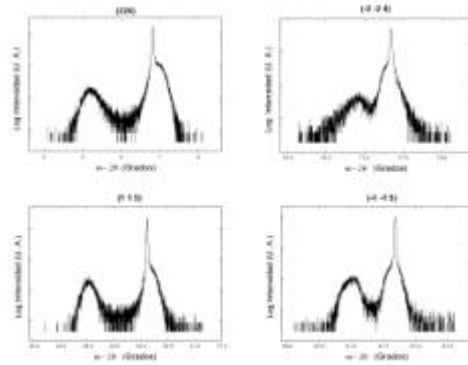


Figura 2. Curvas de rotación para incidencia y salida rasante para los planos asimétricos (224) para la estructura 1 y para los planos asimétricos (115) para la estructura 2.

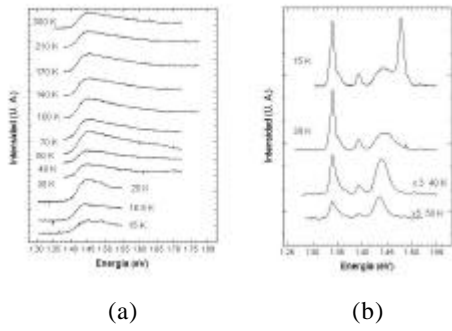


Figura 3. Espectros de fotoluminiscencia para diferentes temperaturas. a) Estructura 1. b) Estructura 2.

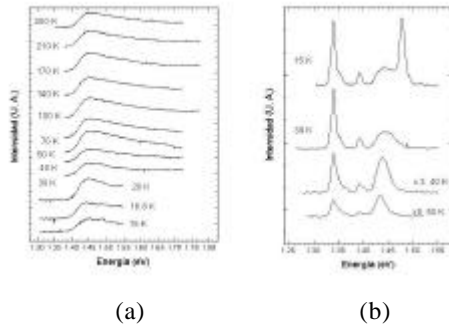


Figura 4. Espectros de fotorreflexancia para diferentes temperaturas. a) Estructura 1. b) Estructura 2.

Estructura 1		Estructura 2	
P. Perpendicular	$5.8093 \pm 0.0098 \text{ \AA}$	P. Perpendicular	$5.7480 \pm 0.0097 \text{ \AA}$
P. Paralelo	$5.6842 \pm 0.0102 \text{ \AA}$	P. Paralelo	$5.6694 \pm 0.0102 \text{ \AA}$
P. en Bulto	$5.7488 \pm 0.0097 \text{ \AA}$	P. en Bulto	$5.7103 \pm 0.0102 \text{ \AA}$
Relajación	0.32 ± 0.04	Relajación	0.28 ± 0.01
Concentración de Indio	0.23 ± 0.03	Concentración de Indio	0.14 ± 0.02

Tabla 1. Se muestran los valores de los parámetros de red perpendicular, paralelo y en bulto; la concentración y la relajación de las estructuras 1 y 2

Referencias

- [1] Jasprit S. Physics of Semiconductors and their Heterostructures [Mc Graw Hill].
- [2] Pollak F. Semiconductors and Semimetals, vol. 32, [Academic Press Inc].
- [3] Schuster M. y Herres N. An Introduction to High Resolution X-Ray Diffractometry.
- [4] Aspnes D. Electric Field Effects on the Dielectric Function of Semiconductors [North Holland].
- [5] Pankove J. Optical Processes in Semiconductors [Dover Publications Inc, New York].

13. Topografía y termodinámica de nanocúmulos en la superficie de energía potencial

A. Tamez, J. Mulia, C. Sandoval y D. Osorio

Facultad de Ciencias Universidad Autónoma del Estado de México, C.P.50000, Toluca

Resumen

Usando una técnica estadística simple se describe un mapeo de la superficie de energía potencial (PES) de nanocúmulos haciendo un gran número de minimizaciones de energía global y usando eficientemente algoritmos en los que se encuentran las cuencas de atracción de los puntos de silla y mínimos localizados en regiones de baja energía del (PES). Estos puntos silla son localizados con criterios de convergencia y los mínimos son derivados a partir de sus respectivos puntos de silla tomando en cuenta el criterio de convergencia y la relajación continua. Un gran número de optimizaciones son mejoradas con aproximaciones estadísticas en patrones del espacio fase entre mínimos y puntos silla.

Introducción

Los nanocúmulos metálicos son estructuras que contienen menos de 400 átomos y por sus propiedades son candidatos interesantes para construir “bloques” de materiales nanoestructurados con interesantes aplicaciones prácticas como son: circuitos digitales nanoelectrónicos, catálisis, etc. [1]. Sin embargo, antes de considerar dichas aplicaciones es necesario desarrollar la caracterización de la estructura geométrica, las propiedades dinámicas, termodinámicas, químicas, ópticas y electrónicas.

Recientemente se han encontrado diferentes geometrías en base a predicciones teóricas utilizando búsquedas exhaustivas de cúmulos de bajas energías usando modelos de potenciales [2].

Potencial de Gupta

Cálculos con el potencial de Gupta de n-cuerpos han sido útiles para nanocúmulos de Au para diferentes tamaños, el cual ha sido corroborado con la teoría de la funcional de la densidad (DFT) [3-5].

El potencial de Gupta está dado de la siguiente manera:

$$V = \frac{U_n}{2} \sum_{j=1}^n \left[A \sum_{i(\neq j)=1}^n \exp \left[-p \left(\frac{r_{ij}}{r_{0n}} - 1 \right) \right] - \left(\sum_{i(\neq j)=1}^n \exp \left[-2q \left(\frac{r_{ij}}{r_{0n}} - 1 \right) \right] \right)^{1/2} \right]$$

Los parámetros “**p** y **q**” dependen del tipo de átomo, en este caso, para el oro, **p** = **4.13** y **q** = **10.15**. “**A**” se obtiene mediante la minimización de energía cohesiva para una estructura fcc. **A** = **0.118438** [6].

Búsqueda Genética

Debido a la complejidad de encontrar las superficies de energía potencial para los cúmulos de Au, ya que el espacio de configuraciones es de **3n-6** donde **n** es en número de átomos y 6 resulta del movimiento de grados de libertad asociados a la invariancia en la rotación y translación de los cúmulos, es necesario hacer una búsqueda de energías mediante el algoritmo simbiótico, que es una variante del algoritmo genético y el cual consiste de [7,8]:

1. Una población inicial aleatoria, usando el código Gary para iniciar la configuración de cúmulos.
2. Se evalúa la energía de enlace de cada configuración.
3. Se genera una nueva configuración mediante la aplicación de operadores genéticos de entrecruzamiento y mutación de las mejores configuraciones.
4. Se evalúa la energía de enlace de la configuración de la nueva generación.
5. Se repiten los pasos 3 y 4 hasta encontrar la configuración de más baja energía.
6. Se selecciona un templete genético con un radio fijo, el cual contiene en promedio 8 átomos centrados, respecto al primero, en coordenadas espaciales.
7. El programa se detiene cuando se halla la mejor energía de la célula.
8. Se procede de igual manera para otra célula y así el proceso evolutivo y simbiótico se repite para n-células.
9. Se optimiza el gradiente conjugado en ese punto, con lo cual se refina la estructura de la superficie de potencial.

Termodinámica

El cálculo de las propiedades termodinámicas de los cúmulos se obtiene usando el método de superposición el cual usa la densidad de estados que es construída usando la información de los mínimos y puntos silla en el (PES). Este método calcula las densidades de estado absolutas para diferentes regiones del espacio fase, y por otro lado nos da una relación entre la topografía del (PES) y la termodinámica.

Resultados

Mediante la implementación del algoritmo genético y simbiótico no se encuentra el mínimo global pero ayuda a encontrar una completa distribución de la más baja energía mínima y puntos silla en la superficie de energía potencial, realizándose 5,000 corridas computacionales para cúmulos de Au_{38} , como se muestra en la Figura 1.

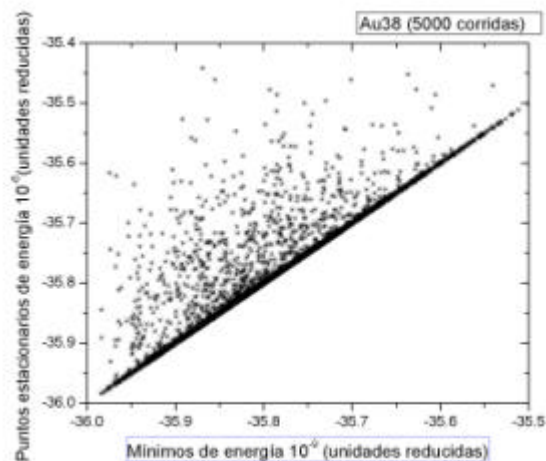


Figura 1.

La distribución de energía de los puntos estacionarios que se encontró para cúmulos de Au_{38} en 5,000 corridas, usando el algoritmo con un criterio de convergencia de $\Lambda = 10^9$ en unidades reducidas, se muestra en la Figura 2.

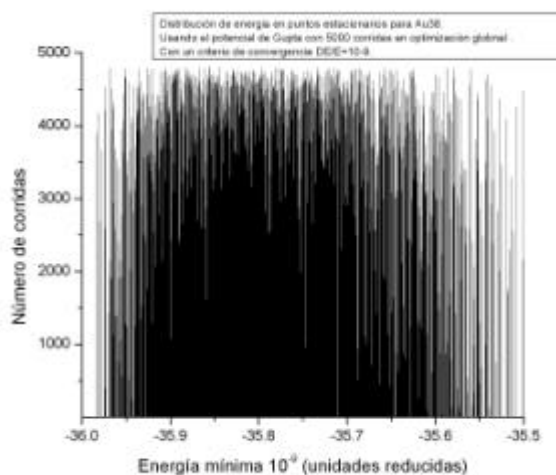


Figura 2.

Conclusiones

Hemos hecho una búsqueda para nanocúmulos metálicos pequeños de Au_{38} usando técnicas de optimización global mediante el algoritmo genético encontrando las configuraciones de más baja energía (mínimos) y al asociarlos con sus puntos silla pudimos obtener la topografía de la superficie de energía potencial y por último inferir su termodinámica [9].

Referencias

- [1] K. Michaelian, N.Rendon, I.L. Garzon, *Physical Review B* **60** N3 2000 (1999).
- [2] A.P. Sutton, *Electronic Structure of Materials* (Oxford University Press, New York, 1993).
- [3] R.P. Gupta, *Phys. Rev. B* **23**, 6265 (1981).
- [4] F. Cleri and V. Rosato, *Phys. Rev. B* **48**, 22 (1993).
- [5] V. Rosato, M. Guillope, and B. Legrand, *Philos. Mag. A* **50**, 321 (1989).
- [6] C. Rey, L.J.Gallego, J. Garcia-Rodeja, J.A. Alonso, and M.P. Iniguez, *Phys. Rev. B* **48**, 8253 (1993).
- [7] A. Posada-Amarillas and I.L. Garzon, *Phys. Rev. B* **54**, 10362 (1996).
- [8] A. Posada-Amarillas and I.L. Garzon, *Phys. Rev. B* **53**, 8363 (1996).
- [9] M.R. Hoare and P. Pal, *Physical Cluster Mechanics: Statics and Energy Surfaces for Monoatomic Systems*, *Adv. Phys.*, 20 161-196 (1971).

14. Comportamiento del equilibrio líquido-vapor de mezclas fuertemente inmiscibles

J. Antonio Moreno-Razo y Enrique Díaz-Herrera

*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
Apdo. Postal 55-534, México 09340, D.F., MÉXICO*

Resumen

En este trabajo presentamos los resultados de simulación por dinámica molecular de la interfase líquido-vapor para una mezcla binaria simétrica de fluidos de Lennard-Jones. Estudiamos el comportamiento del diagrama de fases como función de la miscibilidad de los componentes. Los resultados muestran interesantes cambios estructurales entre las fases coexistentes al incrementar la temperatura. Las fases presentes cambian de la interfase líquido-líquido-vapor a fases líquidas mojadas por la fase de vapor, en el caso de mezclas fuertemente inmiscibles. Investigamos además, el comportamiento de la tensión interfacial como función de la temperatura y se estima la temperatura a la cual aparece la transición de mojado.

Introducción

La interfase líquido-vapor ha sido un tema de extensos estudios debido a su importancia, tanto teórica como práctica. Existe una gran cantidad de estudios en la literatura dedicados al análisis del comportamiento de la interfase líquido-vapor usando métodos de Monte Carlo y Dinámica Molecular [1]. Sin embargo, las propiedades interfaciales de una mezcla, las cuales son de importancia en diferentes sistemas biológicos, como también en varias aplicaciones tecnológicas, han recibido menor atención [2]. Es bien conocido, que para un fluido de un componente las interacciones intermoleculares no afectan la topología del diagrama de fase. Sin embargo, para las mezclas, tanto las interacciones moleculares de sus componentes así como también las propiedades moleculares, tales como momento dipolar, no-esfericidad, etc., afectan la topología del diagrama de fase de manera no trivial. Esto hace que el estudio del comportamiento de mezclas tenga un gran interés. Del

conocimiento de las interacciones microscópicas se puede entender la topología del diagrama de fase.

Modelo del potencial y detalles de la simulación

Consideramos una mezcla binaria simétrica de fluidos de Lennard-Jones (LJ) parcialmente miscibles. Nuestro modelo de mezcla binaria se caracteriza por una modificación al potencial de interacción LJ:

$$u_{AB} = 4\mathbf{e}_{AB} \left[\left(\frac{\mathbf{s}_{AB}}{r_{AB}} \right)^{12} - \left(\frac{\mathbf{s}_{AB}}{r_{AB}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

con las reglas de mezclado definidas por:

$$\mathbf{s}_{AB} = \frac{1}{2}(\mathbf{s}_{AA} + \mathbf{s}_{BB}) \quad (2a)$$

$$\mathbf{e}_{AB} = \mathbf{a}\mathbf{e}_{AA} \quad (2b)$$

donde el parámetro \mathbf{a} (0 \leq \mathbf{a} \leq 1, para nuestro caso) controla la miscibilidad del sistema. Nosotros consideramos la interacción idéntica entre las partículas del mismo fluido $\mathbf{e}_{AA} = \mathbf{e}_{BB}$. La figura (1) muestra una representación esquemática de los tres tipos de fases para una mezcla simétrica binaria en el plano de temperatura y densidad. Las simulaciones moleculares las realizamos en el ensemble canónico (NVT) con diferentes valores del parámetro de miscibilidad. Para comparar con los resultados de la teoría de funcionales de la densidad [5] estudiamos el caso de $\mathbf{a}_{AB}=0.25$. Las simulaciones se realizaron con un número total de partículas $N=4096$. Las partículas inicialmente se colocaron en un paralelepípedo de volumen $V=L_x \cdot L_y \cdot L_z$, con $L_x=L_y=8.7636\mathbf{s}$ [3] en una celda FCC formando una interfase plana, esto es, todas las partículas del tipo A se encuentran en el lado izquierdo de la caja y las partículas del tipo B en el lado opuesto. De esta manera se obtiene una interfase líquido-líquido. Utilizamos un radio de corte $R_c=3\mathbf{s}$. Para medir las cantidades termodinámicas se requirió de varios millones (~ 10) de pasos de simulación para los cuales evaluamos los promedios.

Resultados

El Diagrama de Fase

Nuestro interés no es únicamente el obtener las densidades de coexistencia para construir el diagrama de fases, también estamos interesados en las propiedades estructurales y termodinámicas de las interfases planas. Las simulaciones de MD que realizamos nos permiten tener una región de líquido coexistiendo con su vapor en la misma celda de simulación. Las propiedades estructurales se investigaron calculando los perfiles de densidad a diferentes temperaturas, las termodinámicas se estudiaron evaluando la presión y las tensiones interfaciales como función de la temperatura. En la figura (2) mostramos el diagrama de fases para diferentes valores del parámetro α , en la cual observamos que la región de desmezclado se amplía a densidades menores y temperaturas mayores cuando el valor del parámetro α disminuye. También se muestran los perfiles de densidad a la derecha e izquierda de la línea I respectivamente. En la figura (3), mostramos el diagrama de fases de una mezcla binaria con un valor del parámetro de miscibilidad $\alpha=0.25$. La región donde consideramos que la línea I toca a la curva de coexistencia es cerca de la región del punto crítico. Esto causa una deformación en la curva de coexistencia de la mezcla. La razón de éste resultado es el ensanchamiento de la región de desmezclado.

Perfiles de densidad

En la figura (4) mostramos los perfiles de densidad de las dos especies que componen nuestra mezcla para una temperatura reducida de $T=0.75$ y $T=1.05$. Debido a las interacciones desfavorables presentes en el sistema, observamos que la fase líquida presenta una interfase líquido-líquido, dada por un líquido rico en A y otro rico en B coexistiendo con su vapor (figura 4a). Este es el caso para una temperatura menor o igual que $T=0.75$. Cuando incrementamos la temperatura encontramos un nuevo resultado (figura 4b), en el sistema la fase de vapor moja a las fases líquidas [4].

Tensión superficial e interfacial

En esta sección calculamos la tensión superficial g_{iq-vap} e interfacial g_{iq-liq} como función de la temperatura con el propósito de estimar la temperatura de mojado. Los perfiles de presión que se obtienen por medio de las ecuaciones (4a) y (4b) son necesarios para evaluar g_{iq-vap} y g_{iq-liq} por medio de su definición mecánica:

$$g = \int_{b_1}^{b_2} [P_n(z) - P_t(z)] dz \quad (3)$$

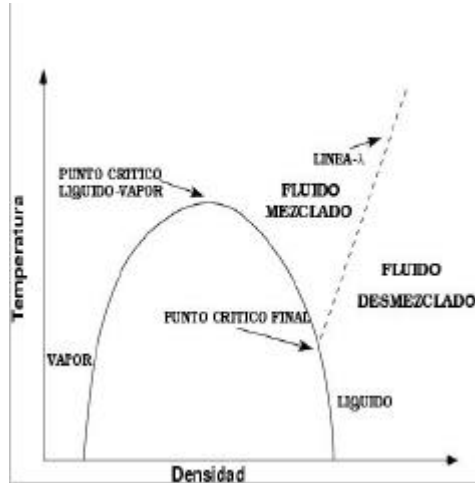


Figura 1. La línea sólida es la curva de coexistencia líquido-vapor, mientras que la línea punteada es la línea crítica λ de la transición mezclado-desmezclado

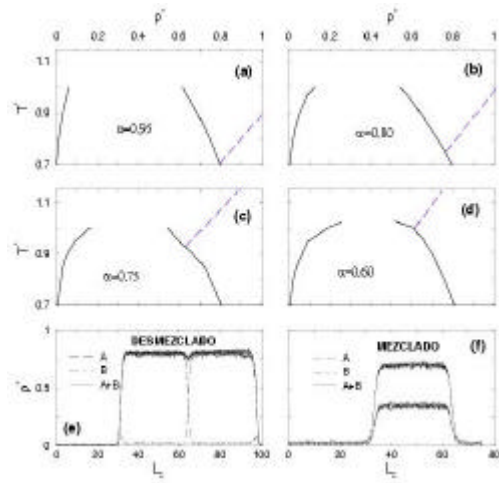


Figura 2. Diagrama de fases para una mezcla binaria simétrica con diferentes valores del parámetro α y los perfiles de densidad para: la región desmezclada (e) y la región mezclada (f)

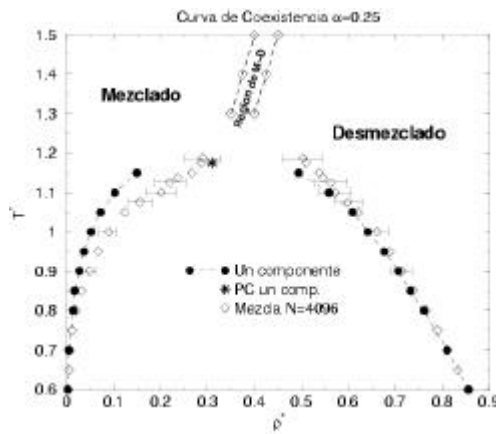


Figura 3. Diagrama de fases para una mezcla binaria simétrica para $\alpha=0.25$ y para un componente LJ (puntos negros). El asterisco corresponde a la estimación del punto crítico de un componente LJ, usando una extrapolación de los resultados simulados.

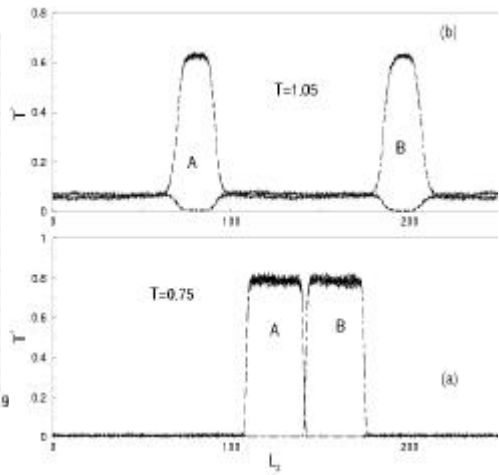


Figura 4. Perfiles de la densidad reducida de una mezcla con $\alpha=0.25$ y $N=4096$ partículas.

$$P_n(z) = r(z)k_B T - \frac{1}{A} \left\langle \sum_{i \neq j} \frac{z_{ij}^2 u'(r_{ij})}{r_{ij} |z_{ij}|} \mathbf{q} \left(\frac{z - z_i}{z_{ij}} \right) \mathbf{q} \left(\frac{z_j - z}{z_{ij}} \right) \right\rangle \quad (4a)$$

$$P_t(z) = r(z)k_B T - \frac{1}{2A} \left\langle \sum_{i \neq j} \frac{(x_{ij}^2 + y_{ij}^2) u'(r_{ij})}{r_{ij} |z_{ij}|} \mathbf{q} \left(\frac{z - z_i}{z_{ij}} \right) \mathbf{q} \left(\frac{z_j - z}{z_{ij}} \right) \right\rangle \quad (4b)$$

donde los límites de integración (b_1 , b_2) corresponden a las fases de bulto. Los resultados se presentan en la figura 5. Para hacer una estimación de T_w , utilizamos la regla de Antonoff [4] (con las fases **a**, **b** y **g** coexistiendo simultáneamente).

$$\mathbf{g}_{ag} = \mathbf{g}_{ab} + \mathbf{g}_{bg} \quad (5)$$

En nuestro caso particular, la fase vapor es la fase que moja [4] y la ecuación (4) es:

$$\mathbf{g}_{liq-A \ liq-B} = \mathbf{g}_{liq-A \ vap} + \mathbf{g}_{liq-B \ vap} \quad (6)$$

donde $liq-A$ y $liq-B$, para nuestro caso son idénticas, entonces

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_{liq-liq} &= \mathbf{g}_{liq-vap} + \mathbf{g}_{liq-vap} \\ &= 2\mathbf{g}_{liq-vap} \end{aligned} \quad (7)$$

En la figura 5, se gráfica $\mathbf{g}_{liq-liq}$ y $2\mathbf{g}_{liq-vap}$ como una función de la temperatura, donde es posible estimar T_w por extrapolación de la ecuación (7).

Conclusiones

En resumen, usamos el ensamble canónico en nuestras simulaciones de Dinámica Molecular para estudiar el comportamiento de una mezcla binaria simétrica parcialmente inmiscible. Presentamos los resultados que son cualitativamente consistente con recientes estudios usando Teoría de Funcionales de la Densidad, pero que sin embargo sobrestiman la temperatura y la densidad del punto crítico [5]. Nuestros resultados confirman el comportamiento cualitativo del la topología del diagrama de fases previamente analizado para una mezcla equivalente usando potencial de pozo cuadrado y utilizando simulaciones de Monte Carlo [6]. Hemos encontrado un nuevo resultado en el comportamiento estructural de la interfase líquido-vapor para este tipo de mezclas binarias simétricas, el cual consiste en la

aparición a altas temperaturas de una transición de mojado en la cual la fase vapor moja a la fase rica en A y a la fase rica en B . Esto parece ser una importante característica del comportamiento de la fase líquido-vapor para un sistema fuertemente inmiscible de una mezcla simétrica binaria que no se había discutido previamente. Usando el cálculo de la tensión interfacial fue posible dar una estimación de la temperatura a la cual sucede la transición de mojado.

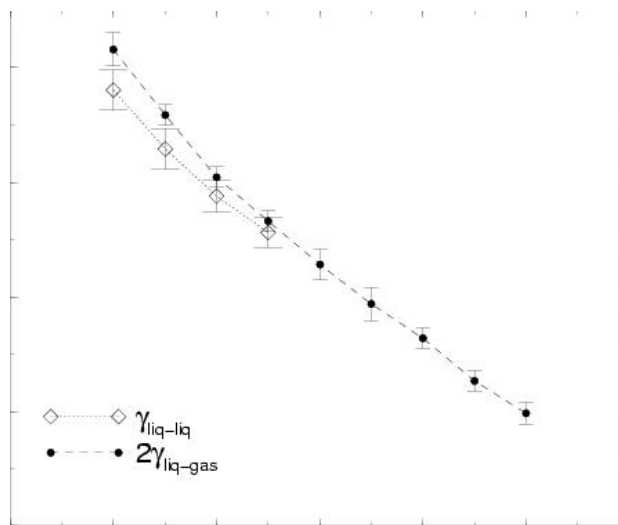


Figura 5. Tensión interfacial reducida (diamantes) y la tensión superficial (puntos negros) como función de la temperatura de una mezcla $\alpha=0.25$ y $N=4096$.

Referencias

- [1] A. Trokhymchuk and J. Alejandro, J. Chem. Phys., 8510-8523, **111**, 1999.
- [2] E. Diaz-Herrera, J. Alejandro, G. Ramirez-Santiago and F. Forstmann, J. Chem. Phys., 8084-8089, **110**, 1999.
- [3] Li-Jen Chen, J. Chem. Phys., 10214-10216, **103**, 1995.
- [4] R. Lipowsky, Critical Behavior of Interfases: Wetting, Surface Melting and Related Phenomena, University of Munich, 8-19, 1987.
- [5] I. Napari, A. Laaksonen, V. Talanquer and D. W. Oxtoby, J. Chem. Phys., 5906-5912, **110**, 1999.
- [6] N.B. Wilding and F. Schmid and P. Nielaba, Phys. Rev. E, 2201-2212, **58**, 1998.

15. Propiedades electrónicas de superficies semiconductoras ideales

X. López Lozano*, C. Noguez** y L. Meza Montes*

**Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”, Universidad Autónoma de Puebla.
Apdo. Postal J-48, Puebla Pue. 72570, México*

*** Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México. Apdo. Postal 20-364, México Distrito Federal 01000, México*

Resumen

En este trabajo se calcularon las estructuras de bandas de superficies ideales de alta simetría, para semiconductores de una especie atómica (Ge) y dos especies atómicas (GaAs e InAs). También se obtuvo la densidad total de estados del Ge(111). El método que se utilizó fue el de Enlace Fuerte semiempírico, haciendo una aproximación a primeros vecinos. La reproducción de estos resultados será útil para determinar los estados electrónicos de átomos adsorbidos sobre superficies de baja simetría, especialmente en el caso en que estos forman cadenas atómicas. Nuestro objetivo es conocer las propiedades de estos sistemas unidimensionales, llamados alambres atómicos, con el fin de analizar las posibilidades de utilizarlos en dispositivos de dimensiones atómicas.

Introducción

El desarrollo de la física de superficies en los últimos 50 años ha traído consigo la creación de diversos modelos y métodos teóricos para el estudio de superficies semiconductoras. El método de Enlace Fuerte semiempírico es uno de los más utilizados debido a que sólo requiere un número pequeño de parámetros [1].

El método de enlace fuerte para cristales y superficies

En este método, basado en las aproximaciones *adiabática* y la de *electrón independiente* [2], la función de onda electrónica es una suma de Bloch de orbitales atómicos localizados \mathbf{c}_a , que toma la forma $\Psi_a(\bar{k}, \mathbf{r}) = \sum_{a,j} U_a \exp(i\bar{k} \cdot \mathbf{R}_j) \mathbf{c}_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$.

El índice j recorre todas las posiciones atómicas de, al menos, los primeros vecinos y α , que denota un estado cuántico, recorre los orbitales atómicos de la base elegida. En nuestro caso se eligió la sp^3 más un orbital s excitado s^* [1,2].

El método de Enlace Fuerte para superficies es similar al de cristales, sólo que ahora se distingue al p -ésimo átomo ubicado en el plano m por un vector de posición $\bar{\mathbf{R}}_{pm} = \bar{\mathbf{r}} + \mathbf{t}_{m\parallel} + \mathbf{t}_{m\perp}$ de la celda unitaria situada en $\bar{\mathbf{r}}$. Aquí $\mathbf{t}_{m\parallel}$ y $\mathbf{t}_{m\perp}$ denotan los vectores base de la celda unitaria de la red bidimensional paralela y perpendicular al plano de la superficie, respectivamente. La función de onda electrónica es

$$\Psi_{\bar{k}}(\bar{x}) = \sum_a \sum_{p,m} d_a^{pm} \Psi_{a\bar{k}}^{pm}(\bar{x}),$$

$$\text{donde } \Psi_{a\bar{k}}^{pm}(\bar{x}) = A \sum_{\bar{r}} \exp(i\bar{k} \cdot (\bar{r} + \mathbf{t}_{m\parallel})) \cdot \mathbf{c}_a(\bar{x} - \bar{r} - \mathbf{t}_{m\parallel} - \mathbf{t}_{m\perp}).$$

La estructura de bandas (**EB**) se obtiene al resolver la ecuación de Schrödinger $H\Psi_a(\bar{k}, \bar{r}) = E_a(k)\Psi_a(\bar{k}, \bar{r})$ recorriendo \bar{k} sobre la zona de Brillouin adecuada [3].

EB de superficies del Ge y densidad de estados

Para el Ge, la Fig. 1 muestra la EB de las superficies ideales (110) y (100), mientras que la (111) es mostrada en la Fig.2(a). Las líneas continuas denotan los estados de superficie y los puntos los estados de bulto proyectados. En los casos (111) y (110), aquellos estados de superficie que tienen una energía cercana a cero corresponden a los estados de *dangling-bond* (**d**), que se generan al crear la superficie y cuya densidad de carga se mantiene perpendicular a ella.

Obsérvese que para (110) las bandas se encuentran degeneradas entre M y X debido a la simetría de la estructura del diamante [3]. Además de este tipo de estados, puede haber otros denominados estados de *bridge-bond* (**br**). Estos aparecen cuando dos enlaces colgantes emanan de un mismo átomo, como es el caso de la superficie (100). Nótese la poca dispersión de su banda. Aquellos estados debajo del cero corresponden a los estados llamados de *backbond* (**b**). Obsérvese en general el drástico cambio de la EB como función de la geometría de la superficie.

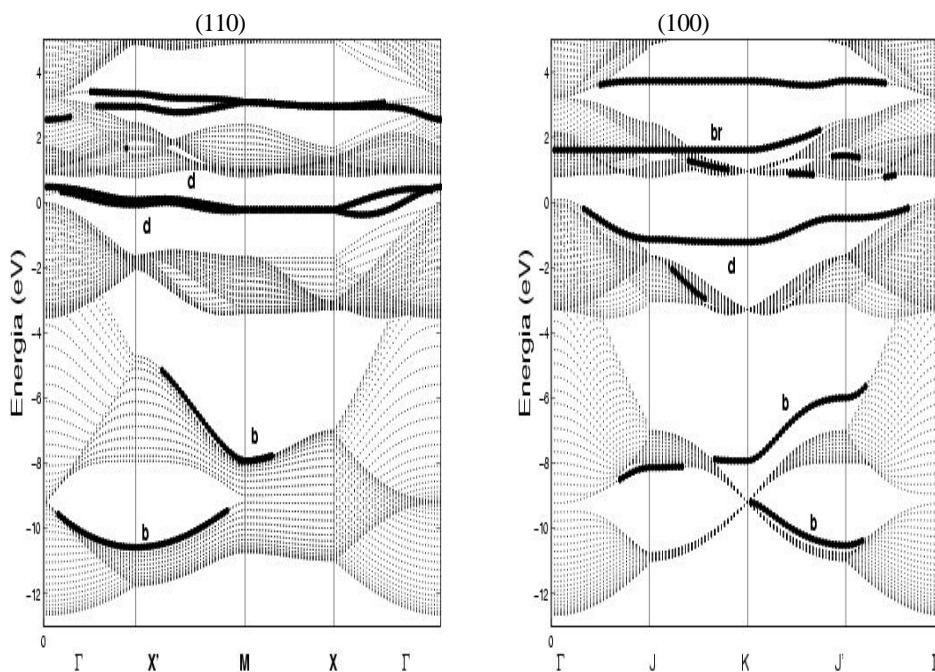


Figura 1. EB de las superficies ideales del Ge (110) y (100). Las líneas continuas son los estados de superficie y los puntos son los estados de bulto proyectados del cristal semi-infinito

Densidad de estados del Ge(111)

En la Fig. 2 se muestra la EB de la superficie ideal del Ge(111) junto con su densidad total de estados electrónicos $\rho(E)$. Obsérvese que si se tiene poca dispersión las bandas son planas, y esto se refleja en una gran contribución a la densidad de estados, tal es el caso del borde de la banda de conducción que da lugar al máximo de $\rho(E)$ en ~ 1 eV. La banda que corresponde a los estados de enlace colgante (**d**) muestra dispersión por lo que no contribuye significativamente.

EB de la superficie ideal (110) para GaAs e InAs.

La Fig. 3 muestra la EB de las superficies ideales (110) para GaAs e InAs. Nótese la semejanza entre ellas. Las líneas continuas cercanas al cero de energía denotan estados de enlaces colgantes (**d**) y los de energía negativa a los de backbond (**b**).

Compárense estas EB con la del Ge(110) y obsérvese que las bandas entre M y X ya no están degeneradas. Esto se debe a que ahora falta la simetría mencionada anteriormente, la cual existe sólo cuando se tiene una especie atómica[3].

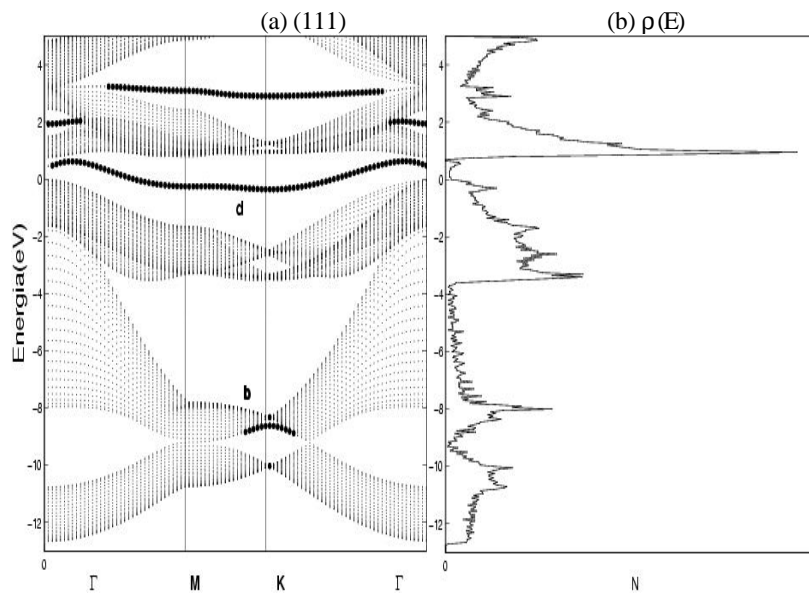


Figura 2. (a) EB de la superficie ideal del Ge (111), las líneas continuas son los estados de superficie y los puntos son los estados de bulto proyectados del cristal semi-infinito; (b) densidad total de estados

Comentarios

Utilizando el método de Enlace Fuerte hemos reproducido EB de superficie reportadas anteriormente para superficies ideales semiconductoras de alta simetría [3]-[4]. La EB de una superficie es extremadamente sensible al cambio de geometría de la misma, así como también al número de especies atómicas. En la superficie (110) se observan propiedades electrónicas similares para GaAs e InAs, ya que la geometría es la misma y la diferencia en el gap óptico se debe al cambio en el parámetro de red. Para determinar los estados electrónicos de alambres atómicos adsorbidos sobre superficies de Si de baja simetría [5], la geometría real de estas superficies y la interacción con los átomos de las cadenas deberán ser tomadas en cuenta .

Agradecimientos. Este trabajo se realiza con apoyo a los proyectos II16I01 de la VIEP-BUAP y E-36764 de CONACYT.

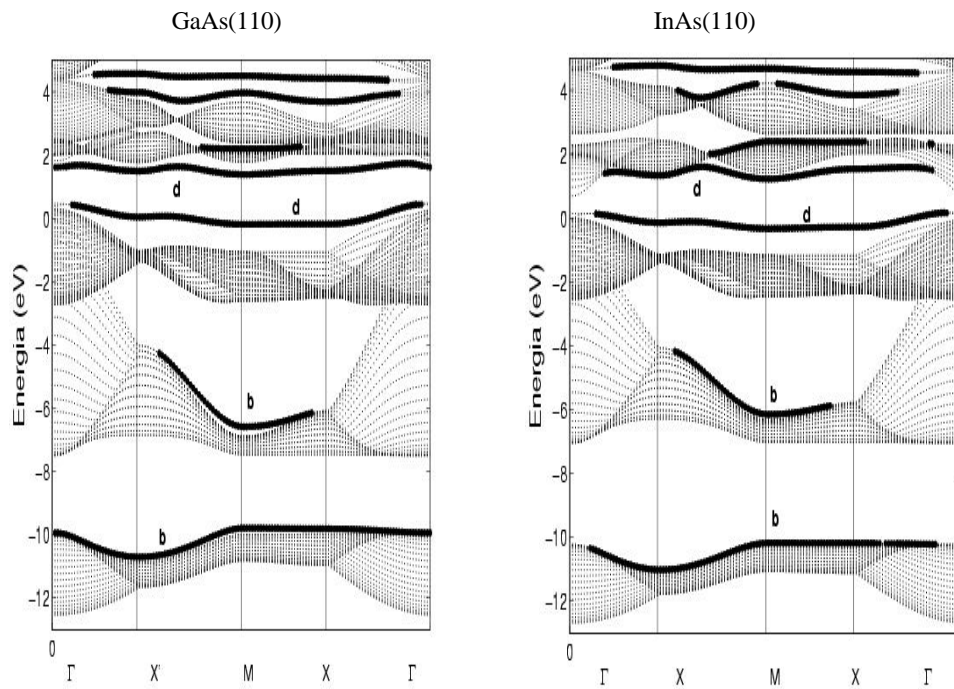


Figura 3. EB de las superficies ideales (110) del GaAs e InAs. Las líneas continuas son los estados de superficie y los puntos son los estados de bulo proyectados del cristal semi -infinito

Referencias

- [1] P. Vogl, Harold P.Hjalmarson and John D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids*, Vol. **44**, No. **5** (1983) 365-378.
- [2] Walter A. Harrison, *Electronic structure and the properties of solids*, Dover Publication, 1989.
- [3] I. Ivanov, A. Mazur and J.Pollmann. *Surface Sci.* **92** (1980) 365-384.
- [4] D. M. Swantson *et al*, *Surface Sci.* **312** (1994) 361-368.
- [5] A.A. Baski, K.M. Saoud, K.M. Jones. *Appl. Surface Sci.* **182** (2001) 216-222.

16. Estudio de las propiedades eléctricas de la interfaz silicio-óxido de silicio nitridado obtenido térmicamente con óxido nitroso

Adan Luna Flores¹, Arturo Morales Acevedo² y Jesús Carrillo López¹

¹ CIDS-ICUAP

² SEES-CINVESTAV

Resumen

En este trabajo se presenta un estudio sobre las propiedades eléctricas en la interfaz silicio-óxido de silicio nitridado; para esto, el óxido de silicio nitridado se depositó térmicamente empleando óxido nitroso (N_2O), elaborándose dispositivos metal-aislante-semiconductor (MIS). Se depositaron nueve muestras, variando la presión y temperatura en un rango de 1 a 3 atm y de 1000 a 1150 °C, respectivamente. Para dicho estudio se realizaron: (1) mediciones de capacitancia-voltaje (C-V) con el fin de obtener la densidad de estados que existe en esta interfaz (por el método Terman), utilizando un programa en MATHCAD desarrollado en el CIDS-ICUAP; (2) obtención del campo eléctrico que puede resistir el aislante sin romperse. Los resultados hasta ahora obtenidos nos indican que el óxido de silicio nitridado presenta una muy baja densidad de estados en la mitad del gap y además, en ciertas condiciones, soporta una densidad de campo eléctrico hasta por arriba de 9 MV/cm.

Introducción

En los últimos años, los investigadores se han dedicado a buscar nuevas alternativas que puedan reemplazar al dióxido de silicio puro (SiO_2) en películas delgadas (<2 nm). Ya que, como se sabe, el SiO_2 en estas dimensiones presenta problemas de degradación por electrones calientes, túnelo directo, y altas corrientes de fuga, entre otros [1].

Una buena alternativa es el dióxido de silicio nitridado, este material se obtiene simplemente incorporando nitrógeno al SiO_2 . Esta incorporación de nitrógeno puede lograrse por varios métodos [2]. Una forma muy sencilla de obtener este dióxido de si-

licio nitrado es, simplemente, cambiar el gas de la oxidación térmica común (O_2) por gases que puedan incorporar nitrógeno tales como: NH_3 , NO , N_2O . La elección entre uno de estos gases es el grado de incorporación de nitrógeno que se requiere. Las ventajas que tiene el N_2O sobre los otros dos son que como está libre de H evita la generación de centros atrapadores de carga, se pueden controlar más fácilmente la obtención de películas delgadas, debido a la baja velocidad de crecimiento, además de producir capas de óxido muy uniformes, aunque también incorpora menos cantidad de nitrógeno [3].

Parte experimental y resultados

Para el estudio de las propiedades eléctricas en la interfaz Si-SiO₂ nitrado, se usaron obleas de 2 pulg, tipo n con una resistividad de 1-5 Ω cm. Se planearon nueve experimentos, en los cuales se varió la presión (1-3 atm) y la temperatura (1000 -1150 °C), los espesores obtenidos fueron de alrededor de 100 Å. Después de hacer un proceso estándar de limpieza (tricloroetileno, acetona, RCAI, HF, RCAII, con enjuague intenso como punto intermedio en cada uno de estos pasos), el dióxido de silicio nitrado, se depositó en un horno vertical usando como gas de oxidación al óxido nítrico (N_2O).

Una vez obtenidos los dispositivos, se procedió a la obtención de las curvas C-V a alta frecuencia (100 kHz) para obtener información acerca de la densidad de trampas en la interfaz, por el método de Terman.

Se sabe que las mediciones de curvas C-V a alta frecuencia se hacen con la intención de que las trampas no puedan responder a esta señal de ac. Entonces, si las trampas en la interfaz no responden a esta señal, es de esperarse que a partir de mediciones C-V a alta frecuencia no se pueda tener información acerca de éstas, aunque, si bien es cierto que no responden a la señal de ac, sí responden a las pequeñas variaciones del voltaje aplicado en la compuerta (señal dc). Y precisamente, el método de Terman consiste en cuantificar esta diferencia entre las curvas C-V ideal (sin trampas en la interfaz) y la experimental (con trampas en la interfaz) [4].

La figura 1, muestra la comparación de las curvas C-V ideal y experimental, donde podemos observar que realmente no se nota gran diferencia para nuestros dispositivos (aclarando que para las nueve muestras se obtuvieron, en todos los casos, curvas similares), lo cual nos indica que tenemos una densidad de estados muy baja.

Para cuantificar la densidad de trampas en la interfaz utilizamos la relación:

$$D_{it} = \frac{C_{OX}}{q} \left(\frac{dV_G}{df_s} - 1 \right) - \frac{C_s}{q} \quad (1)$$

donde D_{it} es la densidad de estados en la interfaz, C_{OX} es la capacitancia de óxido, q es la carga eléctrica, V_G es el voltaje aplicado en la compuerta, f_s es el potencial superficial y C_s es la capacitancia del semiconductor.

Esta relación implica la manipulación de los datos C-V hasta obtener una gráfica de potencial superficial contra voltaje. En el CIDS-ICUAP se desarrolló un programa en MATHCAD para realizar esta labor, y así, sólo con los datos C-V como datos de entrada, podemos obtener la densidad de estados en la interfaz

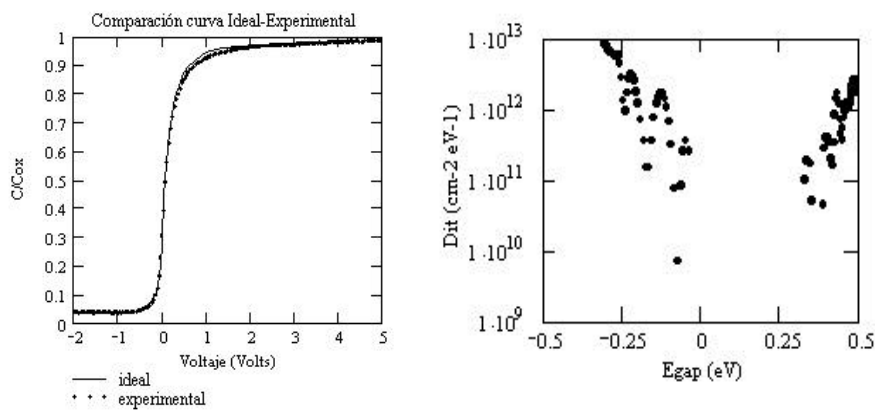


Figura 1. (Izquierda) Comparación entre la curva C-V ideal y experimental.

Figura 2. (Derecha) D_{it} en función de la energía del gap.

La figura 2 nos muestra estos resultados, y efectivamente vemos que D_{it} es muy baja en la mitad del gap del Si, abajo del orden de $10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$. Como la resolución del equipo no es suficiente para cuantificar la D_{it} en la mitad del gap y establecer así una

relación entre las variaciones de presión y temperatura a las cuales se realizaron los depósitos, se optó por cuantificar la D_{it} en la cola de la banda de valencia (la figura 3 nos muestra estos resultados). En promedio obtenemos una D_{it} en la cola de la banda de valencia del orden de $1.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$.

Otro tipo de mediciones que se realizaron es la correspondiente al campo eléctrico crítico que resiste el aislante. Los resultados de estas mediciones se observan en la figura 4. Las mediciones se hicieron con una rampa de voltaje de 0.2 V/seg y se consideró que el dispositivo se rompía cuando pasaba a través de él una corriente de 1 mA .

En promedio, el campo eléctrico crítico que soportan estos dispositivos son del orden de 6 MV/cm , a pesar de que los espesores son de alrededor de 100 \AA .

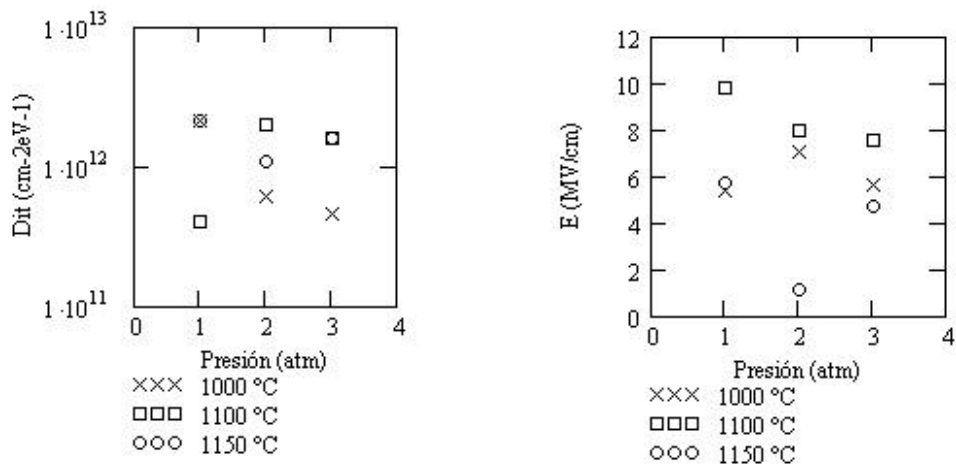


Figura 3. (Izquierda) D_{it} en la cola de la banda de valencia.

Figura 4. (Derecha) Campos críticos para los dispositivos MIS

Conclusiones

Las películas de dióxido de silicio nitrado obtenidas térmicamente en ambiente de N_2O son de muy buena calidad en el sentido de que poseen una D_i muy baja en la interfaz. Como sabemos, los estados en la interfaz se deben a defectos estructurales (enlaces sueltos) inducidos por la oxidación, los cuales, al parecer, están siendo compensados por la incorporación de nitrógeno, ya que esta incorporación se lleva a cabo desde la interfaz Si-SiO₂ nitrado hacia la superficie del aislante [5], lo que ocasiona que estos nitrógenos incorporados saturen los enlaces sueltos y así logren disminuir esta fuente de estados en la interfaz [6].

Para el caso del campo eléctrico en ciertas condiciones (como podemos observar de la figura 4) los dispositivos pueden soportar hasta más de 9 MV/cm. Esto también nos garantiza una buena calidad del aislante.

Referencias

- [1] K. A. Ellis, R. A. Buhrman, IBM J. Res. Develop. vol. 43, No. 3 (1999), 287-300.
- [2] E. P. Gusev, H. C. Lu, E.L. Garfunkel, T.Gustfsson, M. L. Green, IBM J. Res. Develop. vol. 43, No. 3 (1999), 265-281.
- [3] J. Ahn, W. Ting, and Dim-Lee, IEEE Elect. Dev. Letters. vol. 13, No 2 (1992), 117-119.
- [4] E. H. Nicollian and J. R. Brews, "MOS physics and technology", John Wiley & Sons. Inc., Second Edition (1992).
- [5] D. A. Buchanan, IBM J. Res. Develop. vol. 43 No. 3, (1999), 245-264.
- [6] Tomiyuki Arakaw, Ryoichi Matsumoto, Applied Surface Science, 113/114 (1997), 605-609.

17. Difusión térmica de partículas Brownianas interactuantes

Omar A. Hernández Flores

Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla, 72570, Puebla, México

Resumen

De un reciente estudio del movimiento Browniano de partículas coloidales interactuantes bajo un gradiente de temperatura¹, se calcula explícitamente la difusión colectiva y térmica usando diferentes potenciales de interacción modelo. Se reportan los efectos, en la difusión, de: las interacciones, la fracción de volumen y temperatura.

Introducción

La difusión térmica de partículas coloidales interactuantes es un caso particular del problema del movimiento Browniano en un baño térmico (solvente, fluido) en un estado fuera de equilibrio y, en estas condiciones, es bien conocido el llamado *efecto Marangoni* (migración termocapilar), que consiste en la migración de una gota, inmersa en un fluido bajo un gradiente de temperatura, a la zona de mayor temperatura². Las aproximaciones básicas³ en la difusión de partículas interactuantes se derivan de la ecuación de Smoluchowski para la distribución de probabilidad de N partículas en el espacio de configuración, y de una extensión de los argumentos de Einstein en la movilidad y la difusión.

El estudio de este artículo, está basado en una teoría termodinámica fuera de equilibrio mesoscópica¹ de la cual se desprenden ecuaciones hidrodinámicas y las propiedades de transporte de fundamentos mesoscópicos. Se calculan explícitamente la difusión térmica y colectiva usando diferentes potenciales de interacción entre partículas Brownianas.

Teoría

El sistema que se estudia se encuentra en un estado semidiluido, por lo que las interacciones cobran importancia en las propiedades de transporte. Las interacciones entre partículas Brownianas que se consideran son de la forma siguiente:

$$\mathbf{f} = \begin{cases} \infty & \text{si } r \leq \mathbf{s} \\ \mathbf{e}\mathbf{f}_{INT}^* & \text{si } r \geq \mathbf{s} \end{cases}$$

Las ecuaciones de transporte encontradas por Mayorga et al¹, reescritas de una manera familiar a las teorías tradicionales, son:

$$\vec{j} = -\overleftrightarrow{D}_c \cdot \nabla n_B - \overleftrightarrow{D}_T \cdot \nabla \frac{T}{v_B}$$

$$\overleftrightarrow{D}_c = b_c \overleftrightarrow{kT} f_c(\Phi, T^*)$$

$$\overleftrightarrow{TD}_T = \overleftrightarrow{b}_c \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{g}} + \overleftrightarrow{b}_c \overleftrightarrow{kT} \Phi f_T(\Phi, T^*)$$

con las definiciones:

$$f_c(\Phi, T^*) = 1 - 8\Phi g_{eq}(\mathbf{s}^+) - \frac{8\Phi}{T^*} \int_0^\infty \frac{\partial \mathbf{f}_{INT}^*}{\partial x} g_{eq} x^3 dx$$

$$f_T(\Phi, T^*) = 1 - 4\Phi \left\{ T^* \frac{\partial g_{eq}}{\partial T^*} \Big|_{\mathbf{s}^+} - \int_0^\infty \frac{\partial \mathbf{f}_{INT}^*}{\partial x} \frac{\partial g_{eq}}{\partial T^*} x^3 dx \right\}$$

Los resultados que se presentan en este documento son consecuencia de considerar un potencial de interacción tipo Coulomb apantallado:

$$\mathbf{f}_{INT} = \left(\frac{\mathbf{e}}{\ln(2)} \right) \ln(1 + \exp[a(1-x)])$$

De manera inmediata se identifica la expresión ϕ_{INT}^* .

Resultados

Elegido el potencial de interacción, la evaluación de las expresiones dadas por f_c y f_T requiere de conocer la función de distribución a pares $g(\mathbf{r})$ en equilibrio. Los resultados preliminares se basan en la solución numérica de la ecuación de Ornstein-Zernike implementado el algoritmo de S. Lavik et al⁴. La figura 1 muestra el comportamiento de la función de distribución radial al variar la temperatura adimensionalizada T^* a una densidad adimensionalizada $\rho S^3=0.3$ para un potencial de interacción f_{INT}^* atractivo y repulsivo. En la figura 2 bajo las condiciones anteriores se presenta el potencial efectivo f_{ef} , los pozos de potencial muestran la presencia de estados ligados que llevan a la formación de parejas de partículas. El potencial efectivo para una interacción puramente repulsiva presenta valores negativos, es decir, una fuerza atractiva entre dos partículas coloidales, hecho que se justifica por la presencia de la interacción del resto de las partículas, promediadas canónicamente, sobre dichas partículas.

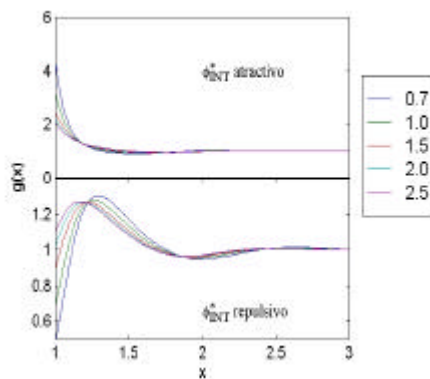


Figura 1

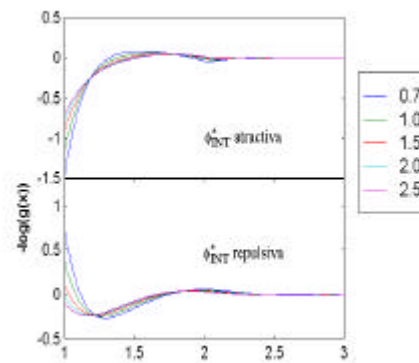
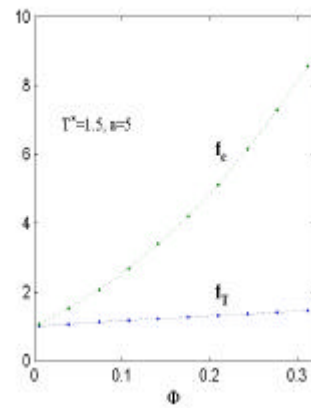
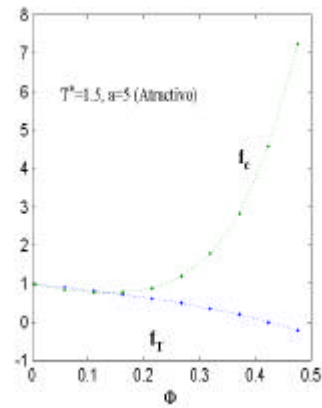
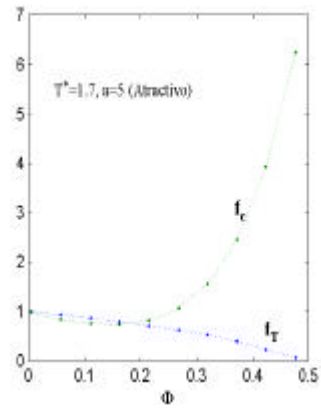
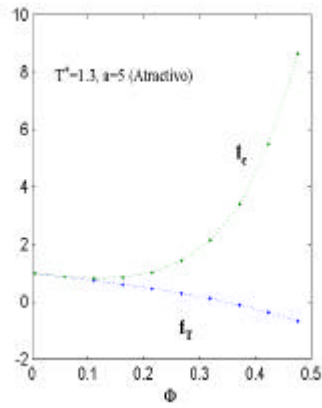


Figura 2

Las figuras siguientes muestran los resultados preliminares para las cantidades f_c y f_T . La presencia de una interacción atractiva da como resultado una disminución¹ en f_c (el inverso de la compresibilidad isotérmica) lo que significa una expansión del sistema ya que la presión disminuye para luego aumentar. En el caso de repulsión pura f_c crece monótonamente. Para las graficas de f_T los resultados son novedosos. El siguiente objetivo será entonces comparar los resultados obtenidos con experimentos de difusión.



Bibliografía

- [1] M. Mayorga, B. Domínguez, L. Romero-Salazar; *Mol. Phys.* (2000) en prensa.
- [2] B. U. Felderhof, *Physica A* (1997) **235** 48-55.
- [3] C. Van den Broeck, F. Lostak, H.N.W. Lekkerkerker, *J.Chem. Phys.* (1981) **74** 2006-2010.
- [4] Stanislav Lavík, Anatol Malijevský, Petr Vonka; *Mol. Phys.* (1985) **56** 709-715.

18. Dispersión caótica de partículas clásicas en una guía de ondas con impurezas

G. Orellana Rivadeneyra¹, C. Jung² y G. A. Luna Acosta¹

¹ Instituto de Física, BUAP, Puebla

² Centro de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca

Resumen

Se obtuvieron características cualitativas y cuantitativas de la dispersión caótica de partículas clásicas en un modelo de guía de ondas con una impureza. Esto se hizo mediante el análisis de la topología del espacio fase en la región de dispersión y el tiempo de demora de las partículas dispersadas. En particular, se ha caracterizado lo que se conoce como herraduras de Smale y se ha estudiado su relación con los parámetros físicos del sistema.

Modelo

Se considera la dispersión de partículas que viajan en una guía de ondas mesoscópica en presencia de una impureza Coulombiana apantallada (ver figura 1). El Hamiltoniano del sistema es

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}kY^2 - \gamma \frac{e^{-a\sqrt{X^2+Y^2+\Delta^2}}}{\sqrt{X^2+Y^2+\Delta^2}},$$

donde k , a y Δ son parámetros que definen las dimensiones del sistema; γ es el parámetro de acoplamiento.

El Hamiltoniano adimensionado respecto de Δ y k es

$$H = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{1}{2}y^2 - C \frac{e^{-\alpha\sqrt{x^2+y^2+1}}}{\sqrt{x^2+y^2+1}}.$$

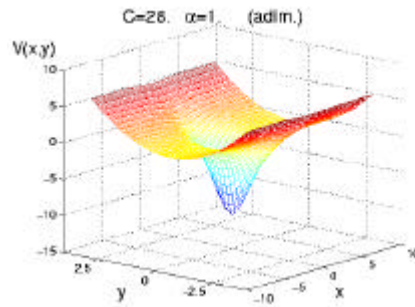


Figura 1. Esquema del potencial que representa la guía de ondas con una impureza.

Dinámica en la región de dispersión

Este sistema tiene tres órbitas periódicas elementales (de periodo 1) localizadas en $x = \pm \sqrt{2}$ y $x = 0$.

Para estudiar la dinámica se analiza la topología de un mapa de Poincaré definido por $y = 0$.

Para este sistema existe un conjunto caótico invariante. Tal conjunto está representado en la superficie de Poincaré por una *herradura de Smale ternaria simétrica* (ver figura 2).

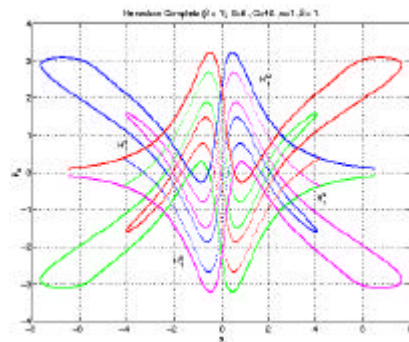


Figura 2. Herradura de Smale ternaria simétrica completa (parámetro de desarrollo $\beta = 1$). Para esta gráfica la energía adimensional es $\epsilon = 6$, $C = 40$ y $\alpha = 1$. La herradura está formada por la intersección de las variedades estables e inestables que parten de los puntos fijos en $x = \pm \infty$. Es mapeada en las coordenadas conjugadas (x, p_x) . Las variedades estables son las curvas azul y magenta; las inestables son las curvas verde y roja. H_1^u y H_1^s denotan los huecos que forman los tentáculos de las variedades inestables y estables, respectivamente, al cruzar el rectángulo fundamental.

Como consecuencia de que los puntos fijos externos estén en $x = \pm \sqrt{2}$, hay un alto grado de estiramiento de las herraduras. Entonces, es necesario cambiar de escenario para facilitar el análisis de características topológicas, tales como el grado de

desarrollo de las herraduras incompletas. Este cambio se hace a través de la transformación canónica

$$H(x, y, p_x, p_y) \rightarrow H(u, y, p_u, p_y), \text{ donde } u = \frac{\tanh(x/A)}{(x^2 + 1)^{1/4}}.$$

El nuevo escenario (ver figura 3) es el definido por el mapa de Poincaré de variables no conjugadas (u, p_x) .

El parámetro de desarrollo β de las herraduras depende de la correspondencia entre la energía adimensional ε y el parámetro de acoplamiento C (ver el panorama de la figura 4).

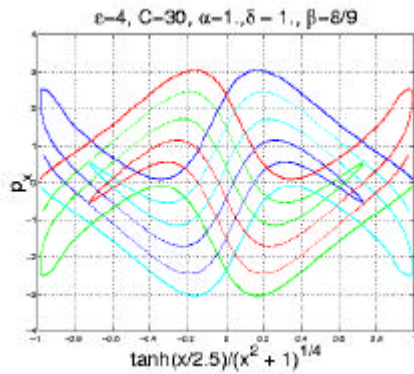


Figura 3. Herradura de $\beta = 8/9$ en el mapa (u, p_x) . Aquí, las dos variedades estables están representadas en azules y las inestables en rojo y verde.

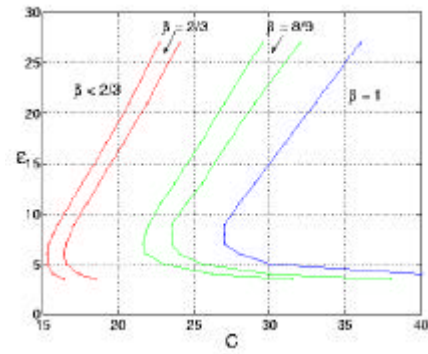


Figura 4. Panorama de herraduras. Las curvas rojas forman las fronteras de un intervalo de herraduras de $\beta = 2/3$, las curvas verdes delimitan el intervalo de herraduras de $\beta = 8/9$ y la curva azul es la frontera entre herraduras incompletas (izquierda) y completas (derecha).

Tiempo de demora

Como ejemplo de función de dispersión, se ha escogido el *tiempo de demora* como función del momento p_x inicial.

Si el Hamiltoniano del sistema es solamente el Hamiltoniano asintótico

$H_0 = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} + \frac{1}{2}y^2$, una partícula va del punto $x_i = -L$ al punto $x_f = L$ en un tiempo $t = 2 \frac{L}{p_1}$. Por lo tanto, el tiempo de demora bajo la dinámica del

Hamiltoniano total $H = H_0 + V$, es $\Delta T = \lim_{L \rightarrow \infty} \left[t_{(-L \rightarrow L)} - 2 \frac{L}{p_1} \right]$, donde $t_{(-L \rightarrow L)}$ es el tiempo que tarda una partícula en llegar de $x_i = -L$ a $x_f = \pm L$ cuando interactúa con el dispersor (ver figuras 5 a 8).

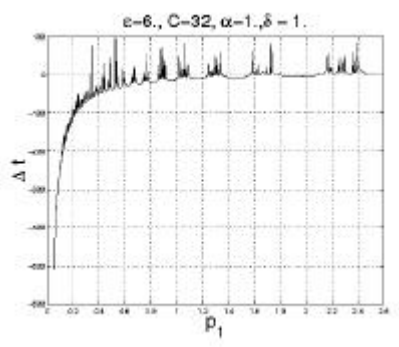


Figura 5. Tiempo de demora Δt como función del tiempo inicial (denotado como p_1). La escala en p_1 va de 0 a 2.6, en Δt va de -600 a 100.

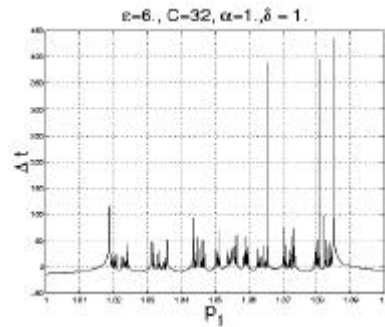


Figura 6. Primera magnificación de Δt . p_1 va de 1. a 1.1 y Δt va de -50 a 450.

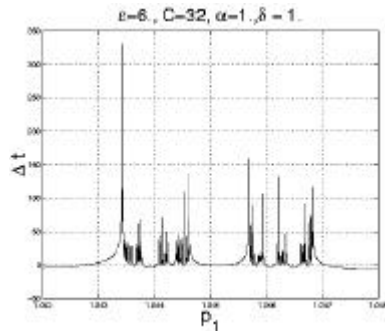


Figura 7. Magnificación de Δt . p_1 va de 1.042 a 1.048 y Δt va de -50 a 350.

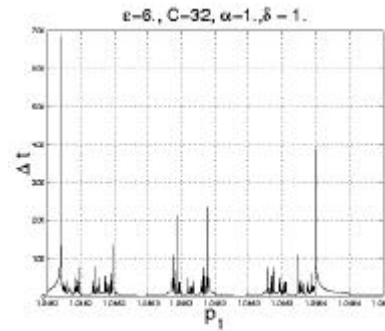


Figura 8. Tercera magnificación de Δt . p_1 va de 1.0462 a 1.0464 y Δt va de 0 a 700.

Conclusiones

1. Si $\varepsilon = 3.5$ no se forman herraduras completas.
2. Para toda energía $\varepsilon > 3.5$ y $C \geq 27$, existe una herradura completa.
3. Dado cualquier valor de C , siempre se puede encontrar un intervalo de energías que maximice el grado de desarrollo de la herradura. Fuera de dicho intervalo, el grado de desarrollo de la herradura disminuye suavemente conforme aumenta o disminuye la energía.
4. Existe una relación funcional $e = f(C)$ que deja el grado de desarrollo invariante ante cambios de C y ε . Esta relación es, al menos localmente, $e = mC$, donde m es una constante.
5. El tiempo de demora es una función de dispersión fractal.
6. Se tiene la certeza de que la dispersión es caótica.

Referencias

- [1] R. L. Ingraham, *A Survey of Nonlinear Dynamics ("Chaos Theory")* (World Scientific, 1992).
- [2] A. J. Lichtenberg and M. A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics* (Springer-Verlag, New York, 1992).
- [3] H. G. Schuster, *Deterministic Chaos, an Introduction* (Physik-Verlag, Weinheim, 1984).
- [4] Edward Ott, *Chaos in dynamical systems* (Cambridge University Press, 1993).
- [5] C. Jung, C. Lipp, and T. H. Seligman, *Ann. Phys.* 275, 151 (1999).
- [6] S. Smale, *Bull. Amer. Math. Soc.* 73, 747 (1967).
- [7] B. Ruckerl and C. Jung, *J. Phys. A* 27, 55 (1994).
- [8] B. Ruckerl and C. Jung, *J. Phys. A* 27, 6741 (1994).
- [9] W. Breyman and C. Jung, *Europhysics Lett.* 25, 509 (1994).

19. Frecuencia de relajación superficial de excitones en películas delgadas

N. Atenco-Analco

Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla, Pue. 72570, México.

Resumen

Aplicando el método autoconsistente de la función de Green, se investiga el efecto de la rugosidad superficial sobre la frecuencia de relajación superficial n de excitones en películas delgadas. Se muestra que la relajación energética del excitón se debe a la dispersión de su movimiento translacional paralelo a las superficies rugosas de la película. La dependencia explícita de n se obtiene en términos de los parámetros estadísticos que caracterizan el desorden superficial, el ancho medio de la película d , y las propiedades del excitón. La frecuencia de relajación presenta un comportamiento resonante debido a la cuantización del movimiento de centro de masa.

Introducción

Muchas propiedades ópticas de semiconductores asociadas a transiciones interbanda son fuertemente modificadas no sólo por la interacción de Coulomb entre los huecos y los electrones, sino también por el desorden. Un ejemplo típico es la frecuencia de relajación excitónica, la cual determina el ensanchamiento de la resonancia excitónica. Esta frecuencia se compone de dos partes con diferente naturaleza física: la primera describe el ensanchamiento homogéneo n_0 debido a la dispersión con impurezas o defectos distribuidos homogéneamente en el material; la segunda es la llamada frecuencia de relajación inhomogénea n , la cual se origina, por ejemplo, por el desorden en el semiconductor. En estructuras semiconductoras reales, la rugosidad inherente de las interfaces da origen a fluctuaciones en el potencial de interacción excitón-superficie y, consecuentemente, a un considerable incremento en la frecuencia de relajación y un corrimiento en la frecuencia de resonancia. La variación de n depende de la frecuencia de la luz incidente y por lo tanto puede modificar la forma de línea de las resonancias en diversos espectros ópticos [1-3]. Usualmente, en

las técnicas espectroscópicas convencionales (reflectividad, transmisión, absorción) no se toma en cuenta la variación de la frecuencia de relajación debida al desorden superficial ya que se requiere de una teoría sistemática que considere la influencia de la rugosidad superficial sobre el ensanchamiento de la resonancia excitónica.

El principal problema al estudiar los efectos de la rugosidad en sistemas confinados se debe a la interacción del excitón con las interfases del medio y a la interacción coulombiana del par electrón-hueco. Estas interacciones hacen que los movimientos del electrón y el hueco estén acoplados. Un tipo de sistemas excitónicos confinados son los pozos cuánticos, en éstos se tienen dos regímenes de confinamiento cualitativamente diferentes. En el régimen de confinamiento fuerte, generalmente conocido como pozo cuántico, donde $d \ll a_0$ (d es el ancho del medio excitónico, a_0 es el radio de Bohr excitónico), los movimientos del electrón y el hueco se cuantizan por separado en la dirección perpendicular al plano del pozo. Además, la energía de confinamiento es mayor que la energía de la interacción coulombiana. Sin embargo, debido a la atracción de Coulomb en el plano del pozo el par electrón-hueco forma excitones cuasi-bidimensionales [4]. En cambio, en el régimen de confinamiento débil ($d \gg a_0$), también llamado régimen de película delgada, el movimiento del centro de masa del excitón se cuantiza en la dirección perpendicular a las interfases y el movimiento relativo es esencialmente igual que en el bulto excepto por una posible distorsión cerca de las superficies [4]. En este caso, debido a la interacción excitón-superficie aparecen capas de transición (libres de excitones) cerca de las fronteras y, consecuentemente, el confinamiento del centro de masa ocurre en una longitud efectiva d_{ef} ($d_{ef} = d - 2l$, l es el ancho de la capa de transición). Un modelo apropiado para considerar la capa de transición repulsiva es la capa muerta [5]. Sin embargo, en el estudio de las propiedades ópticas de medios caracterizados por un excitón de radio pequeño, como el CuCl, el efecto del potencial superficial intrínseco (capa muerta) puede despreciarse [4].

El ensanchamiento inhomogéneo en un pozo cuántico con desorden superficial ha sido estudiado (vea, por ejemplo, [3] y sus referencias). En cambio, para el régimen de película delgada aún no se han publicado resultados. En este trabajo, empleando el método autoconsistente de la función de Green [6] se calcula la frecuencia de relajación superficial para el caso de una película semiconductor delgada con superficies rugosas. Por simplicidad, en el desarrollo de la teoría se considera un semiconductor con radio excitónico pequeño, de tal forma que el ancho efectivo d_{ef} de la región de confinamiento para el centro de masa pueda ser tomado como el ancho medio de la película (se desprecia la capa muerta).

Planteamiento del problema

Consideremos una película semiconductor excitónica, de anchura media d , confinada en la región $\xi(x) \leq z \leq \xi(x) + d$, donde z es la coordenada a lo largo de la dirección de crecimiento, $\xi(x)$ es una función aleatoria, estacionaria, que representa el perfil superficial de la película y está caracterizada por las propiedades

$$\langle \xi(x) \rangle = 0, \quad \langle \xi(x)\xi(x') \rangle = \sigma^2 W(|x - x'|). \quad (1)$$

El paréntesis angular representa el promedio estadístico sobre el ensemble de realizaciones de la función $\xi(x)$, σ es la altura raíz cuadrática media de la rugosidad. La función de correlación $W(|x|)$ tiene una amplitud unitaria, $W(0)=1$, y una escala típica R_c de disminución monótona (R_c es el radio de correlación). Así, se supone que una frontera es rugosa y la otra, por simplicidad, es plana. Sin embargo, tal sistema es físicamente equivalente a tener una película con ambas superficies rugosas, estadísticamente idénticas, y no correlacionadas [7].

Adoptando un semiconductor caracterizado por un excitón de radio pequeño, de modo que podamos despreciar el efecto del potencial superficial intrínseco, y suponiendo un modelo de dos bandas no degeneradas, con un gap de energía E_g entre las bandas de conducción y de valencia, el Hamiltoniano de masa efectiva para el centro de masa del excitón, asociado a un estado λ del problema hidrogenoide, es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + E_g + E_\lambda^r - i\hbar \mathbf{n}_0. \quad (2)$$

Aquí, E_λ^r incorpora la dinámica del movimiento relativo, $\lambda = \{n, l, m\}$ denota el conjunto completo de números cuánticos asociados al movimiento relativo, y $M = m_e + m_h$ es la masa total, donde m_e (m_h) es la masa efectiva del electrón (hueco). En (2) \mathbf{n}_0 es un amortiguamiento homogéneo introducido para tomar en cuenta la contribución de la interacción excitón-bulto sobre la frecuencia de relajación.

Para analizar los estados excitónicos en la película con rugosidad superficial $\xi(x)$ se obtiene la función de Green retardada $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, asociada al Hamiltoniano (2). Ésta debe satisfacer la relación

$$\left[E - \hat{H} \right] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3)$$

sujeta a condiciones de frontera del tipo Dirichlet: $G(z=\xi(x))=0$, $G(z=d)=0$, condición de no escape para el excitón.

La frecuencia de relajación superficial se determina de una ecuación integral para $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. El teorema de Green proporciona la ecuación integral exacta, la cual toma la forma de una ecuación tipo Dyson:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') + \int_{-\infty}^{\infty} dx_1 G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V(\mathbf{r}_1) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (4)$$

Aquí, G_0 es la función de Green para el caso de superficies ideales ($\xi(x) = 0$), el kernel de la integral $V(\mathbf{r}_1)$ se interpreta como el potencial de dispersión excitón-superficie y tiene la forma

$$V(\mathbf{r}_1) \equiv \frac{\bar{\partial}}{\partial z_1} \Big|_{z_1=0} \frac{\hbar^2}{2M} \mathbf{x}(x_1) \frac{\bar{\partial}}{\partial z_1} \Big|_{z_1=0}. \quad (5)$$

Las flechas sobre las derivadas denotan una dirección de la operación, \leftarrow (\rightarrow) significa derivar lo que se encuentre a la izquierda (derecha) de $V(\mathbf{r}_1)$.

Convenientemente, para una mejor manipulación algebraica, (4) se escribe en forma simbólica, además, debe promediarse. Aquí, empleando la técnica propuesta en la Ref. [8], y de la homogeneidad estadística (1), se obtiene una ecuación integral para la función de Green promediada $\bar{G} \equiv \langle G \rangle$, que en la aproximación autoconsistente cuadrática de Born se escribe como

$$\bar{G} \equiv G_0 + G_0 \langle \hat{V} \bar{G} \hat{V} \rangle \bar{G}. \quad (6)$$

Frecuencia de relajación

En la solución de la ec. (6) he restringido el problema al caso ($k_x R_c \ll 1$) y consideraré excitones tipo $1s$. Así, en la aproximación polar [9] la transformada de Fourier $\bar{G}(k_x; z, z')$ de la función de Green promediada está dada por

$$\bar{G}(k_x; z, z') = \frac{2M}{\hbar^2 k_r} \frac{\cot(k_r d) \operatorname{sen}(k_r z) \cos(k_r z')}{1 + \frac{M}{\hbar^2} \frac{\cot(k_r d)}{k_r^2} \mathbf{n}}. \quad (7)$$

Aquí, $k_r = \left[\frac{2M}{\hbar} [\mathbf{w} - \mathbf{w}_T + \mathbf{m}_0] - k_x^2 \right]^{1/2}$, $\hbar \mathbf{w}$ es la energía total del excitón $1s$ y $\hbar \mathbf{w}_T = E_g + E_i'$ su correspondiente energía de resonancia. La frecuencia de relajación \mathbf{n} que aparece en $\bar{G}(k_x; z, z')$ se obtiene de la relación:

$$\mathbf{n} = -\frac{\mathbf{z}^2}{2} \left(\frac{\hbar}{M} \right)^2 k_r^3 \cdot \operatorname{Im}(\mathbf{k}), \quad (8)$$

donde \mathbf{k} se determina a través de la expresión

$$\mathbf{k} = \frac{M}{\mathbf{p} \hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dk_x' W(k_x') \frac{k_r' \cot(k_r' d)}{1 - \mathbf{z}^2 \left(\frac{\hbar^2}{2M} \right) k_r' \cot(k_r' d) \mathbf{k}}. \quad (9)$$

Así, el ensanchamiento inhomogéneo (8), debido a la rugosidad superficial, se obtiene en términos de los parámetros estadísticos que caracterizan el desorden superficial, las características del excitón, y el ancho medio de la película. De (8) y (9) es claro que la frecuencia $\mathbf{n}(\mathbf{w})$ presenta una serie de resonancias, las cuales se originan por la cuantización del movimiento de centro de masa del excitón.

Para tratar semiconductores con radio excitónico grande el desarrollo es similar. En tal caso se considera el ancho efectivo de la región de confinamiento para el centro de masa del excitón y la rugosidad se toma en cuenta en ambas fronteras de la capa muerta. En el análisis del ensanchamiento inhomogéneo en una película con rugosidad superficial bidimensional el método es el mismo pero los cálculos son ligeramente más complicados.

Conclusiones

Empleando el método autoconsistente de la función de Green se calculó microscópicamente la frecuencia de relajación excitónica para una película delgada. Esta teoría es esencialmente diferente y mucho más general que la aproximación de Born ordinaria (no autoconsistente). Se muestra que una teoría apropiada para describir la dispersión excitón-superficie debe tomar en cuenta la acción inherente de la dispersión del excitón sobre sí misma. El resultado principal de la teoría desarrollada es una ecuación relativamente simple para la frecuencia de relajación superficial, la cual es fácilmente analizable y presenta una dependencia explícita sobre los parámetros estadísticos que caracterizan el desorden superficial, las características del excitón, y el ancho medio de la película. A diferencia de los modelos fenomenológicos el comportamiento de n , en función de la frecuencia, presenta un comportamiento resonante como resultado de la cuantización del centro de masa.

Agradecimientos. Este trabajo fue parcialmente apoyado por CONACyT, proyecto No. 36047-E. Agradezco también a F. Pérez Rodríguez y N.M. Makarov por formular el presente problema y discutir los resultados obtenidos.

Referencias

- [1] V. A. Kosobukin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **108**, 163 (1998).
- [2] L. C. Andreani, G. Panzarini, A. V. Kavokin, and M.R. Vladimirova, *Phys. Rev. B* **57**, 4670 (1998).
- [3] N. Atenco-Analco, N. M. Makarov, and F. Pérez-Rodríguez, *Solid State Commun.* **119**, 163 (2001).
- [4] Z. K. Tang, A. Yanase, T. Yasui, Y. Segawa, and K. Cho, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1431 (1993); Z. K. Tang, A. Yanase, Y. Segawa, N. Matsuura, and K. Cho, *Phys. Rev. B* **52**, 2640 (1995).
- [5] J. J. Hopfield and D. G. Thomas, *Phys. Rev.* **132**, 563 (1963).
- [6] T. Stroucken, A. Knorr, C. Anthony, A. Schulze, P. Thomas, S.W. Koch, M. Koch, S.T. Cundiff, J. Feldmann, and E. O. Göbel, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2391 (1995).
- [7] F. G. Bass and I. M. Fuks, *Wave Scattering from Statistically Rough Surfaces* (Pergamon, New York, 1979).
- [8] A. R. McGurn and A. A. Maradudin, *Phys. Rev. B* **30**, 3136 (1984).
- [9] N. M. Makarov and A. V. Moroz, *Phys. Rev. B* **60**, 258 (1999).

20. Acoplamiento fotón-fonón en superficies de semiconductores: Método de expansión en modos de bulto

F. L. Pérez Sánchez

Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla, Pue. 72570

Resumen

Se desarrolla un método para calcular funciones ópticas (reflectividad) de semiconductores en el lejano infrarrojo. El método permite estudiar el acoplamiento de la luz incidente con los modos de vibración (fonones) tanto de bulto como de superficie. Este método está basado en la aplicación del modelo adiabático de cargas de enlace, el cual es un modelo fenomenológico simple que describe bastante bien los modos de vibración en el volumen de semiconductores. Presento detalles matemáticos importantes en el empleo del método desarrollado.

Introducción

Las espectroscopías ópticas en el rango del infrarrojo lejano permiten estudiar los modos de vibración de los átomos tanto de bulto como de superficie. Los modos de superficie dependen fuertemente del tipo de arreglo atómico de las superficies de los cristales. Como consecuencia de procesos tales como la reconstrucción y la relajación, las superficies cristalinas presentan corrugación microscópica, cuya periodicidad comúnmente es diferente a la de los planos internos del cristal. Hasta el momento, la mayoría de los trabajos teóricos que se ocupan en la investigación de la respuesta óptica de los modos vibracionales de superficies, en particular de los semiconductores, se han limitado a estudiar los casos de superficies ideales (con la misma periodicidad que en los planos paralelos en el bulto) y empleando modelos de iones rígidos para describir las interacciones de los átomos en una celda primitiva [1,2]. Trataré el caso más real de una superficie reconstruida, en donde un modelo de ión rígido se hace incompatible, debido a que no toma en cuenta la contribución a la energía debida a las deformaciones de las nubes electrónicas tanto en el bulto como

en las superficies de estos cristales. Para esto, es necesario desarrollar una teoría del acoplamiento de fonones con fotones en superficies semiconductoras realistas para el cálculo de espectros de reflectividad diferencial, los cuales pueden detectar resonancias asociadas a fonones de superficie [1,2].

El objetivo de este trabajo es desarrollar un formalismo teórico para describir el acoplamiento resonante de luz infrarroja con los modos de vibración de distintas superficies de cristales semiconductores.

Formalismo teórico

Consideremos un cristal semiconductor semi-infinito. En la aproximación armónica las ecuaciones de movimiento de los iones y las cargas efectivas de los enlaces covalentes se pueden escribir como

$$-m_s \omega^2 \mathbf{u}_{is} = \sum_{jt} \Gamma_{isjt} (\mathbf{u}_{jt} - \mathbf{u}_{is}) + \sum_{kn} \Gamma_{iskn} (\mathbf{s}_{kn} - \mathbf{u}_{is}) + q_s \mathbf{E}^T(\mathbf{R}_{is}^{(i)}), \quad (1)$$

$$-m'_n \omega^2 \mathbf{s}_{kn} = \sum_{lm} \Gamma_{knlm} (\mathbf{s}_{lm} - \mathbf{s}_{kn}) + \sum_{jt} \Gamma_{knjt} (\mathbf{u}_{jt} - \mathbf{s}_{kn}) + Q_n \mathbf{E}^T(\mathbf{R}_{kn}^{(c)}), \quad (2)$$

donde \mathbf{u}_{is} y \mathbf{s}_{kn} son los desplazamientos de los iones y las cargas de enlace desde sus posiciones de equilibrio $\mathbf{R}_{is}^{(i)}$ y $\mathbf{R}_{kn}^{(c)}$ respectivamente, m_s es la masa del ion del tipo s , m'_n es la masa de la carga n , ω es la frecuencia de vibración, \mathbf{G}_{knjt} representa la matriz de interacción total entre iones jt y cargas de enlace kn que contiene un término de interacción de corto alcance más un término de interacción de largo alcance (fuerzas de Coulomb). Las cantidades q_s y Q_n denotan las cargas efectivas de los iones y los enlaces. El vector \mathbf{E}^T en las ecuaciones (1), (2) es el campo eléctrico transversal retardado que interactúa con todas las partículas cargadas de la red cristalina y obedece las ecuaciones de Maxwell:

$$\nabla^2 \mathbf{E}^T \mathbf{r} + \mathbf{e}_\infty \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}^T \mathbf{r} = -4\mathbf{p} \frac{\omega^2}{c^2} P^T \left[\sum_{jt} q_t \mathbf{u}_{jt} \mathbf{d}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{jt}) + \sum_{jn} Q_n \mathbf{s}_{jn} \mathbf{d}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{jn}) \right] \quad (3)$$

en donde P^T es el operador de proyección transversal, $\mathbf{d}(\mathbf{r})$ es la función delta de Dirac y c es la velocidad de la luz en el vacío.

En el bulto del cristal las soluciones del sistema de ecuaciones adquieren la forma de ondas de Bloch:

$$\mathbf{u}_{is} = \mathbf{u}_s(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{is}^{(i)}}, \quad (4)$$

$$\mathbf{s}_{kn} = \mathbf{s}_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{kn}^{(c)}}, \quad (5)$$

$$\mathbf{E}^T(\mathbf{r}) = \mathbf{E}^T(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (6)$$

En esta última expresión, $\mathbf{E}^T(\mathbf{r})$ define el campo eléctrico macroscópico ya que se han despreciado modulaciones microscópicas de la forma $e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$, donde \mathbf{K} es un vector no nulo de la red recíproca.

Para luz incidente normal a la superficie, los modos excitados tienen vectores de Bloch $\mathbf{k}=(0,0,k_z)$. Las relaciones de dispersión $\mathbf{w}(k_z)$ para los modos fotón-fonón se obtienen de las ecuaciones (1)-(6). Sin embargo, a fin de estudiar la excitación de estos modos es necesario resolver la relación inversa $k_z(\mathbf{w})$. En este caso se encuentra una solución de onda larga, correspondiente al fotón dentro del medio, soluciones de onda corta asociadas con los fonones acústicos y ópticos de bulto (es decir, con k_z real), y soluciones evanescentes (con k_z imaginarios).

Los desplazamientos de todas las cargas en un cristal semi-infinito se pueden expresar como una superposición de modos de bulto de la siguiente manera:

$$\mathbf{u}_{is} = \sum_{l=1}^3 \sum_{k_z^l} \mathbf{h}(k_z^l, l) \mathbf{u}_s(k_z^l, l) e^{ik_z^l Z_{is}}, \quad (7)$$

$$\mathbf{s}_{in} = \sum_{l=1}^3 \sum_{k_z^l} \mathbf{h}(k_z^l, l) \mathbf{s}_n(k_z^l, l) e^{ik_z^l Z_{in}}, \quad (8)$$

donde $\mathbf{u}_s(k_z^l, l)$, $\mathbf{s}_n(k_z^l, l)$ son los vectores de polarización correspondientes a k_z^l el cual varía sobre todas las soluciones de la relación de dispersión $k_z(\mathbf{w})$ para los modos de bulto asociados con la rama l (dos transversales y una longitudinal). Las amplitudes $\mathbf{h}(k_z^l, l)$ se determinan requiriendo que los desplazamientos \mathbf{u}_{is} (7), \mathbf{s}_{in} (8) satisfagan las ecuaciones de movimiento no sólo en el bulto sino también cerca de la superficie cristalina. Truncando la interacción de Coulomb después de un número finito de planos cristalinos paralelos a la superficie, el sistema de ecuaciones para las amplitudes $\mathbf{h}(k_z^l, l)$ se vuelve finito. A este sistema de ecuaciones se agrega otra ecuación dada por la expresión para el campo eléctrico macroscópico (6) en términos

de las amplitudes $\mathbf{h}(k_z^l, l)$. Finalmente, aplicando condiciones de frontera y de continuidad para los campos eléctrico y magnético en la superficie del cristal, se cierra el sistema finito de ecuaciones para las amplitudes de los desplazamientos de cargas así como las amplitudes de las componentes de la luz incidente normal a la superficie. Resolviendo el sistema se puede calcular la reflectividad infrarroja R del sistema. Los espectros de reflectividad anisotrópica diferencial se obtienen restando las reflectividades para dos polarizaciones lineales diferentes de la luz incidente. Aplicando el método de expansión en modos de volumen he obtenido resultados específicos para semiconductores homopolares con estructura de diamante los cuales serán presentados en una publicación posterior.

Agradecimientos. Este trabajo es parcialmente apoyado por el CONACYT bajo el proyecto 36047-E. Agradezco al Dr. F. Pérez Rodríguez por su orientación en esta investigación.

Referencias

- [1] W. L. Mochán, J. Récamier, Phys. Rev. Lett. **63**, 2100 (1989).
- [2] F. Pérez Rodríguez, J. Recámier. W. L. Mochan, Surf. Science **414**, 93 (1998).

21. Estudio preliminar de la estructura electrónica del compuesto CeFeGe_3

E. Chigo-Anota*, A. Flores-Riveros**, J. F. Rivas-Silva** y A. Bautista-Hernández**

**Facultad de Ciencias Químicas, Blvd. 14 Sur 6301, C. P. 72570. C. U., Puebla. Pue. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla*

***Instituto de Física "LRT", Av. San Claudio y 18 Sur, Apdo. Postal J-48, 72570. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla*

Resumen

Mediante las aproximaciones **ESOCs** y **LMTO-ASA** dentro de la teoría **DFT** se investiga la estructura electrónica del compuesto Kondo **CeFeGe₃**. Los cálculos ab-initio (o de primeros principios) aquí realizados son: las densidades de estados (DOS), estructuras de bandas (EB) y absorción teórica (AT) en las metodologías antes mencionadas y comparamos los resultados obtenidos por dichas aproximaciones. Esta etapa preliminar de estudio se realiza para una mejor comprensión del material como compuesto Kondo.

Introducción

Los compuestos de electrones pesados [1] han sido estudiados desde hace mucho tiempo, estos se pueden clasificar en dos grupos: *los compuestos de Kondo concentrado (CK)* y *los compuestos de valencia intermedia (VI)* [2,3] dependiendo de la posición del nivel *4f* o *5f* relativo al nivel de Fermi. Los compuesto CK tienen una integral de valencia bien definida a altas temperaturas en comparación con la temperatura Kondo T_k (TT_k), pero a muy bajas temperaturas (TT_k) entran en un estado de *líquido de Fermi* con reducción del momento magnético. Por otro lado, los compuesto VI no poseen una integral de valencia a temperatura ambiente como resultado de la *fuerte hibridización de los electrones 4f* y los *electrones de conducción* por la proximidad anómala del nivel *4f* al nivel de Fermi.

Por otro lado, el compuesto aquí estudiado **CeFeGe₃** [4] al parecer posee los dos comportamientos: una T_k alta del orden de 100 K y una integral trivalente de valencia para el Ce a temperatura ambiente.

En este trabajo se realizan cálculos *ab-initio* (o de primeros principios) de la estructura electrónica del compuesto intermetálico CeFeGe₃ (estructura tetragonal con grupo espacial 107) usando teoría **DFT** (density functional theory) [5] en las aproximaciones **ESOCs** (electronic structure of close packed solids) implementada en el programa **Cerius²** [6] y la aproximación **LMTO-ASA** (linear muffin-tin orbitals-atomic sphere approximation) implementada en el programa del mismo nombre [7], obteniéndose con esto las *densidades de estados* y *estructuras de bandas* (usando el parámetro de celda experimental) en ambas metodologías y comparando resultados en dichas aproximaciones.

Metodología computacional

La primera aproximación (**ESOCs**) implementada en el programa Cerius², es utilizada en sistemas de capa cerrada y está basada en las aproximaciones **LSDA** (local spin density approximation, con una funcional local de electrones que toma en cuenta el espín) y **ASA** (atomic sphere approximation, aproximación esférica sin zona de electrones libres en la estructura muffin-tin). Se aclara que también es útil para sistemas de capa abierta (como lo es el presenta caso), donde el procedimiento para su generalización consiste en poner esferas vacías (pero con funciones de onda asociadas) en la región intersticial para satisfacer la condición ASA y con esto tener el volumen cubierto de celda correcta.

Sus áreas de aplicación son: la obtención de *propiedades estructurales de sólidos, elásticas, magnéticas ópticas*, etc. Las funciones orbitales usadas por **ESOCs** son del tipo **LCAO** (linear combination of atomic orbitals) dadas en términos de funciones de Hankel esféricas y Bessel.

Y en el *segundo* (**LMTO-ASA**) la idea principal es hacer que la celda unitaria sea dividida en esferas *muffin-tin traslapadas* (con un traslape máximo de 15% para que se considere un cálculo aceptable) y una región intersticial, con el potencial de simetría esférica dentro de las esferas y constante en la región intersticial, además de la condición **ASA** (atomic sphere approximation, aproximación esférica sin zona de electrones libres en la estructura muffin-tin).

Por otro lado, los orbitales muffin-tin dependen de la energía para linearizar a las funciones de onda. En este tipo de aproximación el potencial V_{xc} usado es de von Barth-Hedin[8] o el de Ceperly-Alder[9] y se emplean también correcciones de gradiente del tipo Langreth-Mehl-Hu y Perdew-Wang [10].

Resultados y discusión

Los cálculos de primeros principios aquí realizados para el compuesto intermetálico $CeFeGe_3$ fueron hechos usando los parámetros de celda experimental $a=b=4.332 \text{ \AA}$ y $c=9.955 \text{ \AA}$ [4] a nivel LDA en las aproximaciones **ESOCs** y **LMTO-ASA** dentro de la teoría de funcionales de la densidad.

átomos	Posición Cristalográfica
Ce	(0.0, 0.0, 0.0)
Fe	(1.0, 1.0, 0.66)
Ce ₁	(0.5, 0.0, 0.25)
Ce ₂	(1.0, 1.0, 0.42)

Tabla 1 Parámetros del $CeFeGe_3$ usado para los cálculos *ab-initio*

Ahora bien, presentamos las gráficas de las densidades de estados totales (figuras 1 y 2) y estructuras de bandas (figuras 3 y 5) y la absorción teórica (únicamente obtenida con el método **ESOCs**, figura 5).

Observando las gráficas de las DOS realizada en ambas aproximaciones tenemos que el material presenta un comportamiento metálico, dado que tenemos al nivel de Fermi ligeramente desplazado del punto de referencia (banda central) y en donde la gráfica de la DOS parcial (figura 4) corrobora que la contribución a estos estados es debido al Cerio (estados f del Cerio).

Este análisis también es apoyado por las gráficas de las EB en donde vemos una densa cantidad de bandas al nivel de Fermi debido a los estados f del Cerio como se menciona anteriormente. Además con esto se visualiza el comportamiento de fermión pesado por el material por tener bandas casi horizontales (por lo que su masa tiende a $m \sim 1/\nabla E_k = \infty$).

En el cálculo de la AT (figura 6) usando **ESOCs** observamos un pico de máxima absorción alrededor de 4 eV que corresponde al gap de energía interna mostrada en la DOS, siendo esto importante para el estudio de la luminiscencia cruzada.

Esperamos optimizar la geometría del sistema con el programa **CASTEP**[6], así como obtener las mismas propiedades anteriormente presentadas complementado estas con la aproximaciones **FP-LAPW** [11].

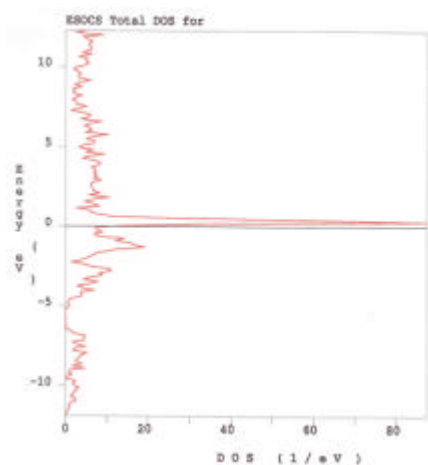


Figura 1. Densidad de estados total obtenida mediante programa **ESOCS** para el CeFeGe_3 .

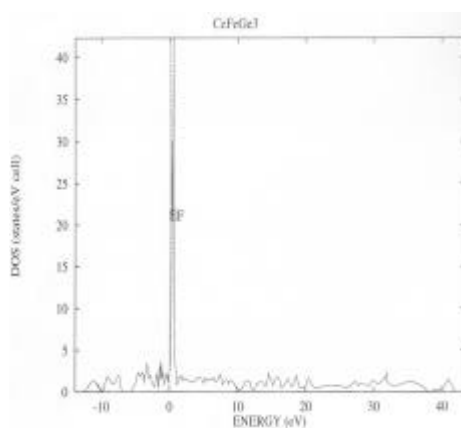


Figura 2. Densidad de estados total obtenida mediante programa **LMTO-ASA** para el CeFeGe_3 .

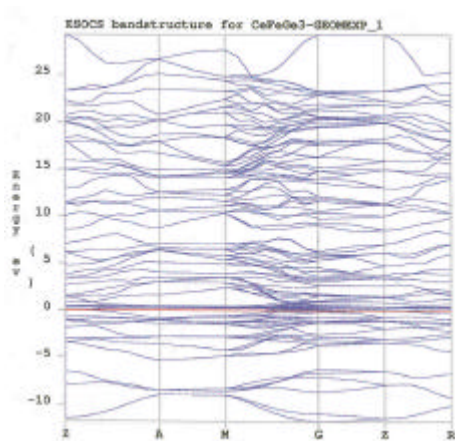


Figura 3. Estructura de bandas obtenida mediante el programa **ESOCS** para el CeFeGe_3 .

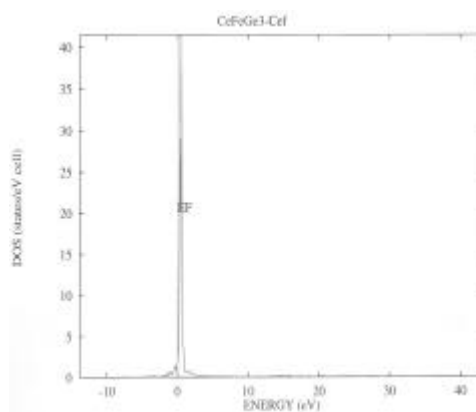


Figura 4. Densidad de estados parcial (estados f del Cerio) obtenida mediante el programa **LMTO-ASA** para el CeFeGe_3 .

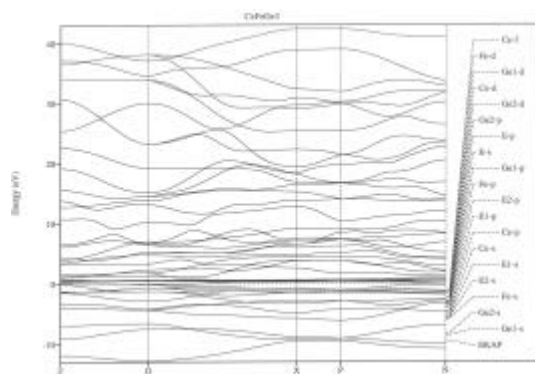


Figura 5. Estructura de bandas obtenida mediante el programa **LMTO-ASA** para el CeFeGe_3 .

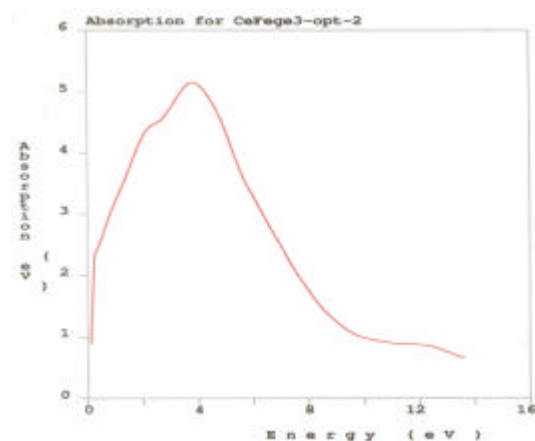


Figura 6. Absorción teórica obtenida mediante el programa **ESOCS**.

Agradecimientos. Se agradece al centro de cómputo del Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas" de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla el apoyo prestado para la realización de este trabajo.

Trabajo apoyado por **CONACYT** proyecto No. **32213-E** y la Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Postgrado de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (**VIEP**, proyecto No. **II-60G01**).

Referencias

- [1] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.* **56**, 755 (1984).
- [2] N. B. Brandt y V. V. Moshchalkov, *Adv. Phys.* **33**, 373 (1984).
- [3] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to heavy Fermions*, Cambridge University Press (1997).
- [4] H. Yamamoto, H. Sawa y M. Ishikawa, *Phys. Lett A* **196**, 83 (1994).
H. Yamamoto, M. Ishikawa, et al, *Phys. Rev. B* **52**, 10136 (1995).
- [5] P. Hohenberg y W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964);
W. Kohn y L. J. Sham, *Phys. Rev. A* **140**, 1133 (1965).
- [6] Manual de ESOCS y CASTEP, Cerius² Versión 4.2 Matsci, Molecular Simulations Inc. (2000).
- [7] Hans L. Skriver, *The LMTO Method*, Springer-Verlag (1984); O. Jepsen, G. Krier, A. Burkhardt y O. K. Andersen, *The TB LMTO-ASA program*, Max-Planck Institute, Stuttgart, Germany (1995).
- [8] U. von Barth and L. Hedin, *J. Phys. C* **5**, 1629 (1975).
- [9] D. M. Ceperly y B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [10] J. P. Perdew y Y. Wang, *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1996).
- [11] D. J. Sing, *Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method*, Kluwer Academic (1994).

22. Nanopartículas bimetálicas coloidales de Cu/Pd y Ni/Pd recubiertas con polímero PVP: Estudio estructural a través de campos de fuerza

M. López-Fuentes y J. F. Rivas-Silva

Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla. Apdo. Postal J-48. Puebla, Pue. 72570, México

Resumen

La interacción de nanopartículas metálicas con material orgánico (principalmente con polímeros) que controlan la estabilidad de esas partículas y los fenómenos cooperativos de estos materiales compuestos necesitan explicarse teóricamente. El desarrollo de modelos físicos que expliquen la formación y propiedades de este tipo de sistemas es muy reducido en la actualidad. El entender la geometría que adoptan los complejos así como su estructura electrónica, es esencial para predecir las diferentes formas de enlace e interacción con el medio en el cual se encuentren. Debido a esto se plantea estudiar a estos sistemas mediante campos de fuerza, en especial los llamados de segunda generación. En este trabajo damos resultados obtenidos a través de estos campos y se hace una comparación con el experimento y trabajos previos que utilizan otra metodología [6].

Introducción

En los últimos años, químicos, físicos y estudiosos de la Ciencia de Materiales han puesto su atención en el campo de nanopartículas motivados por el desarrollo de nuevos materiales que implican desde el desarrollo de dispositivos electrónicos miniaturizados hasta respuestas a cuestiones fundamentales como propiedades electrónicas moleculares relacionados con el tamaño entre los objetos moleculares y los de la Física del Estado Sólido [1-4]. Las posibles aplicaciones incluyen áreas de comunicación de datos ultrarrápidos y almacenamiento óptico de datos, nanopartículas semiconductoras utilizadas en la construcción de celdas solares, y nanopartículas metálicas en catálisis debido a su elevada razón superficie-volumen.

En particular, las nanopartículas se estudian por las propiedades ópticas únicas que presentan como las nanopartículas de metales alcalinos y metales nobles (como cobre, plata y oro) que presentan bandas de absorción anchas en la región visible del espectro electromagnético. Las soluciones de estos sistemas muestran un color muy intenso, el cual está ausente en los materiales en el bulto, así como en los átomos. Su origen es atribuido a oscilaciones colectivas de los electrones de conducción libres inducidos por un campo electromagnético interactuante. Estas resonancias son denotadas como *plasmones superficiales*.

Nuestro interés se centra en el sistema Cu/Pd recubierto con poli(N-vinil-2-pirrolidona) (PVP). Clusters bimetalicos compuestos de un metal noble y un metal de transición ligero son de gran importancia desde el punto de vista de la variación de la estructura electrónica y el efecto de ensemble en catálisis. Una forma de explicar o tener una aproximación de la estructura de tales arreglos es mediante la técnica de los *campos de fuerza*, en el contexto de la dinámica Molecular.

Un campo de fuerza (Forcefield) es una expresión analítica que nos da la energía de un sistema molecular en términos de las posiciones de todos sus átomos, llamada *energía potencial*. La forma de energía potencial es muy compleja y lo es más conforme el sistema se hace más grande, con muchas barreras y mínimos de energía, así como regiones en donde hay una gran variación en la energía y su curvatura. Debido a esto, las expresiones deben ser lo más aproximadas a la realidad y completas según el sistema en estudio. Los campos de fuerza usados para describir moléculas emplean una combinación de *coordenadas internas* y *términos* (distancias de enlace, ángulos de enlace, torsiones, etc.) para describir parte de la energía potencial debidas a la interacción entre átomos enlazados, y *términos no enlazantes* para describir las interacciones de van der Waals y electrostáticas entre ellos.

El objetivo de un campo de fuerza es describir moléculas con razonable aproximación, interpolando y extrapolando a partir de datos empíricos de pequeños modelos usados para parametrizar el campo de fuerza hacia un arreglo más grande del modelo relacionado. El significado físico de los tipos de interacciones en un campo de fuerza es de fácil entendimiento ya que se describen los grados de libertad del modelo en términos de enlaces, ángulos y torsiones. Los campos de fuerza que nos interesan aquí son los de *segunda clase o generación*, de acuerdo al tipo de sistema que estamos estudiando (nanoestructuras metálicas estabilizadas con polímeros). Estos campos de fuerza simplifican el problema expandiendo la expresión analítica completa, para incluir términos necesarios en un modelo aproximado de la energía potencial. La complejidad de estas expresiones requiere por tanto de un gran número de parámetros para evaluar la energía potencial intramolecular en un modelo

geométrico dado el sistema de átomos. Muchos de estos parámetros son inferidos a partir de experimentos, tales como de microondas, o de espectroscopia infrarroja. Cabe mencionar que, con el uso de métodos de mecánica cuántica es posible obtener en principio todos estos parámetros en los llamados métodos ab-initio de la Mecánica Cuántica.

En la práctica, muchas propiedades experimentales como son: frecuencias vibracionales, energías de sublimación, estructuras cristalinas, pueden ser reproducidas con un campo de fuerza ya que son capaces de reproducir con un buen acuerdo observables relevantes que incluyen efectos cuánticos de manera empírica.

Validación del campo de fuerza

Los campos de fuerza de la familia *Consistent ForceField* (CFF) [8] están parametrizados, probados y validados para grupos funcionales como carbonatos, carbamatos, fosfacenos, uretanos, siloxanos, silanos, ureas, zeolitas y metales [Sun et al 1994, 1995; Hill and Sauer 1994]. Nosotros tomamos en cuenta un modelo con el cual comparamos nuestros resultados, desarrollado por Zunger, et al [6]. En este trabajo se estudian aleaciones del tipo $A_{1-x}B_x$, sus energías y entropías de mezclado, la energía se calcula a partir de $E(\text{configuracional}) = \sum C_i J_i$; donde J_i es el potencial de interacción de los átomos en las diferentes configuraciones. De teoría de grupos propone que todos los estados configuracionales en estructuras fcc se pueden estudiar a partir de 10 configuraciones base, y toma valores experimentales con los cuales compara su modelo.

A partir de las condiciones de crecimiento, proponemos una estructura probable de la partícula, a la cual se la asigna un campo de fuerza de acuerdo al tipo de elementos que se tienen en el sistema, en nuestro caso optamos por el campo de fuerza de la familia CFF (Consistent forcefields) \rightarrow PCFF (polymers consistent forcefields): Este campo se basa en CFF91, que fue desarrollado y validado por: [Maple et al 1994a, b; Hwang et al 1994; Hagler & Ewing 1994]. Se aplica principalmente a polímeros, materiales orgánicos y metales. El siguiente paso es minimizar la estructura para así calcular interacciones: metal – metal, partícula metálica – recubrimiento y cluster – solvente.

Se utilizó el paquete Cerius2 (MSI), con sus subrutinas de construcción de modelo, optimizadores y bases de datos que contienen el campo de fuerza CFF.

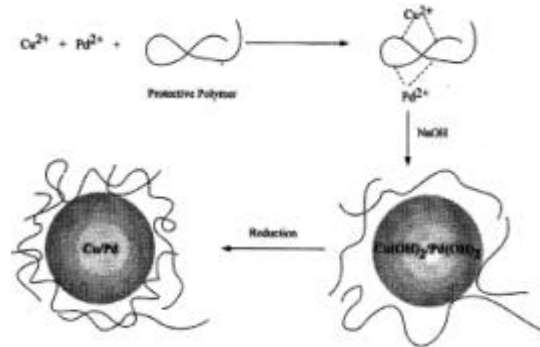


Figura 1. Proceso de formación de coloides de CuPd recubiertos con polímero con una estructura tipo aleación, *modelo experimental* [9]

Resultados y conclusiones

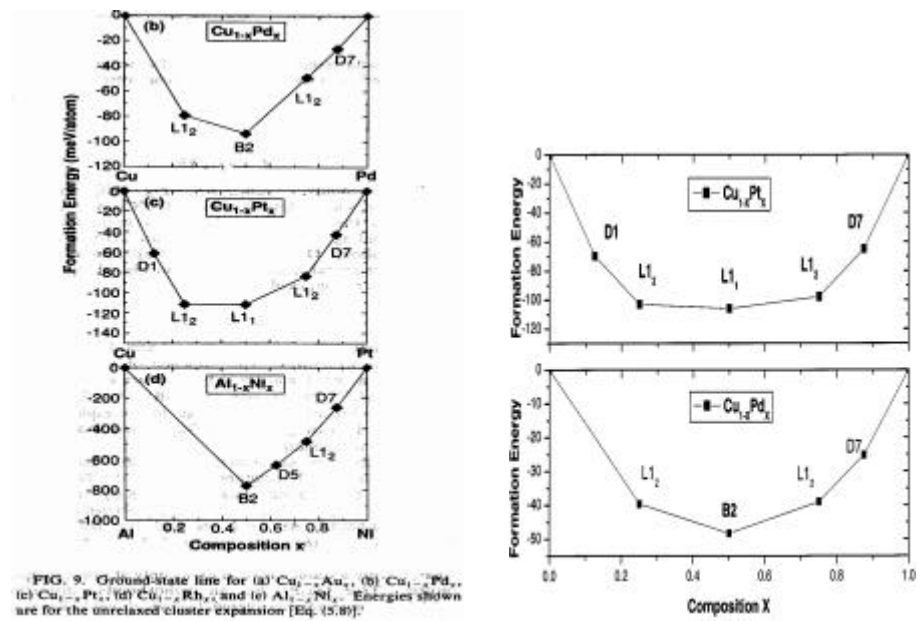


Figura 2. Resultados presentados en la referencia [6], a) cálculos realizados mediante programas de estado sólido, b) cálculos realizados mediante campos de fuerza mediante el programa Cerius.

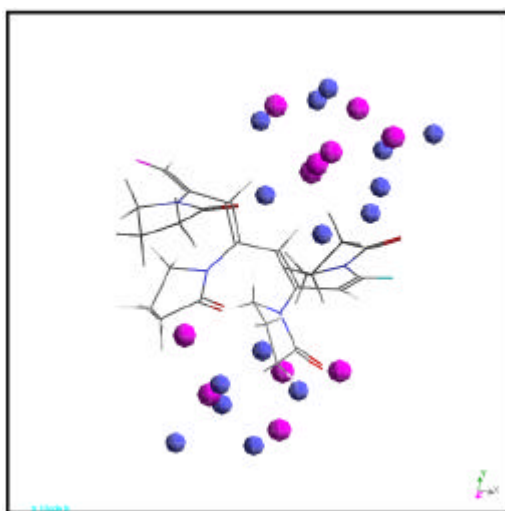


Figura 3. Estructuras de CuPd con el polímero poli(N-vinil-2-pirrolidona) (PVP) tratados con el campo de fuerza pcff_300_1 contenido en el programa Cerius. Los átomos azules corresponden al cobre y los violeta al paladio.

Discusión

Los resultados de cualquier cálculo mecánico o cuántico dependen crucialmente de los campos de fuerza, la calidad de la descripción del sistema, y las propiedades particulares que se van a analizar. Elegir el campo de fuerza correcto es muy importante para obtener resultados razonables a partir de cálculos de energía.

Como se puede concluir de la Fig. 2, donde se muestra el comportamiento de la energía que sigue el sistema CuPd y CuPt para ambos métodos de cálculo, se ve que el campo de fuerza Polymer Consistent ForceField (PCFF), *cualitativamente* nos da un buen resultado respecto a trabajos previos realizados con programas de estado sólido (Wien) [6], es decir, las tendencias en la energía como se observa en la figura 2 tienen la misma forma en los sistemas cristalinos de Cu/Pd y Cu/Pt. A partir de estos resultados, la formación de clusters bimetalicos junto con cadenas del polímero se lleva a cabo a partir de estructuras cristalinas obteniéndose estructuras como la mostrada en la Fig. 3, en donde se observa una tendencia de átomos de Cu y Pd

rodeándose del polímero cerca de los anillos que forman el polímero (éstos están constituídos principalmente de carbono, nitrógeno y oxígeno), que son una primera optimización de este tipo de sistemas. Estas estructuras tendrán un tratamiento posterior con Dinámica Molecular, en el cual se introducirán temperaturas de reacción, y se estudiarán las zonas de reactividad entre el polímero y el cluster metálico. Uno puede tener conformaciones previas para llevarlas a una optimización más fina con programas de Estado Sólido o moleculares que nos optimicen las estructuras y así calcular transiciones electrónicas que permitan caracterizar ópticamente a estos sistemas.

Agradecimientos. Este trabajo ha sido parcialmente apoyado por CONACYT, México y VIEP-II6/G01.

Referencias

- [1] Lu, P.; Teranishi, T.; Asakura, K.; Miyake, M.; and Toshima, N.; J. Phys. Chem. **103**, 9673 (1999).
- [2] Toshima, Naoki. Fine Particles Science and Technology, edited by Kluwer Academic Publisher (Netherlands) 1996, pp 371-383.
- [3] Wang, Y.; Liu, H.; and Toshima, N.; J. Phys. Chem. **100**, 19533 (1996).
- [4] Toshima, N.; and Wang, Y.; Langmuir, **10**, 4574 (1994).
- [5] Petroski M., Janet, Wang Zhong L., Green Travis, El-Sayed Mostafa A.; J.Phys.Chem. B, **102**, 3316 (1998).
- [6] Lu Z.W.; Wei H., and Alex Zunger; Frota-Pessoa S.; Ferreira, L. **44**, 512 (1991).
- [7] Frisch, M.; *Gaussian 98 User's Guide and Programmer's Reference*, Gaussian, Inc., (1998).
- [8] *Tutorial's Guide Cerius*, MSI, Inc., (1999).
- [9] Lu, P.; Dong, J.; and Toshima, N.; Langmuir. **15**, 7980 (1999).

23. Producción de entropía de un sistema de partículas esferocilíndricas en suspensión

J. Mulia, M. Mayorga y J. Orozco

Facultad de Ciencias, UAEMéx., Av. Instituto Literario 100, C.P. 50000, Toluca Edo. de México.

Resumen

En una suspensión de moléculas esferocilíndricas (los esferocilindros son cilindros de una longitud L unidos en sus extremos con una semiesfera de diámetro D) un tensor de orden Q aparece como una nueva variable termodinámica interna en el sistema, esta nueva variable representa el orden orientacional debido a los movimientos y desplazamientos de los esferocilindros al pasar de la fase isotrópica a la fase nemática y esméctica. El cálculo de la producción de entropía la determinamos como De Groot y Mazur [7], utilizamos las ecuaciones de balance y la diferencial total de la entropía mediante la relación de Gibbs con la única diferencia de que aumentamos un nuevo término debido al tensor de orden Q , esto en ausencia de algún campo externo. Cambios en Q permite ver cambios en la producción de entropía como función de la posición y del tiempo.

Introducción

Mucho se ha estudiado sobre sistemas de partículas elongadas, en el caso específico de partículas esferocilíndricas [1,2] se observan fases en el estado líquido cristalino, tratamientos estadísticos para determinar transiciones de fases y otras propiedades físicas de los cristales líquidos se pueden ver en la literatura de De Gennes [3,4]. La producción de entropía en estos sistemas se logra por medio de teorías estadísticas, como la teoría sobre funcionales en la densidad (DFT), las diferentes contribuciones para la energía libre del sistema en el cálculo de la entropía son debidas a la parte ideal, orientacional y a la del volumen excluido.

Para la determinación de la producción de entropía en un sistema de partículas esferocilíndricas en suspensión es importante tomar en cuenta las interacciones moleculares, alternativamente uno puede modelar estas interacciones al tomar en

cuenta la variación de la energía libre como función del tensor de orden \mathbf{Q} . En una suspensión de partículas esferocilíndricas un tensor de orden \mathbf{Q} aparece como una nueva variable termodinámica [3,4], este tensor de orden determina el orden orientacional de las moléculas y está en función de los vectores unitarios $\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j$ de los esferocilindros, i y j respectivamente, que están a lo largo del eje de simetría y de su centro de masa, particularmente en una fase isotrópica y en ausencia de algún campo externo \mathbf{Q} es cero, en las fases esméctica y nemática son diferentes de cero, y para la fase sólida \mathbf{Q} se aproxima a un tensor unitario.

Para estudiar teóricamente estos sistemas, en la relación de Gibbs para un sistema de partículas isotrópicas se considera una nueva variable termodinámica en función del tensor de orden, al tomar en cuenta esta relación permite que cambios en la entropía del sistema sean debidos a los cambios en el tensor de orden.

Relación de Gibbs para la producción de entropía.

La diferencial total de entropía se obtiene con base en la siguiente relación de Gibbs:

$$Tds_v = dU_v - mdr - m_s dr_s - \mathbf{w} : d\mathbf{Q}.$$

T es la temperatura del sistema, $s_v = \rho s$ es la densidad de entropía, $U_v = \rho U$ es la densidad de energía interna, ρ es la densidad de número de partículas del solvente, ρ_s es la densidad de número de partículas suspendidas, μ y μ_s es el potencial químico del solvente y de las partículas suspendidas respectivamente, \mathbf{W} es una variable

conjugada a \mathbf{Q} con la entropía $\mathbf{w} = -T \left(\frac{\partial s_v}{\partial \mathbf{Q}} \right)$, que alternativamente uno puede tomar

la relación para la energía libre [5], \bullet significa la doble contracción.

Los esferocilindros en suspensión poseen una posición y un orden orientacional, cuando el sistema pasa de la fase isotrópica a la fase nemática y de la fase nemática a la esméctica hasta la fase sólida y viceversa, la posición y el orden orientacional cambian debido al movimiento y al desplazamiento de las moléculas [4], el orden orientacional esta en función del tensor de orden \mathbf{Q} del sistema dado por la siguiente relación:

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i \neq j} \left(\frac{3}{2} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j - \frac{\mathbf{I}}{2} \right)$$

N es el número de esferocilindros, $\hat{\mathbf{e}}_i$ y $\hat{\mathbf{e}}_j$ son los vectores unitarios de orientación de los esferocilindros i y j respectivamente e \mathbf{I} es el tensor unitario. Cambios en el parámetro de orden \mathbf{Q} permiten ocasionar cambios en la entropía del sistema.

De Gennes [3,4] determina una expresión para la densidad de energía libre, esta expresión se obtiene de un desarrollo en serie de Taylor en \mathbf{Q} , la única limitante es que se deben determinar los valores de las constantes $A(T, \rho, \rho_s)$, $B(T, \rho, \rho_s)$ y de $C(T, \rho, \rho_s)$, sin embargo, para la densidad de energía libre y la entropía del sistema se puede proponer un potencial de interacción el cual puede estar en función de los vectores unitarios de orientación de dos esferocilindros $\hat{\mathbf{e}}_i$ y $\hat{\mathbf{e}}_j$ y del vector director que une los dos centros de masa $\hat{\mathbf{r}}$, tal y como lo propone Zewdie [6]. Para fines de este trabajo nos limitaremos solamente al cálculo de la producción de entropía en función del tensor de orden \mathbf{Q} a partir de la relación de Gibbs.

Producción de entropía

La producción de entropía de un sistema de partículas esferocilíndricas en suspensión se puede determinar utilizando las ecuaciones de balance, y tomando en consideración la expresión de Gibbs con la aparición del término termodinámico adicional debido al tensor de orden \mathbf{Q} , el procedimiento para el cálculo de la producción de entropía es el mismo que sigue Groot y Mazur de la relación de la producción de entropía por unidad de tiempo y de volumen [7], el origen de $\mathbf{s}(r, t)$ es:

$$\mathbf{r}(r, t) \frac{dS(r, t)}{dt} = \mathbf{s}(r, t) - \nabla \cdot \mathbf{J}_s(r, t)$$

Haciendo uso de la relación de equilibrio local de Gibbs propuesta, de la ecuación de continuidad de la masa: $\frac{d\mathbf{r}_i(r, t)}{dt} = -\mathbf{r}_i(r, t) \nabla \cdot \mathbf{v}(r, t)$, y de la expresión de balance de

energía interna: $\mathbf{r}_i(r, t) \frac{dU_v}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q(r, t) - P^v : \nabla \mathbf{v}(r, t)$, la variación de entropía por unidad de tiempo es:

$$\frac{dS(r, t)}{dt} = \frac{1}{T} \left[-\frac{\nabla \cdot \mathbf{J}_q(r, t)}{\mathbf{r}_i(r, t)} - \frac{P^v : \nabla \mathbf{v}(r, t)}{\mathbf{r}_i(r, t)} - \sum_{i=1}^2 \mathbf{m}_i \mathbf{r}_i(r, t) \nabla \cdot \mathbf{v}(r, t) - \frac{1}{T \mathbf{r}_i(r, t)} \mathbf{w} : \frac{d\mathbf{Q}}{dt} \right]$$

$J_s(r, t)$ es el flujo de calor $J_q(r, t)$ dividido por la temperatura absoluta del sistema $T(r, t)$. Al utilizar esta definición en la última expresión y multiplicando el resultado por $r_i(r, t)$ se obtiene la forma de $\mathbf{s}(r, t)$ y por ende la producción de entropía como función de la posición y del tiempo. Puesto que los flujos tienen orden tensorial diferente, se requiere una expresión en función del par de flujos_fuerzas, de tal

manera que se define el tensor de presiones viscoso $P^v = p^v I + \overset{0}{P}$ ($\overset{0}{P}$ es el tensor de presiones viscoso sin traza, presión con fricción) y el gradiente de velocidades

$\nabla v = \frac{1}{3} \nabla \cdot v + \overset{0}{\nabla v}$ ($\overset{0}{\nabla v}$ es el tensor gradiente de velocidades sin traza), al hacer uso de todo éstos encontramos que el valor de $\mathbf{s}(r, t)$ está dado de la siguiente forma:

$$\mathbf{s}(r, t) = \frac{J_q(r, t) \cdot \nabla T(r, t)}{T(r, t)^2} - \frac{\overset{0}{P} : \overset{0}{\nabla v}}{T(r, t)} - \left(\frac{P^v}{T(r, t)} - \sum_{i=1}^2 \frac{\mathbf{m}_i}{T(r, t)} \right) \nabla \cdot v - \frac{\mathbf{w}}{T(r, t)} : \frac{dQ}{dt}$$

Para el caso particular en que tenemos un sistema isotérmico y un flujo incompresible, $\nabla T = 0$ y $\nabla v = 0$, por lo tanto la producción de entropía como función de la posición y del tiempo es:

$$T(r, t) \mathbf{s}(r, t) = - \frac{\overset{0}{P} : \overset{0}{\nabla v} - \mathbf{w} : \frac{dQ}{dt}}$$

Conclusiones

Como los flujos dependen linealmente de las fuerzas en la relación de la producción de entropía, los coeficientes de transporte de los flujos_fuerzas se pueden definir fenomenológicamente. Se puede observar en esta misma relación que cuando la variable conjugada a \mathbf{Q} es cero, se tiene un fluido newtoniano, en donde el tensor de presiones viscoso se relaciona con el gradiente de velocidades por la ley de Newton de la velocidad y cuando \mathbf{Q} es diferente de cero se tiene un fluido no newtoniano, esta expresión ha sido estudiada por Rubi [5] para el caso particular de un fluido elongado estacionario y un fluido elongado oscilatorio.

Para determinar la producción de entropía de partículas esferocilíndricas en suspensión, se debe de determinar la densidad de energía libre del sistema. De Gennes [3,4] encuentra una expresión para la densidad de energía libre, la única limitante de

este enfoque es que se deben de determinar los valores de las constantes $A(T, \rho, \rho_s)$, $B(T, \rho, \rho_s)$ y de $C(T, \rho, \rho_s)$. Una manera interesante de comparar este resultado con otros es mediante la determinación de la densidad de energía libre tomando en cuenta las interacciones. Para esto se puede tomar un potencial de interacción en función de los vectores unitarios de orientación de los dos esferocilindros $\hat{\mathbf{e}}_i$ y $\hat{\mathbf{e}}_j$ y del vector director que une los dos centros de masa $\hat{\mathbf{f}}$, como lo propone Zewdie [6]. Este cálculo actualmente se encuentra en proceso.

Referencias

- [1] Simon C. McGrother, Williamson, J.Chem.Phys. 104(17), 1 may 1996
- [2] Daan Frenkel, J.Chem.Phys. 106(2), 8 january 1997.
- [3] De Gennes, P.G., The Physical of Liquid Crystals, Clarendon Press, Oxford, 1974.
- [4] De Gennes, P.G., The Physical of Liquid Crystals, Clarendon Press, Oxford, 1993.
- [5] Cond-Mat/0003308 V1 17 mar 2000.
- [6] Habtama Zewdie, J.Chem.Phys. 108(5), 1 february 1998.
- [7] De Groot and Mazur, Non-Equilibrium Thermodynamics, Dover Publications, 1983.

24. Respuesta óptica de magnetoexcitones en un pozo cuántico doble

B. Flores Desirena

Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Post. J-48, Puebla, Pue. 72570

Resumen

Se calcula la reflexión (R) magnetoexcitónica (ME) para un pozo cuántico doble (PCD) semiconductor. El problema se resuelve utilizando el formalismo de Stahl, el cual acopla la amplitud de onda coherente electrón-hueco y los campos electromagnéticos. Estudiamos el efecto del ancho de la barrera y el ancho de los pozos sobre la R ME.

MEs en PCDs han sido estudiados tanto teórica[1,2] como experimentalmente[3,4]. A diferencia de un pozo simple, el PCD presenta una mayor riqueza en sus espectros ópticos. Las propiedades ópticas se determinan a través de dos métodos, a saber, proponiendo una función de onda variacional para el hamiltoniano efectivo[1], o bien, desarrollando la función de onda electrón-hueco en términos de una base[2]. El segundo método requiere que la energía de interacción Coulombiana sea pequeña en comparación con la separación entre los niveles de Landau y con los niveles de confinamiento de la heteroestructura. Los niveles energéticos de los PCDs experimentalmente son estudiados a través de fotoluminiscencia(FL); en[3] por ejemplo, se muestra para un PCD de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ la evolución del espectro de FL-ME para campos magnéticos(B) $\approx 14\text{T}$. La influencia de un campo eléctrico estático perpendicular al PCD sobre la FL-ME se reporta en la 1ª referencia de[4] para $B = 16\text{T}$.

El PCD semiconductor estudiado consiste de: capa superficial (de longitud L_s) / PC1(L_{w1}) / barrera(L_b) / PC2(L_{w2}) / capa colchón(L_c), el cual ocupa la región $0 < z < L$ ($L = \sum L_i = s, w1, \dots, c$), el vacío ocupa las regiones $z < 0$ y $z > L$. La ecuación para la amplitud de onda coherente interbanda (en el formalismo de Stahl) está dada por:

$$[H - \hbar(\mathbf{w} + \mathbf{in})] \vec{Y}(\vec{r}, \vec{R}) = \mathbf{M}(\vec{r}) \vec{E}(\vec{R}), \quad (1)$$

donde $\vec{E}(\vec{R})$ es el campo electromagnético de frecuencia ω , $\mathbf{M}(\vec{r})$ es la matriz de transición dipolar interbanda, ν la frecuencia fenomenológica de amortiguamiento debida a la dispersión por fonones o a imperfecciones de la red, $\vec{r} = (\vec{r}_e - \vec{r}_h = (\vec{r}, z))$ y \vec{R} son el vector relativo y del centro de masa del ME respectivamente, el hamiltoniano H de dos bandas puede escribirse a su vez como:
 $H = E_g + H_{ez} + H_{hz} + H_{2D} + U$ siendo E_g el gap interbanda y,

$$H_{jz} = -\frac{\hbar^2}{2m_{jz}} \frac{\partial^2}{\partial z_j^2} + V_j(z_j), \quad j = e, h, \quad (2)$$

aquí m_{jz} , V_j son la masa efectiva y potencial de confinamiento en z para el electrón ($j = e$) y hueco ($j = h$) respectivamente. El hamiltoniano bidimensional H_{2D} del electrón y el hueco bajo la acción del campo magnético \vec{B} (de potencial vectorial $\vec{A} = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$ es

$$H_{2D} = \frac{1}{2m_{ez}} (-i\hbar \nabla_{\vec{r}_e} + e\vec{A}_e)^2 + \frac{1}{2m_{hxy}} (-i\hbar \nabla_{\vec{r}_h} + e\vec{A}_h)^2. \quad (3)$$

Aquí, se ha considerado la banda de conducción isotrópica y m_{hxy} es la masa del hueco paralela al plano del PCD. Finalmente, el potencial

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_s} \cdot \frac{1}{\sqrt{\mathbf{r}^2 + z^2}} \quad (4)$$

toma en cuenta la atracción Coulombiana ordinaria, donde ϵ_s es la constante dieléctrica de baja frecuencia.

La amplitud de onda coherente y el campo electromagnético $\vec{E}(\vec{R})$ también cumplen la ecuación de onda de Maxwell

$$[\nabla_{\vec{R}} \times \nabla_{\vec{R}} \times -\epsilon_{\infty} \frac{\mathbf{w}^2}{c^2}] \vec{E}(\vec{R}) = \frac{\mathbf{w}^2}{\epsilon_0 c^2} \vec{P}(\vec{R}) \quad (5)$$

y se relacionan a través de la polarización: $\vec{P}(\vec{R}) = 2 \int \mathbf{M}(\vec{r}) \vec{Y}(\vec{r}, \vec{R}) d^3r$; ϵ_{∞} es la constante dieléctrica de alta frecuencia y c es la velocidad de la luz en el vacío. Para resolver el sistema de ecuaciones (1)-(5) utilizé el modelo de capa[5] para la matriz de transición dipolar interbanda

$$\mathbf{M}(\vec{r}) = \frac{\mathbf{M}_0 \mathbf{d}(z) \mathbf{d}(\mathbf{r})}{2p\mathbf{r}} \quad (6)$$

Para la solución del problema, \vec{Y} y \vec{E} son expandidos en la base ortogonal formada por los productos de las eigenfunciones de los hamiltonianos (2) y (3). La interacción Coulombiana (U) aporta términos no diagonales al hamiltoniano H , lo cual hace necesario considerar un número “suficiente” de funciones base. Para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales se consideran las condiciones de frontera Maxwellianas para los campos electromagnéticos y la anulación de \vec{Y} en las fronteras $z=0$ y $z=L$ (condición de no escape), obteniéndose de esta solución la R ME.

En el cálculo de la R ME a incidencia normal y para propósitos de comparación he utilizado el PCD de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ($x=0.3$) con parámetros (1ª ref. de[2]): $L_s=L_c=50\text{nm}$, $L_{w1}=L_{w2}=10\text{nm}$; el gap de las bandas utilizado es $E_g=1.52+1.36x+0.22x^2$, con un 60% para la banda de conducción y 40% para la banda de valencia de la diferencia de gaps. Consideré también $m_{ez}=0.067m_0$ (m_0 es la masa libre del electrón), $m_{hz}=0.45m_0$, $m_{hxy}=0.1m_0$, y $\mathbf{e}_s = \mathbf{e}_y = 12.5$, $\mathbf{n} = 0.132\text{meV}$, y $B = 10\text{T}$ en dirección positiva del eje z . Se despreció la diferencia de masas y constantes dieléctricas entre barreras y pozos. Para este confinamiento en la dirección z existen cinco niveles para el electrón y diez niveles para el hueco. Por motivos de rapidez en el cálculo he utilizado en el desarrollo de \vec{Y} y \vec{E} únicamente tres niveles de Landau ($n = 3$) y tres niveles para el electrón ($le = 3e$) y el hueco ($jhh = 3hh$), lo cual involucra un error en la posición de las resonancias de menos de 5 meV.

En la Figura 1 se muestra la evolución de la R ME como función del ancho de la barrera. Las resonancias van desde aquellas de pozos cercanos en donde la separación entre niveles de Landau es apenas más pequeña que la separación entre niveles debido al confinamiento en z , hasta el caso donde las pozos son débilmente interactuantes; en el caso límite de L_b grande, los niveles $n, 1e-1hh$ y $n, 2e-2hh$ se unen. Se observa en la figura para $L_b @ 1\text{nm}$ y energía $@ 1.57\text{eV}$ que el nivel $0, 1e-3hh$ (prohibido) logra manifestarse, sin embargo, con un número mayor de términos en el desarrollo, ella desaparece. La última resonancia (localizada arriba de 1.64eV) corresponde al nivel $0, 3e-3hh$ y tiene un comportamiento diferente al resto de las parejas de resonancias. Un resultado para la absorción ME semejante al de la figura 1 es reportado en la 1ª ref. de[2]. La correlación con el ancho de los pozos L_w ($L_{w1}=L_{w2}$), manteniendo el grosor de la barrera fija, puede entenderse mejor si se sigue sólo una de las resonancias, por ejemplo, la del estado base; si $L_w=0$, la R muestra una resonancia del ME tridimensional correspondiente al volumen de $Al_xGa_{1-x}As$; para $L_w \neq 0$ el ME está localizado en el interior de los pozos y alcanza su valor máximo de energía cuando

tiene su carácter bidimensional máximo; en el último caso, para L_w “grande”, el ME nuevamente tiende a ser tridimensional, pero ahora en un volumen de *GaAs*.

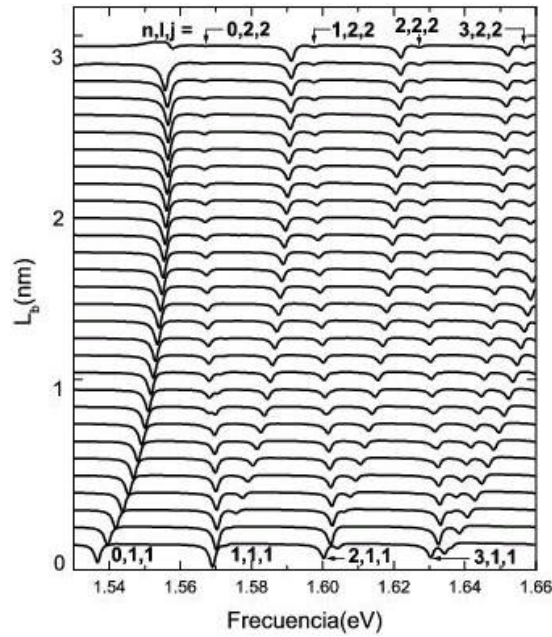


Figura 1. Evolución de la reflexión ME a incidencia normal para un PCD con parámetros: $L_s=L_c=50\text{nm}$, $L_{w1} = L_{w2} = 10\text{nm}$ y $B = 10\text{T}$. Cada curva corresponde a diferentes grosores de la barrera

En resumen, se ha calculado teóricamente la R ME (utilizando el formalismo de Stahl) para un PCD semiconductor. Específicamente, se ha estudiado la relación entre la R ME y el ancho de la barrera o el ancho de los pozos.

Agradecimientos. Trabajo apoyado parcialmente por CONACyT (proyecto 36047-E).

Referencias

- [1] J. Cen and K. K. Bajaj, Phys. Rev. B **46**, 15280 (1992).

- [2] Francisco Vera and Zdenka Barticevic *J. Appl. Phys.* **83**, 7720 (1998); A. B. Dzyubenko and A. L. Yablonskii, *Phys. Rev. B* **53**, 16355 (1996); Francisco Vera, arXiv:cond-mat/0007346 v1 21 Jul 2000.
- [3] L. V. Butov, A. Zrenner, G. Abstreiter, A. V. Petinova and K. Eberl, *Phys. Rev. B* **52**, 12153 (1995).
- [4] L. V. Butov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, Campman and A. C. Gossard. *Phys. Rev. B* **60**, 8753 (1999); A. B. Dzyubenko and A. L. Yablonskii, *JETP Lett.* **64**, 213 (1996).
- [5] A. Stahl and I. Balslev, *Electrodynamics of the Semiconductor Band Edge*, Springer-Verlag, Berlin, 1978.

25. Crecimiento por DBQ y caracterización de películas de CdSe con Cd/Se<1

M. E. Hernández-Torres, R. Silva-González y J. M. Gracia-Jiménez

Instituto de Física, BUAP, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue. C.P. 72570, México

Resumen

El selenuro de cadmio (CdSe), debido a su ancho de banda prohibida, es un semiconductor importante como material base en la fabricación de celdas solares. Se fabricaron películas delgadas de CdSe por el método de deposición en baño químico (DBQ). Las películas obtenidas son policristalinas, y se observa que el control en las condiciones experimentales permite el mejoramiento de la calidad morfológica, es decir, disminuye la cantidad y tamaño de defectos sobre la superficie. Además se observa reproducibilidad en la razón atómica (Cd/Se), la cual presenta exceso de selenio.

Introducción

El selenuro de cadmio (**CdSe**) por su energía prohibida¹ a temperatura ambiente ($E_g = 1.74$ eV), es interesante como material base en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos tales como celdas solares.^{2,3} Es conocido que las propiedades electrónicas y optoelectrónicas del **CdSe** dependen fuertemente de la razón atómica (Cd/Se).^{4,5} Así, el método de deposición en baño químico (**DBQ**) permite, de principio, obtener películas de **CdSe** con razones controladas. Sin embargo, esto no es obvio ya que se requiere un riguroso control de los parámetros de crecimiento tales como: temperatura de depósito, concentraciones de los compuestos, velocidad de agitación y pH. En este método de crecimiento la formación del **CdSe** se lleva a cabo por la descomposición de selenourea $CSe(NH_2)_2$ en una solución básica de las sales del catión correspondiente.⁶

El objetivo de este trabajo es el de obtener condiciones experimentales adecuadas para crecer películas de CdSe reproducibles (Cd/Se = constante).

Desarrollo experimental

En un reporte anterior⁷ se observó que la temperatura juega un papel primordial en el control de la razón Cd/Se, para controlar a ésta, se implementó un sistema basado en un baño “María”, el cual produjo buenos resultados. El baño funciona como un foco calorífico, manteniendo así estable la temperatura de crecimiento (figura 1). Se crecen una serie de películas de CdSe utilizando concentraciones molares constantes⁷ de cloruro de cadmio ($CdCl_2$), hidróxido de sodio ($NaOH$), nitrato de amonio (NH_4NO_3) y selenourea. Éstas se depositaron durante 90 minutos sobre porta-objetos de vidrio, las condiciones experimentales utilizadas se presentan en detalle en la tabla I.

Muestra	Volumen de $CdCl_2$ (ml)	Velocidad de agitación (v/seg)	Temperatura de depósito ($^{\circ}C$)	PH
ME962	6	1.00	45-61	7.7
CdSe-1	6	1.00	47-49	7.7
CdSe-2	6	1.00	45-49.5	7.7
CdSe-3	6	1.00	46-48	7.7
CdSe-4	6	1.00	45-50	7.7

Tabla 1. Condiciones experimentales para el crecimiento de películas de CdSe.

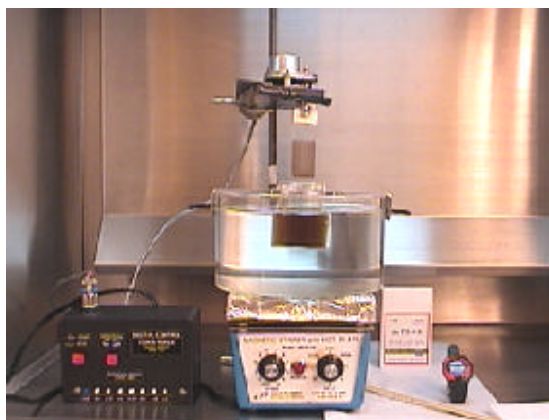


Figura 1. Dispositivo Experimental.

Resultados y discusión

Para la caracterización morfológica de las películas de **CdSe** se empleó un microscopio electrónico de barrido (SEM) marca JEOL modelo JSM-5400 LV. En la figura 2, se compara la microfotografía de la muestra ME962, crecida con rampa de temperatura de 16 °C durante su depósito con la muestra CdSe-1 crecida con sólo 2 °C de rampa (tabla I). En el fondo de ambas imágenes, se puede observar que las muestras son policristalinas y relativamente uniformes. En las dos películas se tienen defectos que forman parte de ellas o que están superpuestos, como grandes granos con forma de coliflor y aglomerados, respectivamente. Comparando el tamaño de defectos en las muestras ME962 y CdSe-1, se obtiene que ha disminuido de 3 a 1.5 μm y lo más importante, la densidad de defectos superficiales disminuye en la película con menor rampa de temperatura, esto indica que se ha mejorado la calidad morfológica de las películas, como resultado del control en la temperatura de depósito.

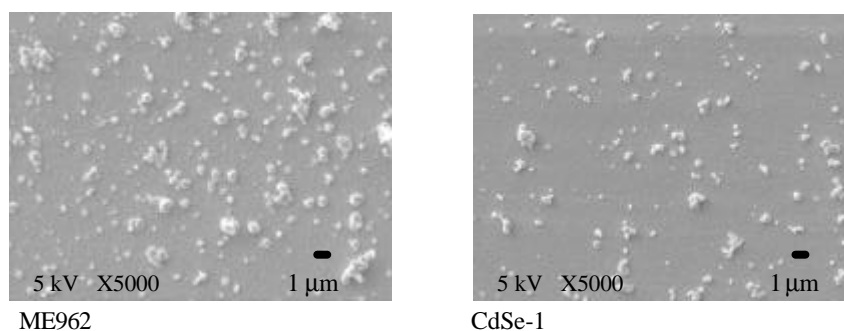


Figura 2. Microfotografías de películas de **CdSe** crecidas por **DBQ**.

El análisis químico cuantitativo por EDS se obtuvo con una microsonda acoplada al SEM. En la figura 3 nuevamente se hace una comparación de los espectros de emisión de rayos X de las muestras ME962 y CdSe-1. Se observa la presencia de las líneas de los elementos Cd, Se, Si, C, O y Na. La presencia de las líneas asociadas al Si, C, O y Na, tienen su origen en el sustrato (vidrio). Se observa también, que la intensidad relativa respecto a la del Si de las líneas de Se y Cd las cuales corresponden propiamente a la película, es mayor para la muestra ME962 comparada con la muestra CdSe-1, esto quiere decir que en el segundo espectro es mayor la cantidad de electrones que atraviesan la película para excitar al sustrato, es decir, el espesor de la película es menor cuando se tiene control sobre la temperatura de depósito, ya que la razón de crecimiento disminuyó de 2.26 a 1.82 nm/min, lo cual indica que la producción de ambos iones en solución es menor. Además, en este caso

como se verá a continuación, es menor la concentración de iones Cd^{++} . El espesor disminuye de 200 a 160 nm, respectivamente.

Con el análisis cuantitativo, se obtuvo la razón atómica (Cd/Se) de cada una de las películas (tabla II). Se observa que la razón para la serie de películas, prácticamente no varía cuando la rampa de temperatura es menor y las películas presentan un exceso de iones Se^- . Comparando éstas con la muestra ME962, la cual fue crecida con una mayor rampa, se observa que la rampa pequeña (muestra CdSe-1) regula la formación de iones cadmio produciendo baja concentración de éstos. Aun cuando se emplearon las mismas concentraciones de los reactivos para ambas se puede ver que al aumentar la temperatura durante el crecimiento de las películas⁸ se ve favorecida, no sólo la disociación del $\text{Cd}(\text{OH})_2$ y selenourea, sino también la del ion complejo tetraamín cadmio $\text{Cd}(\text{NH}_3)_2^{++}$, lo que incrementa en mayor concentración la producción de iones Cd^{++} y por lo tanto las películas presenten exceso de cadmio (tabla II), además de mayor espesor de película.

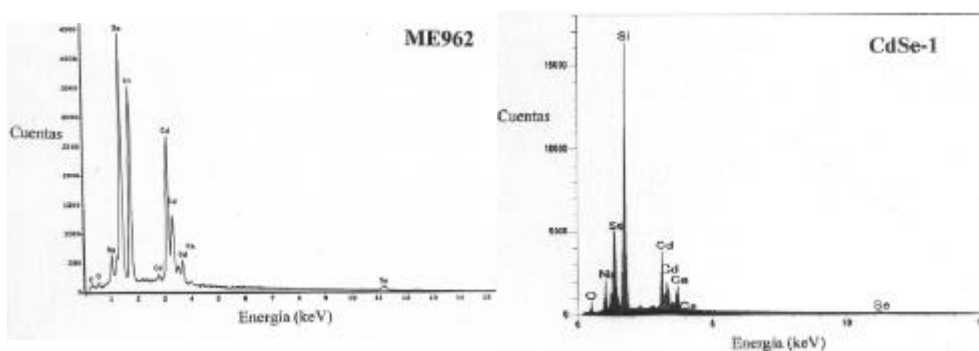


Figura 3. Espectros de emisión de rayos X de CdSe.

Muestra	Razón Cd/Se
ME962	1.10
CdSe-1	0.79
CdSe-2	0.77
CdSe-3	0.78
CdSe-4	0.79

Tabla 2. Resultados de razón atómica de CdSe por el mtodo DBQ

Conclusiones

El control de la temperatura de depósito mejora la calidad morfológica de las películas reduciendo la concentración de defectos, disminuye la velocidad de crecimiento, la producción de iones selenio se ve favorecida y permite resultados reproducibles de razón atómica.

Agradecimientos. Trabajo apoyado por CONACyT (Proyectos: 1600PE, 5269N, VIEP II-59G01).

Referencias

- [1] R. Rose, L. A. Shepard and J. Wulff, *Propiedades electrónicas IV*, 105 (1968)
- [2] K. Rajeshwar, L. Thompson, P. Sing, R. C. Kainthla and K. L. Chopra, *J. Electrochem. Soc.* **128**, 8 (1981) 1744-1750.
- [3] P. K. Nair, V. M. García, O. Gomez-Daza and M. T. S. Nair, *Semicond. Sci. Technol.* **16** (2001) 885-863.
- [4] R. P. Silberstein and Micha Tomkiewicz, *J. Appl Phys.* **54**, 9 (1983) 5428-5435.
- [5] Michael Cocivera, Andrzej Darkowski and Bruce Love, *J. Electrochem. Soc.* (1984) 2514-2516.
- [6] J. M. Gracia, G. Martínez, J. L. Martínez, E. Gómez and Zehe, *J. of Electrochem. Soc.* **131** (1984) 2974.
- [7] M. E. Hernández-Torres, Tesis de Licenciatura en Químico Industrial, FCQ-BUAP (1999).
- [8] M. E. Hernández-Torres, R. Silva-González, H. Navarro-Contreras, M. A. Vidal and J. M. Gracia-Jiménez, *Modern Physics Letters B*, **15** (2001) 741-744.

26. Estudios de la adsorción de Cl, Cl₂ y HCl sobre la superficie del Ge(001)

A. Sánchez-Castillo* y Gregorio H. Coccoletzi* y Noboru Takeuchi**

*IFUAP, Puebla, Pue., México

**CCMC-UNAM, Ensenada BC, México

Resumen

Investigamos la adsorción de Cl, Cl₂ y HCl sobre la superficie Ge(001)-c(2x4) mediante cálculos de primeros principios de la energía total. Estudiamos primero la adsorción del Cl atómico considerando dos geometrías diferentes. La configuración más estable se obtiene cuando el Cl ocupa la posición en la dirección del enlace suelto del Ge. La adsorción de Cl₂ como molécula no es energéticamente favorable. Sin embargo, al disociarse la molécula, los átomos de Cl pueden adsorberse sobre los átomos de Ge del mismo dímero. Resultados similares se obtuvieron para la adsorción de HCl sobre Ge. La molécula se disocia en H⁺ y Cl⁻ y se adsorbe sobre los átomos del dímero de Ge formando una estructura estable.

La adsorción de ciertas moléculas sobre superficies semiconductoras tiene una considerable importancia principalmente por la aplicación de estos materiales en dispositivos optoelectrónicos. Como las dimensiones de los dispositivos cada vez son más pequeñas, ha llegado a tener una gran importancia el control de la adsorción de una monocapa y submonocapas de las moléculas para el mejor entendimiento de la geometría atómica en equilibrio. Las interacciones de halógenos con la superficie Si(001) han sido extensamente estudiadas principalmente porque la limpieza con sustancias químicas es un proceso importante en la fabricación de dispositivo semiconductores. Se ha observado que el halógeno molecular se disocia y forma fuertes enlaces con los enlaces sueltos del silicio. Dicha adsorción química conserva la reconstrucción 2x1 asociada con la dimerización del silicio¹.

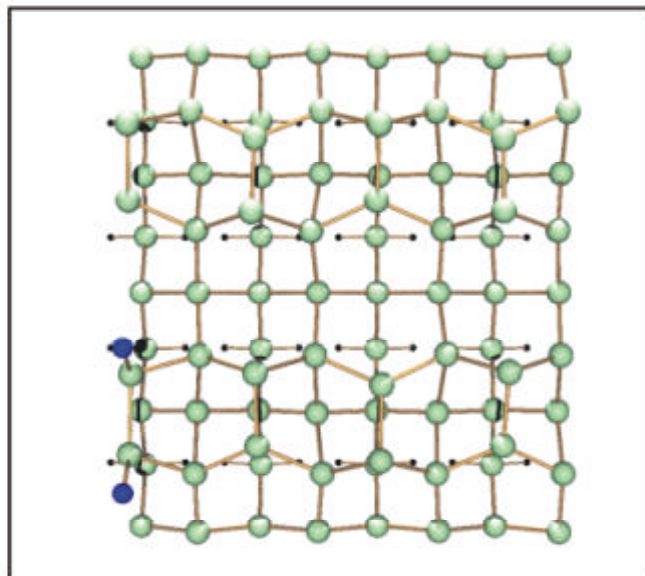
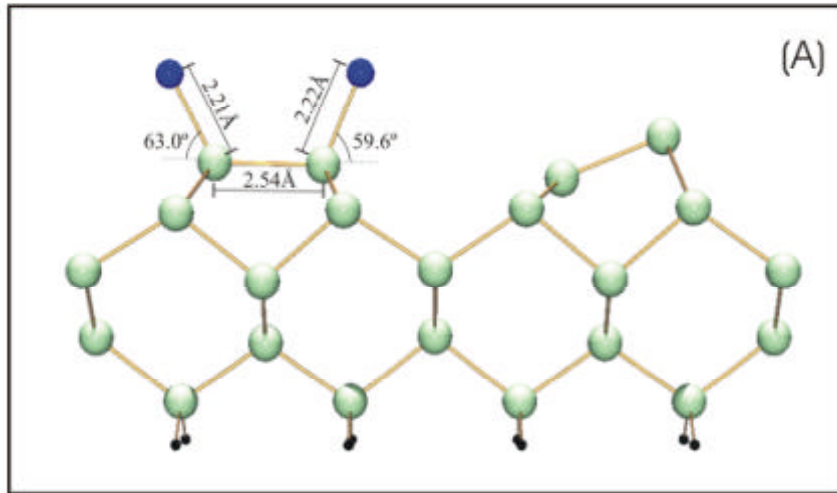
Los gases de H₂S adsorbidos sobre Si y Ge se han estudiado mediante espectroscopía electrónica Auger (AES) y espectroscopía fotónica (UPS). Se ha encontrado que a bajas temperaturas, la adsorción de H₂S sobre las superficies(110) de los compuestos III-IV se produce cuando la molécula se disocia en las subunidades SH y H. Se han hecho estudios de primeros principios para investigar la geometría atómica en

equilibrio, estados electrónicos y enlaces de la molécula de H_2S sobre las superficies de $\text{Ge}(001)$ y $\text{Si}(001)$ ². Se ha considerado tanto la adsorción de las subunidades $(\text{SH})^-$ y H^+ resultantes de la disociación parcial de la molécula sobre el dímero de $\text{Ge}(001)2\times 1$ y $\text{Si}(001)2\times 1$ como la adsorción de las subunidades S y 2H que resultan de la disociación completa de la molécula. Los resultados muestran que la estructura correspondiente a la molécula completamente disociada es energéticamente más favorable comparada con la geometría de la molécula parcialmente disociada.

Para investigar la adsorción de Cl, Cl_2 y HCl sobre $\text{Ge}(001)$ realizamos cálculos de energía total mediante el esquema de Car y Parrinello³ de primeros principios usando la aproximación de densidad local (LDA). En este esquema, para optimizar la estructura atómica de la superficie se combina la dinámica electrónica e iónica y se aplica el método del descenso más rápido. La superficie se describe empleando el método de la supercelda. Cada supercelda se forma de cinco capas atómicas, y cada capa contiene 16 átomos de Ge. En la capa superior de la estructura sin reconstruir, se colocan Cl, Cl_2 y HCl en diferentes configuraciones posibles. Para simular el volumen, los átomos de Ge de la capa inferior se saturan con átomos de H. La interacción electrón-ión se describe mediante pseudopotenciales no locales que conservan la norma y tratados de acuerdo al esquema de Kleinman-Bylander⁴. Las eigenfunciones se expanden en ondas planas con una energía corte de 10 Ry.

Hemos iniciado los estudios considerando la adsorción de Cl atómico en dos arreglos diferentes. En el primero caso, se colocaron dos cloros sobre dos Ge que ocupan las posiciones verticales más altas de dos dímeros no vecinos. La optimización estructural se obtiene cuando los átomos de Cl se unen con los átomos de Ge en la dirección de los enlaces sueltos. La segunda configuración se obtiene cuando se acomodan dos Cl sobre dos dímeros no vecinos. La estructura relajada es aquella con los dímeros de Ge rotos y unidos al Cl que ocupa la posición vertical más alta de un trímero. Se encontró que la configuración más estable corresponde al primer caso.

La adsorción de Cl_2 se investigó en dos geometrías posibles con la molécula disociada. En un caso se colocaron los átomos de Cl sobre los dos Ge de un dímero. La estructura relajada se obtiene cuando los átomos de Cl se unen a los Ge en la dirección de los enlaces sueltos. La segunda configuración se logró con los átomos de Cl sobre un átomo de Ge de un dímero. En este caso el dímero se rompe, los Cl se unen al Ge en la dirección de los enlaces sueltos y se encuentran muy cerca de la mitad de la separación de los Ge de la segunda capa. El otro átomo de Ge queda enlazado solo a dos Ge. La adsorción de los átomos de Cl sobre los dos átomos del dímero produce la estructura atómica más estable. Resultados similares se han reportado para la adsorción de Cl_2 sobre $\text{Si}(001)$ ⁵.



Por último consideramos la adsorción de HCl, en un caso como molécula y en otro cuando ésta tiene los enlaces rotos. La molécula de HCl no se adsorbe químicamente, es decir, no forma enlaces con Ge (fisiadsorción). Sin embargo es posible la formación de un estado metaestable. La molécula se orienta en la dirección de los dímeros sobre la superficie. HCl con los enlaces rotos se puede adsorber en diferentes estructuras. Una posibilidad de adsorción es aquella en la que los átomos de H y Cl se unen a los dos Ge de un dímero en la dirección de los enlaces sueltos. Por otro lado, H y Cl se pueden adsorber en dos Ge que ocupan las posiciones verticales más altas de dos dímeros adyacentes. Una tercera configuración posible es aquella en la que el H se coloca sobre un Ge de un dímero mientras que el Cl sobre un dímero adyacente al primero produciendo rompimiento del dímero. Hemos encontrado que la configuración más estable en la adsorción de HCl sobre Ge(001) es para cuando HCl se une a dos Ge de un dímero en la dirección de los enlaces sueltos. Los demás procesos de adsorción producen estados metaestables.

Para concluir, en este trabajo hemos investigado la adsorción de Cl, Cl₂ y HCl sobre la superficie Ge(001)-c(2x4) mediante cálculos de primeros principios de la energía total. De las diferentes posibilidades consideradas, hemos encontrado que la estructura atómica más estable es para la adsorción de Cl₂ con los átomos unidos a los Ge de un dímero en la dirección de los enlaces sueltos.

Agradecimientos. Agradecemos el soporte de DGAPA proyecto No. IN111600, CONACYT proyecto 33587-E, y la VIEP-UAP proyecto No. II10G01.

Referencias

- [1] P. Koji Nakayama, C. M. Aldao, J. H. Weaver, Phys. Rev. B 59, 15983 (1999).
- [2] M. Çakmak and G.P. Srivastava, Phys. Rev. B 60, 5497 (1999).
- [3] R. car and m. Parinello, Phys. Rev Lett. 55, 2471 (1985).
- [4] L. Kleinman and D. M. Bylander, Phys. Rev. Lett. 48, 1425 (1982).
- [5] G. A. de Wijs, A. De Vita and A. Selloni, Phys. Rev. Lett. 78, 4877 (1997).

27. Concentración de radón-222 en Zacatecas: monitoreo con detectores de estado sólido

M.L. García¹, L.L. Quirino¹, A. Chavez² y F. Mireles¹

¹CREN, UAZ, Cipres 10, 98000 Zacatecas, Zac. México

²ININ, Ap. Post. 18-1027, 11801 México, D.F.; México

Resumen

Como parte de la evaluación del riesgo a la salud debido a la inhalación de radón y sus productos de decaimiento, las concentraciones de radón son medidas en interiores y exteriores en casas habitadas en el estado de Zacatecas. Estas mediciones se realizan en las cabeceras municipales en colaboración con el IMSS y la SSZ, utilizando el método pasivo de trazas nucleares en sólidos. El detector utilizado es la película LR 115 tipo 2, colocado en un contenedor abierto. En la lectura del detector se emplea un procedimiento de ataque químico y un sistema de conteo semiautomático por chispeo eléctrico. En este trabajo se describe el diseño del monitoreo que se ha realizado desde Julio de 2001, así como la operación y calibración del equipo necesarios para estimar la dosimetría debida al radón. Se consideran algunos parámetros geológicos de Zacatecas, para la ubicación de las regiones con diferentes características donde se realizan las mediciones

Introducción

La radiación natural proveniente del radón (^{222}Rn) y sus productos de decaimiento representan la fuente principal de exposición a la radiación ionizante para la población en general (Merrill and Akbar-Khanzadeh, 1998; Franco-Marina et al 2001). Si el radón presente en el aire es inhalado, puede causar un riesgo significativo a la salud, debido a que la vida media de sus descendientes es relativamente corta y a la alta transferencia de energía lineal de las partículas alfa (Ahamad et al 1998). El radón tiende a acumularse en lugares cerrados y cuando las concentraciones alcanzan niveles altos, la probabilidad de ocurrencia del principal riesgo, cancer pulmonar, se incrementa significativamente (Singh et al 1999). Por esta razón, se han realizado programas de monitoreo ambiental de radón debido a la necesidad de confirmar la relación entre la exposición a radón y el cancer pulmonar (Andersen et al 2001).

Como resultado de esto, en varios países se han realizado mediciones y establecido la distribución nacional completa de radón en áreas cerradas, considerando que su conocimiento es una parte importante para evaluar el daño a la salud asociado con el ^{222}Rn (Espinoza et al 1999).

Con el fin de la evaluar el riesgo a la salud por el radón y sus productos de decaimiento en Zacatecas, se tiene programado estimar una distribución de los niveles de radón presentes en el ambiente en diferentes zonas. El objetivo de este trabajo es presentar la metodología de monitoreo de radón en el estado de Zacatecas.

El radón y su origen

El radón es un gas radioactivo emisor de partículas alfa que se encuentra presente en la atmósfera. La dosimetría de ^{222}Rn es importante debido a su vida media relativamente larga (3.8 días), este tiempo es suficiente para que atraviese distancias relativamente largas en los diferentes medios donde se encuentre antes de decaer (Ahamad et al 1998) a sus productos de decaimiento que son dos isótopos del polonio (^{214}Po y ^{218}Po). El ^{222}Rn proviene del decaimiento del radio (^{226}Ra), el cual es producto de decaimiento del uranio (^{238}U) (Jamil et al 1997); estos elementos están presentes en todos los suelos, agua y rocas (Jamil et al 1997; Ayote et al 1998), aunque sus concentraciones varían con sitios específicos y materiales geológicos (Singh et al 1999).

Las principales fuentes de radón en interiores son los materiales de construcción, contenido de materiales procesados (como cementos, cerámicas, tabiques, etc.), fuentes de agua, ductos de energía, y el suelo que se encuentra bajo la construcción de una casa (Segovia et al 1994). La razón de producción de radón en las construcciones depende del contenido de radio en el subsuelo, los materiales usados en la construcción, y la porosidad y densidad del material de las paredes. Los otros factores que afectan la concentración de radón dentro de las casas son las condiciones meteorológicas (Rowe et al 2002) y la estructura de la construcción (Miles, 1998). Por eso, el diseño de una casa, el sistema de ventilación, el sistema de calefacción, las condiciones sanitarias, etc., juegan un rol importante en la acumulación de radón dentro de todo tipo de construcción (Ahamad et al 1998).

La técnica SSNTD

La mejor manera de conocer los niveles de radón es haciendo mediciones directamente de su concentración y existen muchas técnicas para conocer los niveles presentes (Jamil et al 1997). El uso de películas plásticas para estudios de concentraciones de radón en interiores ha sido bien establecido, desarrollando muchos tipos de dosímetros desde que el método fue considerado adecuado para tal fin (George 1996; Jonson, 1999; Amgarou et al 2001). Esta técnica, conocida por SSNTD (Solid State Nuclear Track Detectors) como método pasivo, da la posibilidad de realizar una gran cantidad de mediciones de manera simultánea (Nikolaev and Ilic, 1999) debido a su reproducibilidad, bajo costo y fácil operación (Jamil et al 1997).

La principal característica de estos detectores plásticos es que cada partícula alfa que incide produce un daño a nivel microscópico el cual puede ser ampliado mediante un ataque químico. A este daño producido se le conoce como traza nuclear y refleja la carga, masa y energía relativa de la partícula que la produjo. Después del ataque químico las trazas grabadas en el material pueden ser observadas en un microscopio óptico o en sistemas de conteo por medio de chispeo eléctrico (Husaini et al 2002; Khan et al 2002). Para mediciones de radón se puede usar cualquier detector sensible a partículas alfa, los detectores más usados son nitrato de celulosa (LR-115 y DNC) y policarbonato (Makrofol E y CR-39) (Nikolaev and Ilic, 1999).

Existe una gran variedad de dosímetros basados en el uso de SSNTD. El dosímetro más usado en mediciones de radón consiste en una cámara cerrada con un filtro permeable para radón pero no para la humedad (Nikolaev and Ilic, 1999; Franco-Marina et al 2001). Para el uso de dosímetros pasivos es necesario determinar los factores de intercalibración en mediciones de concentración de radón (Gericke et al 1999) y en eficiencia relativa de detección (Jamil et al 1997; Marocco and Bochicchio, 2001).

Geología de Zacatecas

Las localidades propuestas para muestreo de radón en el estado de Zacatecas son: Zacatecas, Ojocaliente, Fresnillo, Río Grande, Jalpa, Tlaltenengo y Concepción del Oro. El suelo de estas localidades está compuesta principalmente por riolitas, de las que Concepción del Oro, Río Grande, Fresnillo, Zacatecas, Ojocaliente corresponden a zonas mineralizadas.

Metodología del monitoreo

Para el monitoreo de radón en interiores de casas habitadas se utilizan detectores pasivos de trazas nucleares. Para este fin se cuenta con la colaboración de la Secretaría de Salud de Zacatecas (SSZ) y de el Instituto Mexicano del Seguro Social (IMSS). Con este muestreo se pretende cubrir especialmente las 7 cabeceras municipales del estado con mayor actividad minera y lugares donde se presentan minerales afines al uranio.

Monitoreo por parte de SSZ

Por parte de la SSZ se han elegido 56 poblaciones distribuidas en las 7 cabeceras municipales mencionadas anteriormente. Para cada población se eligieron 4 casas en las que se coloca un detector en el interior y otro en el exterior durante 3 meses.

Monitoreo por parte del IMSS

Por parte del IMSS se han elegido 144 poblaciones distribuidas en las cabeceras mencionadas. En cada población se coloca sólo un detector durante tres meses.

En ambos programas, organizados de manera independiente, se capacita a las personas involucradas en el muestreo. La capacitación consiste en informar a cerca del radón, su riesgo por inhalación, prevención y el uso de detectores de radón.

Para los dueños de las casas, se les otorgan folletos que contienen información del radón y del detector que tendrán durante tres meses. Cuando se coloca el detector se debe llenar una encuesta a cerca de las características de construcción de la casa y colocación de los detectores.

Materiales y tratamiento de detectores

La concentración de radón es monitoreada utilizando detectores de estado sólido, película LR-115 tipo 2, cortado en piezas de 6 cm² y colocados en recipientes con capacidad de 355ml (Segovia et al 1994). El recipiente fue cubierto con un filtro que permite el paso del radón y no de sus descendientes ni de la humedad (Franco-Marina et al 2001)

Para el grabado de las trazas se usa una solución en la que el material de la película es desgastada superficialmente. La solución de grabado es preparada con NaOH a 2.5 normal. Para el conteo de las trazas grabadas se utiliza un sistema de conteo semiautomático basado en chispeo eléctrico.

Calibración

La calibración del sistema utilizado en la estimación de la dosimetría es una parte fundamental. La calibración se lleva a cabo para el espesor y la actividad.

Calibración en espesor

Las trazas no se forman a una misma profundidad, por esta razón es necesario conocer cual es el espesor ideal al que se va a hacer el gravado y al cual tendremos la mejor eficiencia de detección. Cuando se conoce el espesor ideal se puede conocer el tiempo y temperatura de revelado al cual se hará el gravado de las trazas.

Calibración en actividad

Consiste en obtener la relación que existe entre el número de trazas por área contra la actividad a la cual se irradió, con este paso se obtiene una referencia de actividad en el material detector usado. La segunda parte consiste en encontrar la proporción entre la actividad dentro del recipiente y fuera del él.

Tratamiento de los datos

El primer paso en el tratamiento de los datos es encontrar la dosimetría adecuada para el sistema de detección usado, esto es, a qué actividad corresponde el número de trazas encontradas por unidad de volumen. A los datos obtenidos se les dará un tratamiento estadístico con el fin de realizar una distribución de frecuencias de actividad. Finalmente hacer un mapa que ilustre los niveles encontrados en cada cabecera municipal, lugares donde se realizó el monitoreo y una correlación entre los niveles de radón y los materiales de construcción de cada casa monitoreada, así como también su posible impacto en la salud.

Resultados

En las Figuras 1,2 y 3 se muestran los materiales más usados en la construcción de las casas que fueron monitoreadas en la primera siembra por parte de SSZ.

Puede notarse que los materiales de construcción más usados en las construcciones son el cemento y el ladrillo, por lo tanto se espera hacer una correlación importante con los niveles de radón.

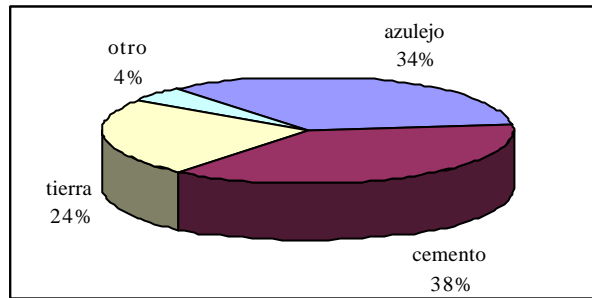


Figura 1. Materiales de construcción usados en el piso

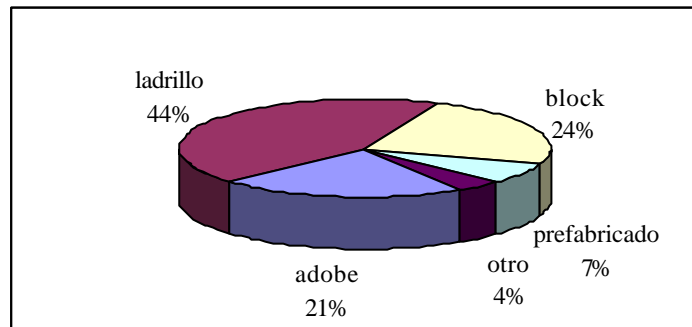


Figura 2. Materiales de construcción usados en las paredes

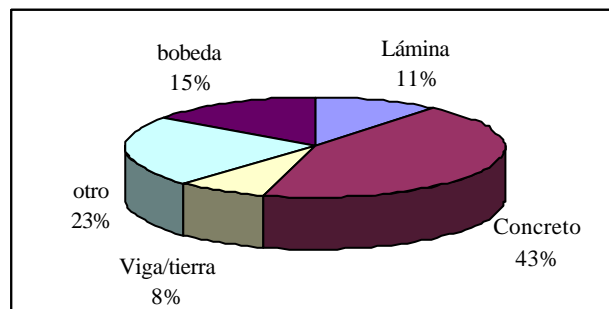


Figura 3. Materiales de construcción usados en el techo

En la Figura 4 se muestra la curva de espesor contra número de trazas presentes en el material, esta curva es necesaria para la calibración en espesor de los detectores de estado sólido.

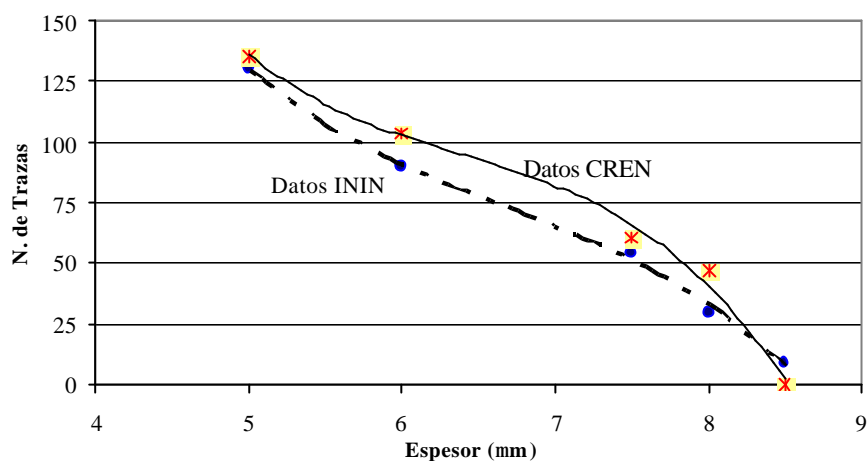


Figura 4. Curva espesor contra número de trazas

Conclusiones

El conocimiento de los materiales de construcción es importante en la correlación de los niveles de radón, para la evaluación del riesgo por la inhalación de radón.

Por otra parte, los resultados en la curva de espesor contra número de trazas son solo parciales, ya que los valores obtenidos fueron de un número pequeño de muestras.

Agradecimientos. A Conacyt Sivilla por el apoyo financiero parcial, mediante contrato número 20000402005-1, a la Dirección de Regulación Sanitaria de la SSZ y a IMSS-Solidaridad Zacatecas por el apoyo brindado.

Referencias

Ahamad, N.; Matiullah and Kathibeh. A. J. A. H. (1998). Comparative studies of indoor radon concentration levels in Jordan using CR-39 based bag and cup dosimeters. Health Phys. 75, 60-62.

- Franco-Marina, F., Segovia, N., Ruiz, W., Godinez, L., Tavera, L., Lopez, A., Chavez, A., Peña, P. and Ponciano, G. (2001). Short and long term indoor radon survey in México City. *Radiat. Meas.* 34, 545-548.
- Amgarou, K.; Font, Ll.; Albarracín, D.; Domingo, C.; Fernández, F. and Baixeras, C. (2001). Semia-automatic evaluation system for nuclear track detectors applied to radon measurements. *Rad. Meas.* 33,203-209.
- Andersen, C. E.; Ulbak, K.; Damkjær, Kirkegaard, P. and Gravesen, P. (2001). Mapping indoor radon-222 in Denmark: desing and test of the statistical model used in the second nationwide survey. 272, 231-241.
- Ayotte, P.; Lévesque, B.; Gauvin, D.; Mc Gregor, R.G.; Martel, R.; Gingras, S.; Walker, W. B.; Létourneau, E. G. (1998). Indoor exposure to ^{222}Rn : a public health perspective. *Health Phys.* 75:297-302.
- Espinosa, G.; Golzarri, J. I.; Rickards, J.; and Gammage, R.B. (1999). Distribution of indoor radon leves in Mexico. *Rad. Meas.* 31: 355-358.
- Franco-Marina, F., Segovia, N., Ruiz, W., Godinez, L., Tavera, L., Lopez, A., Chavez, A., Peña, P. and Ponciano, G. (2001). Short and long term indoor radon survey in México City. *Radiat. Meas.* 34, 545-548.
- Gericke, C., Ghose, R., Jonson, G., Freyer, K., Treutker, H.-C. And Enge, W. (1999). The calibration of the solid state nuclear track detector LR 115 for radon measurements. *Radiat. Meas.* 31, 363-366.
- Husaini, S.N.; Khan, E.U.; Khattak, N.U.; Qureshi, A.A.; Malik, F.; Qureshi, I.E.; Karim, T. and Khan, H.M. 2002. The study of crystalline etch products of CR-39. *Rad. Meas.* 35,3-5.
- Jamil, K.; Al-Ahmady, K.K.; Ali, Safdar.; Qureshi, A.A.; Khan, H.A. (1997). Relative performance of different types of passive dosimeters employing solid state nuclear track detectors. *Health Phys.* 73,629-632.
- Jönsson, G. (1999). Experience from using plastic film in radon measurement. *Radiat. Meas.* 31, 265-270.
- Khan, E.U.; Husaini, S.N.; Malik, F.; Sajid, M.; Karim, S. and Qureshi, I.E. 2002. A quick method for maintaining the molarity of NaOH solution during continuous etching of CR-39. *Rad. Meas.* 35,41-45.
- Merrill E. A.; and Akbar-Khanzadeh, F. (1998). Diurnal and seasonal variations of radon levels, effects of climatic conditions, and radon exposure assesment in a former uranium metal production facility. *Health Phys.* 74: 568-573.
- Miles, J. (1998). Mapping radon-prone areas by longnormal modeling of house radon data. *Health Phys.* 74,370-378.
- Rowe, J.E.; Kelly, M. and Price, L.E. (2002). Weather system scale variation in indoor radon-222 concentration of indoor air. *Sci. Total Environ.* 284,157-166.
- Segovia, N.; Tamez, E.; Peña, P.; Gaso, I.; Mireles, F.; Davila, I. and Quirino, L. (1994). Atmospheric radon: origin and transfer. *Radiat. Protec. Dosim.* 56, 157-160.
- Singh, A. K.; Sengupta, D. and Prasad, R. (1999). Radon exhalation rate and uranium estimating in rock samples from Bihar uranium tecnique and copper mines using the SSNTD technique. 51, 107-113.

28. Contraparte clásica de la matriz de probabilidades de dispersión y *funciones de onda* clásicas para billares bidimensionales caóticos abiertos

J. A. Méndez-Bermúdez y G. A. Luna-Acosta

Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla, 72570, Puebla, México

Resumen

Se realiza un estudio clásico y cuántico de las propiedades de dispersión en el régimen balístico de partículas en billares bidimensionales caóticos abiertos. Se construye la contraparte clásica de la matriz de probabilidades de dispersión (MPD) $|S_{m,n}|^2$ para una guía de ondas de forma arbitraria y se analiza al caso de una guía con caos Hamiltoniano genérico. Además se explica la construcción de funciones de onda clásicas utilizando un método de conteo de trayectorias. La buena correspondencia clásico-cuántica entre funciones de onda permite predecir la forma (en espacio configuracional) de las funciones de onda cuánticas con un costo computacional mínimo. Se discuten los alcances de la construcción de MPD y funciones de onda clásicas en función de la topología de la guía de onda en consideración.

El sistema

Consideramos una guía de ondas bidimensional que consiste en una cavidad unida a dos terminales semi-infinitas. Para la cavidad escogemos la geometría del canal ondulado [1] que sirve como modelo de microcavidades, guías de ondas cuánticas y electromagnéticas y de cristal periódico (en su versión infinita). La cavidad tiene dos paredes, una plana (en $y=0$) y la otra modulada por una función coseno: $y(x) = d + a [1 - \cos(2\pi x/L)]$; d es el ancho de la cavidad, a es la amplitud de deformación y L es la longitud de la cavidad. Ver Figura 1.

Al variar los valores de los parámetros de la cavidad, la dinámica de una partícula en su interior pasa de integrable a mixta y finalmente a globalmente caótica. En particular para los valores $(d,a,L)=(1.0,0.305,5.55)$ la dinámica clásica dentro de la

cavidad es mixta, como se muestra en el mapa de Poincaré [1] de la Figura 2, donde se grafica el ángulo θ que un rayo hace con la normal a la superficie al incidir sobre la frontera inferior de la cavidad, como función de x . La existencia de islas de estabilidad rodeadas de un mar caótico (caos mixto) son características de sistemas Hamiltonianos genéricos.

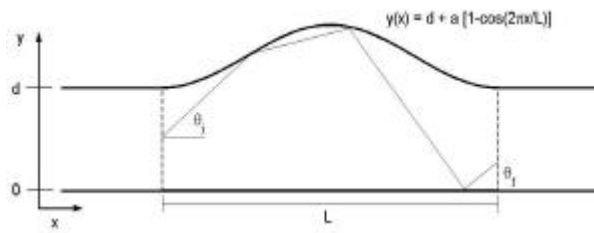


Figura 1. Geometría de la región de interacción de la guía de ondas

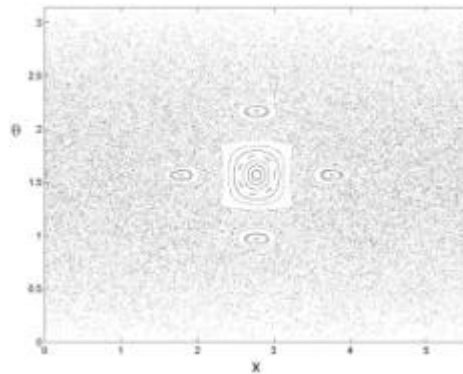


Figura 2. Mapa de Poincaré para $d=1.0$, $a=0.305$, y $L=5.55$ en $y=0$

Descripción cuántica

Para una guía de ondas bidimensional compuesta por una cavidad de forma arbitraria conectada a dos terminales, izquierda (L) y derecha (R), las soluciones en las terminales son

$$\Psi^{L,R}(x, y) = \sum_{m=1}^M [a_m^{L,R} \exp(ik_m^{L,R} x) + b_m^{L,R} \exp(-ik_m^{L,R} x)] \cdot j_m(y)$$

donde $f_m(y) = (2/d)^{1/2} \sin(m\pi y/d)$.

El problema de dispersión cuántica se describe mediante la matriz S . Ésta relaciona ondas que entran y ondas que salen de la cavidad, $V^{out}=SV^{in}$:

$$S = \begin{pmatrix} t & r' \\ r & t' \end{pmatrix}, \quad V^{in} = \begin{pmatrix} a^L \\ b^R \end{pmatrix}, \quad V^{out} = \begin{pmatrix} a^R \\ b^L \end{pmatrix};$$

t , t' , r , y r' son las matrices de transmisión y reflexión de tamaño $M \times M$ [2,3]. Así, los elementos de la matriz de probabilidades de dispersión (MPD) están dados por $|S_{m,n}|^2$ [3]. Utilizando los elementos de la matriz de transmisión t , podemos calcular la conductancia de Landauer, definida como $G=(2e/h^2)S_n S_m |t_{m,n}|^2$.

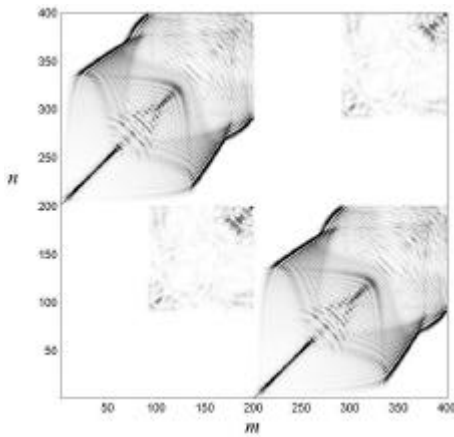


Figura 3. Matriz de probabilidades de dispersión (MPD) cuántica. $M = 200$

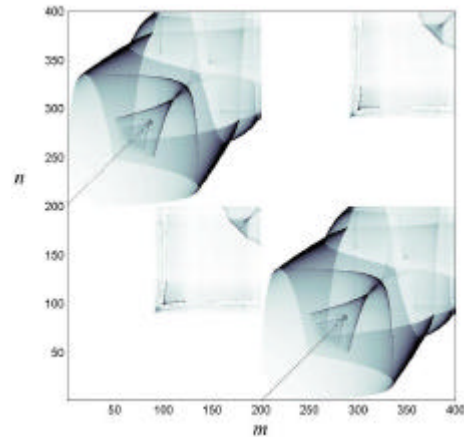


Figura 4. Matriz de probabilidades de dispersión (MPD) clásica. $M = 200$

Descripción clásica

Como la energía del sistema está dada por su expresión en las terminales $E=(h/2m_e)(k_m^2+m^2p^2/d^2)$, clásicamente podemos asociar un ángulo θ_m entre la componente longitudinal del momento k_m y el momento total $(2m_e E)^{1/2}/h$:

$$\theta_m = \sin^{-1} \left[\frac{mp\hbar}{d\sqrt{2m_e E}} \right].$$

Para un número finito de modos M , a cada modo m le corresponde un rango de ángulos $\theta_m = \theta_{m-1} - \theta_m$. La MPD clásica se construye de la siguiente manera:

Introducimos un ensamble de partículas a la cavidad con diferentes posiciones iniciales. Cada partícula entra a la cavidad proveniente de la terminal izquierda con un ángulo θ_i (ver Figura 1) correspondiente a un cierto modo m (θ_m). Las partículas en general chocarán varias veces con las paredes de la cavidad antes de salir de ella por la terminal izquierda (reflexión) o por la derecha (transmisión) haciendo un ángulo θ_f . Como cada θ_f se puede asignar a un modo n (θ_n), podemos construir una distribución de modos finales n para cada modo inicial m . Dichas distribuciones nos proporcionan la contraparte clásica de los elementos $|t_{mn}|^2$ y $|r_{mn}|^2$. De igual manera $|t'_{mn}|^2$ y $|r'_{mn}|^2$ se obtienen introduciendo partículas desde la terminal derecha de la guía de ondas [3].

En las Figuras 3 y 4 presentamos la MPD ($|S_{mn}|^2$) cuántica y clásica respectivamente; la notable correspondencia entre ambas matrices nos ha ayudado a encontrar el origen dinámico (clásico) de estructuras que aparecen en la descripción cuántica del sistema [3].

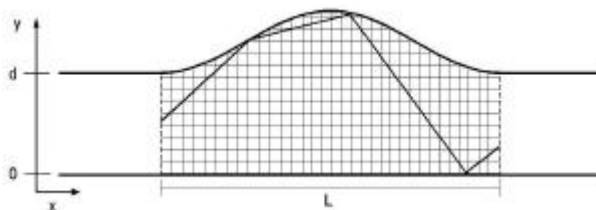


Figura 5. Obtención de las funciones de onda clásicas

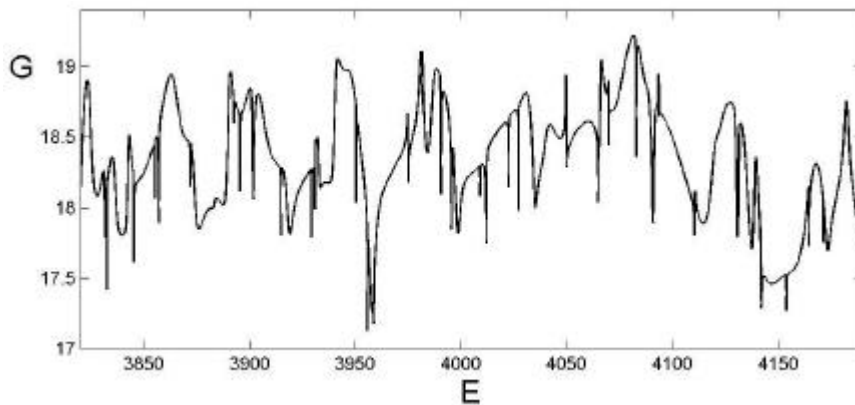


Figura 6. Conductancia de Landauer G como función de la energía para una guía de ondas con 20 modos abiertos.

Funciones de onda clásicas.

Para la construcción de las funciones de onda clásicas se sigue un procedimiento similar al utilizado en la construcción de MPD clásicas: se introducen varios ensambles de partículas a la guía de ondas, cada uno con ángulos iniciales θ_i que corresponden a cierto modo m y se cuenta el número de veces que las trayectorias visitan cada elemento de una malla que cubre a la cavidad, ver Figura 5. Al final del conteo cada elemento de la malla tendrá un peso proporcional al número de trayectorias que pasaron a través de él. Finalmente, comparamos un gráfico de la distribución de pesos de los elementos de la malla con la correspondiente función de onda para el modo m . En la Figura 7 se muestran tres funciones de onda junto con las construcciones clásicas correspondientes. La notoria correspondencia clásico-cuántica permite utilizar a la función de onda clásica tanto como herramienta de análisis dinámico, como herramienta de predicción de su contraparte cuántica [4].

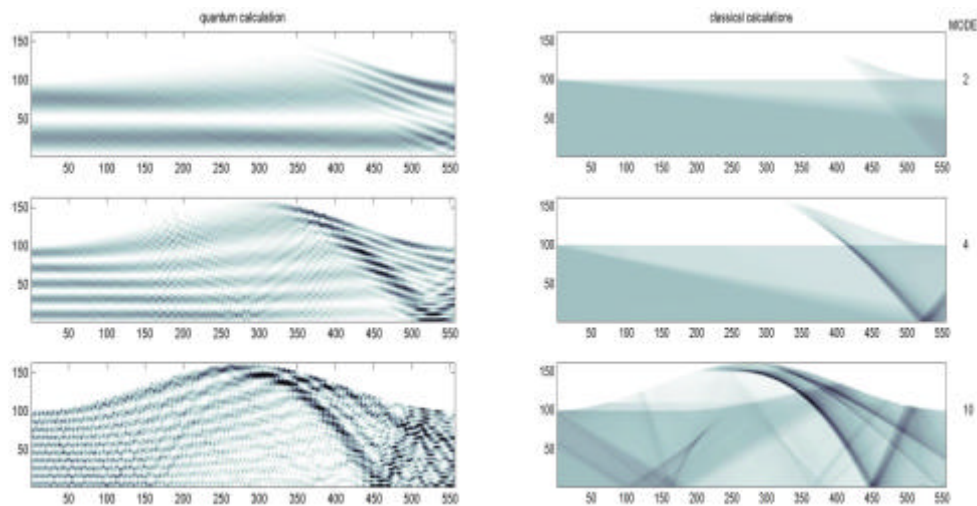


Figura 7. Funciones de onda cuánticas (columna izquierda) y clásicas (columna derecha) para los modos 2, 4, y 10 para una guía de ondas con $M=20$.

Conductancia

En un gráfico de la conductancia de Landauer G como el de la Figura 6, vemos cómo para ciertos valores de energía aparecen mínimos y picos muy angostos. Hemos

descubierto que esto se debe que la función de onda tunela a zonas de espacio fase clásicamente inaccesibles (presentes en sistemas con espacio fase mixto). Ya que el tunelamiento es un efecto puramente cuántico, hemos visto que para dichas energías no se obtiene buena correspondencia clásico-cuántica entre MPDs [3] y funciones de onda [4]. Sin embargo tomando ventaja de este efecto hemos propuesto la construcción de resonadores semiconductores para microlaseres altamente direccionados [5].

Conclusiones

Hemos introducido las contrapartes clásicas de la matriz de probabilidades de dispersión y las funciones de onda. Estas cantidades sirven como herramientas de predicción y análisis dinámico de sus análogos cuánticos. Se observa buena correspondencia clásico-cuántica siempre que nos situemos en energías (cuánticas) fuera de mínimos de conductancia.

La importancia de estas cantidades radica en que nos permite entender ciertos patrones cuánticos en términos puramente clásicos. Además su costo computacional es mínimo.

Referencias

- [1] G. A. Luna-Acosta, K. Na, L. E. Reichl y A. Krokhin, Phys. Rev. E **53**, 3271 (1996), G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez y F. M. Izrailev, Phys. Lett. A **274**, 192 (2000), G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez y F. M. Izrailev, Phys. Rev. E **64**, 036206 (2001), y G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez y F. M. Izrailev, Physica E **12**, 267 (2002).
- [2] B. Huckestein, R. Ketzmerick y C. H. Lewenkopf, Phys. Rev. Lett. **84**, 5504 (2000), y G. B. Akguc y L. E. Reichl, J. Stat. Phys. **98**, 813 (2000).
- [3] G. A. Luna-Acosta, J. A. Méndez-Bermúdez, P. Seba y K. N. Pichugin, Phys. Rev. E **65**, 046605 (2002), y J. A. Méndez-Bermúdez, G. A. Luna-Acosta, P. Seba y K. N. Pichugin, Phys. Rev. E **66**, 046207 (2002).
- [4] J. A. Méndez-Bermúdez y G. A. Luna-Acosta, por publicarse.
- [5] J. A. Méndez-Bermúdez, G. A. Luna-Acosta y P. Seba, Phys. Stat. Sol. (b) **230**, 385 (2002).

29. Entropía y escalas de tiempo para la termalización de partículas en líquidos

D. Osorio-González, M. Mayorga, J. Orozco y L. Romero-Salazar

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México, Av. Instituto Literario 100, CP 50000, Toluca, México

Resumen

Mediante simulación molecular, reproducimos funciones de correlación de pares experimentales, con lo cual fijamos un potencial de interacción molecular del líquido. Con fundamento en la teoría cinética para gases densos se usa un funcional de entropía cuya dependencia de la función de correlación de pares nos permite hacer una comparación entre la entropía termodinámica experimental y la entropía obtenida estadísticamente. Discutimos la ley de incremento de entropía y su relación con la información de Fisher, y ello nos permite identificar los mecanismos y las escalas de tiempo para alcanzar el equilibrio local.

La teoría cinética variacional¹ permite maximizar la entropía de Gibbs bajo las restricciones de la normalización de la función de distribución de pares (fdp) para N partículas, con lo cual es posible establecer para la entropía S

$$S = -kV \int f^{(1)} \ln(h^3 f^{(1)}) dp - k(\mathbf{r}^N / N!) \int \dots \int g^{(N)} \ln g^{(N)} dr_1 \dots dr_N$$

donde

$k =$ constante de Boltzmann

$h =$ constante de Planck

$f^{(1)} = f^{(1)}(p) =$ distribución de momentos de una partícula

$p =$ momento lineal

$g^{(N)} = g^{(N)}(r_1, \dots, r_N) =$ función de correlación de N partículas

$r_i =$ posiciones de las partículas

Los detalles de estos cálculos han sido reportados previamente^{2,3} y nos enfocaremos al significado de ese resultado.

Por otra parte, uno de los propósitos más importantes en teoría de líquidos es la de establecer expresiones apropiadas para el potencial de interacción molecular, las cuales deben ser consistentes con los datos experimentales⁶ macroscópicos. Nuestro primer objetivo es obtener un potencial que permita reproducir la entropía experimental para compararla con la entropía antes descrita y por lo tanto necesitamos reproducir los datos experimentales⁷ de la función de distribución de pares para diferentes líquidos.

Existen fundamentos, derivados de la mecánica cuántica, para representar interacciones repulsivas de corto alcance de la forma $\phi_r = De^{-2\alpha(r-r')}$ por esa razón proponemos usar el potencial intermolecular de Morse⁴ cuya forma es

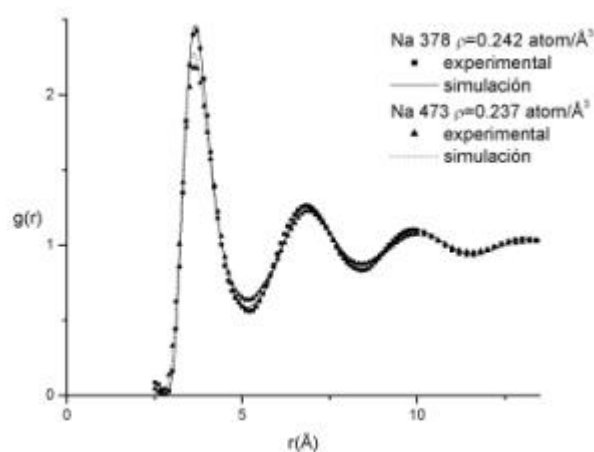
$$\phi = D(e^{-2\alpha(r-r')} - 2e^{-\alpha(r-r')})$$

donde r' es la distancia a la cual el potencial tiene su valor mínimo $-D$ y α controla la anchura del pozo. Usamos el diámetro de colisión σ del potencial de Lennard-Jones para escribir la última ecuación en unidades reducidas

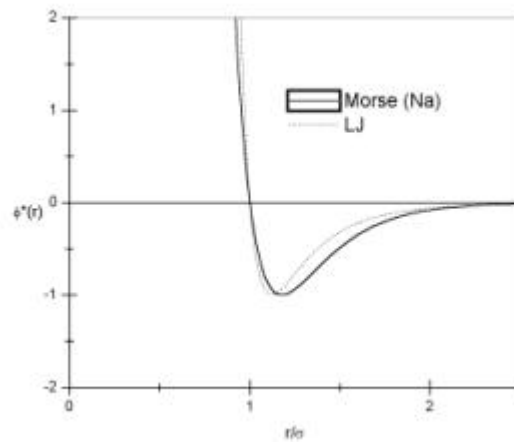
$$\phi^* = D(e^{-2a(r^*-1)} - 2e^{-a(r^*-1)})$$

donde $a = \alpha r' - \ln 2$ y $r^* = \frac{r}{\sigma}$.

Tomando en cuenta la versatilidad del potencial de Morse para modificar su alcance en el mínimo, implementamos el método de Leap-Frog en el algoritmo de dinámica molecular⁵ para reproducir las fdp's del sodio líquido a dos temperaturas diferentes como se muestra a continuación



Este procedimiento nos permitió fijar los parámetros del potencial de Morse el cual comparamos a continuación con el de Lennard-Jones para la misma profundidad y el mismo parámetro de colisión σ



Utilizando las dos primeras ecuaciones de la Jerarquía BBGKY para las funciones de distribución de las partículas se encuentra que la entropía satisface la ecuación de balance

$$\frac{\partial \Delta S}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \cdot [J_s(r_1, t) + u \cdot \Delta S] = \sigma(r_1, t)$$

donde

$$\Delta S = S[f^{(1)}, f^{(2)}] - S_{ex}(t)$$

$J_s(r_1, t)$ – flujo de entropía de una partícula

u – velocidad de la partícula

σ – producción de entropía

En particular, una propiedad importante es que la producción de entropía tiene una cota superior

$$\mathbf{S}(r_1, t) \leq \mathbf{S}_{\max}(r_1, t)$$

donde

$$\mathbf{S}_{\max}(r_1, t) = k_B L_1^{(1)} \ell_1^{(1)}(r_1, t) + \frac{k_B}{2} L_2^{(2)} \ell_1^{(2)}(r_1, t) + \frac{k_B}{2} L_2^{(2)} \ell_2^{(2)}(r_1, t),$$

$$\ell_1^{(1)}(r_1, t) = \int \frac{\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial p_1}\right)^2}{f^{(1)}} dp_1,$$

$$\ell_1^{(2)}(r_1, t) = \int \frac{\left(\frac{\partial g^{(2)}}{\partial p_1}\right)^2}{g^{(2)}} dr_2 dp_2 p_1,$$

$$\ell_2^{(2)}(r_1, t) = \int \frac{\left(\frac{\partial g^{(2)}}{\partial p_2}\right)^2}{g^{(2)}} dr_2 dp_2 p_1.$$

Los coeficientes $L_{(i)}^{(j)}$ emergen al aplicar la desigualdad de Cauchy-Schwarz y las integrales describen la forma de función de distribución de velocidades.

Con las dos primeras ecuaciones de la jerarquía BBGKY se establecen las fuerzas promedio efectivas entre una y dos partículas:

$$f^{(1)}(x_1, t) F_1(r_1, t) = -L^{(1)}(t)(r_1, t) \frac{\partial}{\partial p_1} f^{(1)}(x_1, t),$$

$$f^{(2)}(x_1, x_2, t) F_i(r_1, t) = -L_i^{(2)}(t)(r_1, t) \frac{\partial}{\partial p_i} g^{(2)}(x_1, x_2, t).$$

Para el caso de una función de distribución de velocidades homogénea se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial t} f^{(1)}(p_1, t) = L^{(1)}(t) \frac{\partial^2}{\partial p_1^2} f^{(1)}(p_1, t).$$

Cuya solución es:

$$f^{(1)}(p_1, t) = \frac{\mathbf{r}}{m} \left(4\mathbf{p} \int_0^t L^{(1)}(t') dt' \right)^{\frac{3}{2}} \times \exp \left(-\frac{p_1 - m\mathbf{u}}{4 \int_0^t L^{(1)}(t') dt'} \right)$$

De donde por comparación directa con la función de distribución de Maxwell se obtiene

$$k_B T = 4 \int_0^t L^{(1)}(t') dt'.$$

Es decir, esta última condición establece una restricción para la temperatura y se puede considerar por ende como el termostato de nuestro sistema.

Por otra parte, integrando el balance de entropía para dos diferentes escalas de tiempo resulta

$$S(t_2) - S(t_1) = k_B \frac{\mathbf{r}}{m} \ln \left[\frac{\int_{t_1}^{t_2} L^{(1)}(t) dt}{\int_0^{t_1} L^{(1)}(t) dt} \right].$$

Y por definición

$$\frac{\mathbf{r}}{m} = \int f^{(1)} dp_1,$$

$$F_1(t) = \frac{dp_1}{dt}.$$

Combinando las expresiones anteriores, se obtienen las siguientes ecuaciones:

Para el rozamiento entre partículas

$$\frac{\mathbf{r}}{m} L^{(1)}(t) = \int_0^t \langle F(t)_1 F(s)_1 \rangle ds;$$

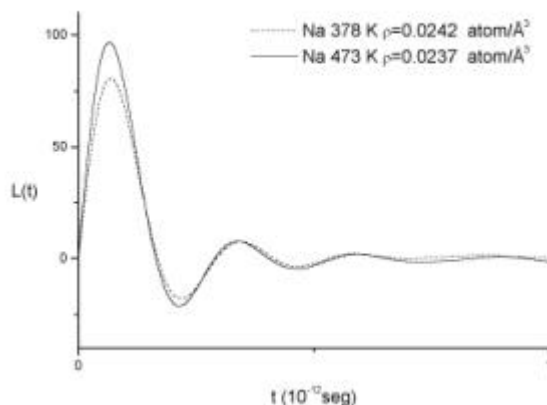
Para la producción máxima de entropía

$$\mathbf{s}_{\max}(r_1, t) = k_B \frac{\mathbf{r}}{m} \frac{L^{(1)}(t)}{2 \int_0^t L^{(1)}(t') dt'};$$

y para el tiempo de termalización de las partículas

$$\mathbf{t} = \frac{2 \int_0^t L^{(1)}(t') dt'}{L^{(1)}(t)}.$$

La forma de $L(t)$ para sodio líquido a dos temperaturas diferentes nos muestra que el tiempo de decaimiento del sistema al equilibrio se presenta a tiempos muy cortos.



Los resultados de la termalización en tiempo real se presentan a continuación

	t^*	(10^{-13} seg)	t^*	(10^{-13} seg)	σ_{MAX} ($k_B / \text{\AA}^3$)
Na a 378 K	0.10	1.293	0.31546	4.079	0.76711
	0.25	3.233	1.68564	21.79	0.14356
	0.35	4.527	3.4739	44.88	0.00696
	0.50	6.467	15.3051	197.89	0.00158
	0.90	11.641	24.4851	316.63	0.00098
Ar a 85 K	0.10	2.115	0.16939	3.5753	0.12527
	0.25	5.288	1.59355	33.637	0.01331
	0.35	7.404	6.94605	146.94	0.00305
	0.60	12.693	10.5495	223.17	0.00201
	1.10	23.271	81.7088	1728.4	0.00025

Referencias

- [1] J. Karkheck, G. Stell, Phys. Rev. A **25**,3302 (1982)
- [2] Velasco R. M., Romero-Salazar L., Mayorga M. Trends in Statistical Physics, **3**, 87 (2000)
- [3] Romero-Salazar L. , M. Mayorga, R. M. Velasco. Physica A. **237**, 150 (1997)
- [4] P.M. Morse, E. C. Stueckelberg. Phys. Rev. **33**, 932 (1929)
- [5] M. P. Allen, D.J. Tildsley. *Computer simulation of liquids*. Oxford University publications (1987)
- [6] J. L. Yarnell, M. J. Katz. Phys. Rev. A. **7**, 2130 (1973)
- [7] D. C. Wallace. International Journal of Quantum Chemistry. **52**, 425 (1994)

30. Cálculo de la estructura electrónica de la superficie (001) de MgO

Roxana Licona* y J. F. Rivas-Silva**

* *Facultad de Ciencias Químicas BUAP, Av. San Claudio y 14 Sur Puebla 72570, México*

** *Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", Apdo. Postal J-48 Puebla 72570 México*

Resumen

En este trabajo se presentan cálculos ab initio basados en la Teoría de Funcionales de la Densidad (TFD) y en el método de pseudopotenciales¹, del cristal de MgO y su superficie (001). Muchos de los cálculos ab initio en materia condensada están basados en esta teoría en la que es necesario emplear una aproximación conveniente para la energía de intercambio y correlación. Aquí se han empleado la aproximación local (LDA)² y una extensión de ésta que involucra términos no locales (llamada corrección por gradientes o GGA)³. Se comparan los resultados obtenidos en el cálculo de las estructuras de equilibrio y de la energía del material, el cual por sus propiedades químicas se emplea como catalizador o como soporte catalítico.

Antecedentes

El óxido de magnesio MgO es un material que por sus propiedades químicas es empleado como catalizador o bien como soporte catalítico.⁴ Éste cristaliza en una estructura cúbica centrada en las caras y su superficie más estable es la (001). Por su aplicación en el área de la catálisis el estudio de sus propiedades superficiales es muy importante.

Actualmente el estudio de la estructura electrónica de diferentes sistemas, basado en la teoría de funcionales de la densidad es una herramienta muy útil. Sin embargo dentro de este contexto es necesario emplear una aproximación conveniente para la energía de intercambio y correlación y para ello se tiene la aproximación local LDA² o bien la de corrección por gradientes GGA³.

El objetivo de este trabajo es establecer las diferencias en el cálculo de la estructura electrónica del MgO y su superficie (001) al emplear ambas aproximaciones.

Metodología

Los cálculos se llevaron a cabo dentro del contexto de la Teoría de Funcionales de la Densidad (TFD).¹ Se empleó el método de pseudopotenciales, de tal manera que sólo los electrones de valencia se representan explícitamente y la interacción ión-electrón se representa con pseudopotenciales ultrasuaves.⁵ Se usaron condiciones periódicas y se emplearon ondas planas como conjunto de base.¹ Sólo se incluyeron aquellas ondas planas cuya energía cinética $\hbar^2 k^2/2m$ es menor a la establecida por una energía de corte E_{corte} .¹ La energía de intercambio y correlación se estimó empleando la aproximación local LDA (*local density approximation*)² y una extensión de ésta que involucra términos no locales llamada corrección por gradientes o GGA.³

Los cálculos se realizaron en el Instituto de Física de la BUAP en una computadora Octane de Silicon Graphics con un procesador mips1400, 750 MB de RAM y dos discos de 17 GB. Se empleó el módulo CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) de mecánica cuántica integrado dentro del paquete CERIUS 4.0 (MSI) de modelaje molecular.

Resultados y discusión

Las estructuras de equilibrio del cristal de MgO, así como de su superficie (001) se determinaron por relajación de los parámetros a, b, c, así como de la posición de los átomos. Los valores de equilibrio de estos parámetros se resumen en la tabla 1. En el caso de los cálculos con LDA, y como generalmente ocurre, hay una tendencia a subestimar los parámetros de red. No así cuando se emplea la corrección por gradientes, que tiende a incrementar los valores de los parámetros de red.

Se calculó la energía de formación de la superficie E_{sup} . Los resultados que se obtuvieron muestran que el valor calculado empleando GGA es más bajo con respecto al valor de LDA (tabla 1). Lo anterior es consistente con la tendencia general de la corrección por gradientes de eliminar la sobreestimación de la energía de enlace electrónica que hay en LDA.

Se calculó la densidad de estados (DOS) con LDA y GGA tanto para el cristal como para la superficie (001) de MgO y en cualquiera de los dos sistemas no hay diferencias apreciables entre la DOS calculada con LDA y GGA.

MgO	LDA	GGA	Exp. ⁶
Cristal			
a (Å)	4.2094	4.2704	4.2112
(a=b=c)	0.043%	1.407%	
Et (eV)	-5654.1758	-5682.1638	
Superficie (001)			
a (Å)	4.1052	4.1488	
b (Å)	4.1054	4.1487	
Et (eV)	-8479.0014	-8521.4248	
Esup (j/m ²)	2.1	1.5	

Tabla 1. Comparación de los valores teóricos y experimentales del cristal y de la superficie (001) de MgO

Conclusiones

Estos cálculos muestran que la corrección por gradientes GGA incrementa los parámetros de red. Estos efectos son similares a los reportados anteriormente en metales y semiconductores.

Para el caso de la superficie, GGA tiene menor efecto en la estructura de la superficie relajada no así en el cálculo de la energía de la superficie que es sustancialmente menor.

Con respecto a la densidad de estados, no hay diferencias apreciables.

Referencias

- [1] M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, J. D. Joannopoulos. *Review of Modern Physics*, **64**, 4, (1992), 1045.
- [2] P. Perdew, A. Zunger. *Physical Review B*, **23**, 10, (1981), 5048.
- [3] P. Perdew, Wang. *Physical Review B*, **45**, (1992), 13244.
- [4] J. Navarrete, M. E. Llanos, E. López-Salinas. *J. Phys. Chem.*, B **101**, (1997), 7448.
- [5] Z. D. Vanderbilt. *Physical Review*, **B41**, (1990), 7892.
- [6] R. W. Wyckoff, *Crystal Structures*. Wiley, New York, 1975.

31. Cálculos de primeros principios de la adsorción de metales del grupo III en Si (001) a temperaturas altas

J. Cotzomi*, Gregorio H. Cocoltzi* y Noboru Takeuchi**

*Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado postal J-48, Puebla 72570, México

**Centro de Ciencias de la Materia Condensada, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 2681, Ensenada, Baja California, 22800, México

Resumen

Mediante cálculos de primeros principios de la energía total se investiga la reconstrucción del Si(001)-(3x4) inducido por la adsorción de metales del grupo III (Ga, Al, e In) cuando se depositan a altas temperaturas. Consideramos diferentes modelos y encontramos que la estructura piramidal de Bunk *et al* propuesta para la estructura del In sobre Si (001), produce la configuración atómica más estable en todos los casos. Presentamos una descripción detallada de la reconstrucción de la superficie recubierta por Al, Ga, e In.

Evidencias experimentales demuestran que la adsorción de metales del grupo III (Ga, Al e In) en el Si(001) depositados a bajas temperaturas inducen la formación de líneas de dímeros del metal en la dirección perpendicular a las filas de dímeros del Si¹. Por otro lado, investigaciones teóricas basadas en cálculos de primeros principios^{2,3} también demuestran la formación de estas líneas. Si se incrementa el recubrimiento del metal estos sistemas tienen una reconstrucción (2x2)⁴.

En contraste In-Si^{5,6} y Al-Si⁷ se reconstruyen formando subunidades de metal-Si cuando el metal se deposita a altas temperaturas. Con bajo recubrimiento estas subunidades se distribuyen aleatoriamente pero a alto recubrimiento forman reconstrucciones complejas: (3x4) para el In/Si(001) y c(4x2n) para el Al/Si(001)⁸. Imágenes de STM indican que ambas subunidades Si-Al y Si-In ocupan una celda (3x4) y con propiedades electrónicas similares. Por otra parte, en el depósito de Ga sobre Si(001) a altas temperaturas resultan reconstrucciones (8xn) cuando el recubrimiento de Ga excede 0.5ML⁹. Aunque imágenes de STM indican una

estructura diferente, es posible que a bajos recubrimientos de Ga se formen subunidades de Ga-Si con periodicidad (3x4).

Diferentes modelos se han propuesto para explicar la estructura Si(001)(3x4)-In. Estudios de STM realizados por Zotov y colaboradores sugieren un modelo que contiene 6 átomos de Si y 6 átomos de Al en la superficie del Si. Estudios de difracción de rayos X realizados por Bunk *et al*¹⁰ demuestran que la estructura de Zotov no es compatible con el experimento. Por esta razón, Bunk *et al*¹⁰ propusieron un modelo piramidal complejo, tomando en cuenta la formación de subunidades y que explica de manera satisfactoria los resultados experimentales.

Recientemente, Zhu *et al*⁷ reportaron estudios de STM de la adsorción del Al en Si(001) a altas temperaturas. Para explicar sus resultados propusieron un modelo en términos de subunidades de Al-Si y argumentaron que la estructura se debe a una fuerte interacción entre los átomos adsorbidos de Al con los átomos de la superficie del Si. La formación de las subunidades Al-Si se origina por la transferencia de carga y la distribución espacial de los estados de la superficie.

En este trabajo, reportamos el estudio de la estructura atómica inducida por la adsorción de los metales del grupo III (In, Al, y Ga) en Si(001)-(3x4). Aunque diversos modelos se exploraron para investigar estas estructuras, los cálculos demuestran que la estructura más estable corresponde al modelo de Bunk *et al*. Presentamos una descripción de la estructura atómica de acuerdo a este modelo.

Para investigar la adsorción de metales del grupo III en Si(001), los cálculos de energía total de primeros principios se realizan en el esquema de Car y Parrinello¹¹ en la aproximación de densidad local. La combinación de la dinámica electrónica e iónica y la aplicación del método del descenso más rápido, permiten optimizar las configuraciones atómicas de la superficie. El método de rebanadas se utiliza para estudiar la superficie. Cada rebanada consiste de cinco capas atómicas, y cada capa contiene 12 átomos de Si. En la capa superior de la estructura sin reconstruir, se colocan una mezcla de átomos de Si y metal. Para simular el volumen, los átomos de Si de la capa inferior se saturan con átomos de H. Adicionalmente, la interacción electrón-ión se describe por pseudopotenciales no locales que conservan la norma, de acuerdo al esquema de Kleinman-Bylander¹². Las eigenfunciones se expanden en ondas planas con una energía de corte de 8 Ry.

Para el modelo de Bunk consideramos una celda (3x4) en la superficie sin reconstruir y colocamos 6 átomos de Si y 6 de metal (Al, Ga, e In) en la primera capa del Si. Se agrega un átomo de Si en centro de la celda unitaria para formar la subunidad metal-

Si. Después de relajar la estructura en el modelo de Bunk obtenemos la superficie más estable, presentada en la figura 1, (a) es una vista superior y en (b) una vista lateral. La subunidad de metal-Si formada en este modelo presenta la estructura piramidal con un trímero en la parte superior de la estructura. El trímero está compuesto por un átomo de Si enlazado por abajo con dos átomos del metal. Al mismo tiempo, los átomos de metal están enlazados a una segunda capa de átomos de Si. En este sentido, los átomos del metal adsorbidos tienen coordinación tres y los átomos de Si en la superficie tienen coordinación cuatro, como consecuencia todos los electrones de valencia están compartidos y no existen enlaces sueltos. En contraste, los modelos de Zhu y Zotov dejan enlaces sueltos, consecuentemente las estructuras no son estables.

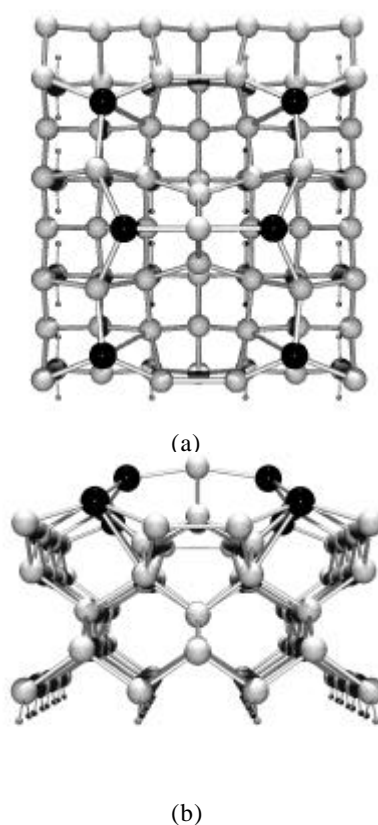


Fig.1 Estructura atómica relajada de la superficie metales III/Si(001) con periodicidad (3x4) de acuerdo al modelo de Bunk. Esta estructura representa la más estable. Las esferas oscuras representan los átomos metálicos del grupo III y las grises representan los Si. (a) vista desde arriba y (b) vista lateral.

En conclusión, se realizaron cálculos de la energía total de primeros principios para investigar la reconstrucción de la superficie Si(001)-(3x4) cuando átomos metálicos del grupo III se adsorben. De los modelos estudiados se encuentra que el de Bunk *et al* da la configuración más estable. La estructura piramidal obtenida se compone de un trímero en la parte superior, éste se forma de un Si en la parte más alta, enlazado a dos átomos del metal que ocupan posiciones inferiores (en la primera capa). La coordinación de los átomos del metal es tres y la de los Si es cuatro, esto evita enlaces sueltos. Por otro lado, los otros modelos dejan enlaces sueltos y como consecuencia no producen las estructuras atómicas más estables.

Agradecimientos. Agradecemos el soporte de DGAPA proyecto No. IN111600, CONACYT proyecto 33587-E, y la VIEP-UAP proyecto No. II10G01. Agradecemos la asistencia técnica de Juan Peralta y Carlos González.

Referencias

- [1] J. Nogami, A. A. Baski and C. F. Quate, Phys. Rev. B **44**, 1415 (1991).
- [2] G. Brocks, P.J. Kelly and R. Car, Phys. Rev. Lett. **70**, 2786 (1993).
- [3] N. Takeuchi, Phys. Rev. B **63**, 35311 (2000).
- [4] J. E. Northrup, M. C. Shabel, C. J. Karlsson and R.I.G. Uhrberg, Phys. Rev. B. **44**, 13799 (1991).
- [5] O. Bunk, G. Falkenberg, L. Seehofer, J.H. Zeysing, R. L. Johnson, M. Nielsen, R. Feidenhans'l, and E. Landermark, Appl. Surf. Sci. **123/124**, 104 (1998).
- [6] A. V. Zotov, A. A. Saranin, V. G. Lifshits, J. T. Ryu, O. Kubo, H. Tani, M. Katayama, and K. Oura, Phys. Rev. B **57**, 12492 (1998).
- [7] C. Zhu, A. Kawazu, S. Misawa and S. Tsukahara, Phys. Rev. B **59**, 9760 (1999).
- [8] H. Itoh, J.Itoh, A. Schmid, and T. Ichinokawa, Surf. Sci. **302**, 295 (1994).
- [9] Y. Nakada, I. Aksenov, and H. Okumura, J. Vac. Sci. Technol. B **17**,1 (1999).
- [10] O. Bunk, G. Falkenberg, J. H. Zeysing, R. L. Johnson, M. Nielsen and R. Feidenhans, Phys. Rev. B **60**, 13905 (1999).
- [11] R. Car and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. **55**, 2471 (1985).
- [12] L. Kleinman and D. M. Bylander, Phys. Rev. Lett. **48**, 1425 (1982).

32. Estructura de bandas fotónica para una fibra óptica de cristal fotónico

Briseida Meneses Alviso y J. Arriaga

Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado postal J-48, 72570, Puebla, México

Resumen

Las fibras ópticas de cristal fotónico se construyen rodeando el núcleo de una fibra con un cristal fotónico bidimensional. Si el índice de refracción del núcleo es mayor que el índice de refracción del cristal fotónico, la propagación de las ondas electromagnéticas a lo largo del núcleo se debe al fenómeno de reflexión total interna. Sin embargo, esto no ocurre si el índice de refracción del núcleo es menor que el índice de refracción del cristal fotónico. Se ha demostrado experimentalmente que es posible la propagación de ondas electromagnéticas en estas condiciones, siempre y cuando el cristal fotónico rodeando al núcleo posea un gap fotónico completo. En este caso la propagación de las ondas electromagnéticas a lo largo del núcleo se debe a la expulsión de los modos debido al gap fotónico de la estructura. Esto permite la fabricación de fibras ópticas cuyo núcleo este compuesto por aire, obteniéndose la máxima velocidad de propagación y la mínima pérdida de energía. En este trabajo calculamos la estructura de bandas de un cristal fotónico bidimensional formado por un arreglo hexagonal de aros de dióxido de silicio en una matriz de aire. Se analizan las condiciones para las cuales existen gaps fotónicos completos en el sistema para la propagación de las ondas electromagnéticas, tanto en el plano de periodicidad como fuera de él. La estructura de bandas se obtiene resolviendo las ecuaciones de Maxwell usando el método de ondas planas.

Introducción

Un cristal fotónico es un sistema artificial formado por un arreglo periódico de materiales dieléctricos. Para determinados valores de las constantes dieléctricas y con cierta geometría definida en la red, se puede obtener lo que se conoce como “gap fotónico”. Un gap fotónico es una región de frecuencias en la cual la propagación de las ondas electromagnéticas está totalmente prohibida. Bajo determinadas circunstancias puede obtenerse un gap fotónico completo en la estructura de bandas. Un gap fotónico completo es una región de frecuencias para la cual la propagación de

las ondas electromagnéticas en todas las direcciones del cristal está prohibida. Los cristales fotónicos se pueden construir en una, dos o tres dimensiones. En el caso de los cristales bidimensionales la mayoría de los estudios teóricos se han concentrado en estudiar la propagación de las ondas electromagnéticas en el plano de periodicidad. Todo el lenguaje que se utiliza para estudiar las propiedades de los electrones en semiconductores es válido también para los cristales fotónicos. Desde el punto de vista teórico, mientras que en el caso electrónico es necesario resolver la ecuación de Schrödinger para calcular la estructura de bandas de energía, para calcular la estructura de bandas de un cristal fotónico debemos resolver las ecuaciones de Maxwell.

Desarrollo

Consideremos la propagación de ondas electromagnéticas dentro de materiales no magnéticos, sin densidad de carga libre ni corrientes, y supongamos que la constante dieléctrica es lineal e isotrópica en todo punto dentro del cristal fotónico. Supongamos además que la dependencia temporal de los campos es de la forma $e^{-i\omega t}$. De las ecuaciones de Maxwell y tomando en cuenta las consideraciones anteriores podemos eliminar el campo eléctrico (\mathbf{E}) y obtener una ecuación que dependa sólo del campo magnético $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ [1]. Esta ecuación puede considerarse como un problema de eigenvalores, identificando al operador que actúa sobre $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ como un operador lineal y hermítico, y a la frecuencia entre la velocidad de la luz al cuadrado, $(\omega/c)^2$, como los eigenvalores de $\mathbf{H}(\mathbf{r})$. Debido a que el sistema es periódico, del teorema de Bloch sabemos que los campos electromagnéticos pueden expresarse mediante el producto de una onda plana por una función que posee la periodicidad del cristal. Podemos hacer una expansión en serie de Fourier de esta función periódica y del inverso de la constante dieléctrica (la cual es también periódica), del tal forma que al sustituir estas expansiones en la ecuación de eigenvalores obtenemos lo siguiente:

$$\sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}(\mathbf{G}-\mathbf{G}') \left[\left(\mathbf{k} + \mathbf{G} \right) \times \left[\left(\mathbf{k} + \mathbf{G}' \right) \times H(\mathbf{G}') \right] \right] = \left(\frac{\omega}{c} \right)^2 H(\mathbf{G}) \quad (1)$$

En la ecuación anterior, \mathbf{k} es el vector de propagación de las ondas electromagnéticas, \mathbf{G} son vectores de la red recíproca y $\mathbf{h}(\mathbf{G}-\mathbf{G}')$ son los coeficientes de Fourier del inverso de la constante dieléctrica. La suma sobre \mathbf{G} es una suma infinita, de tal forma que para calcular los eigenvalores, es necesario tomar un número finito de vectores \mathbf{G} , y la ecuación resultante puede resolverse por técnicas convencionales.

Por otro lado, las fibras ópticas de cristal fotónico pueden construirse rodeando el núcleo de la fibra por un cristal fotónico bidimensional [2]. Al considerar la propagación de las ondas electromagnéticas a lo largo de la fibra y si el índice de refracción del núcleo es mayor que el índice de refracción efectivo del cristal fotónico, podemos tener propagación a lo largo del núcleo debido al fenómeno de reflexión total interna. Sin embargo, a pesar de que este fenómeno no ocurre cuando el índice de refracción del núcleo es menor que el índice de refracción del cristal fotónico, recientemente se ha reportado una fibra óptica cuyo núcleo está compuesto por aire y que es capaz de poseer modos guiados en el núcleo[3]. En este caso, la propagación de las ondas electromagnéticas se debe a la expulsión de los modos debido al gap fotónico de la estructura rodeando al núcleo. Es decir, en este tipo de fibras, es posible tener propagación a lo largo del núcleo siempre y cuando el material rodeando al núcleo posea un gap fotónico completo. En la figura (1) se muestra una fibra óptica cuyo núcleo está compuesto por aire. Antes de calcular la propagación de las ondas electromagnéticas en estas fibras, es necesario calcular la estructura de bandas del cristal fotónico rodeando al núcleo.

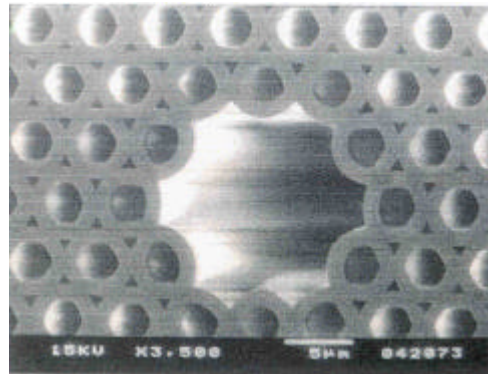


Figura 1. Fotografía electrónica de una fibra óptica de cristal fotónico con un núcleo de aire.

El cristal que rodea al núcleo de la fibra mostrada en la figura 1, es un cristal fotónico en bidimensional formado por un arreglo hexagonal de anillos de dióxido de silicio en una matriz de aire. Los anillos poseen radio interior r_1 y radio exterior $r_2=a/2$, siendo a , la constante de red. Para calcular la estructura de bandas debemos resolver el conjunto de ecuaciones (1). Los vectores \mathbf{G} son vectores en dos dimensiones, y si consideramos propagación sólo en el plano de la periodicidad, el vector \mathbf{k} será también de dos dimensiones. Para este caso, es decir, propagación en el plano, es posible desacoplar las ecuaciones (1) en dos sistemas, uno para el cual el campo

magnético posea sólo componente z y el otro para el campo magnético sólo con componentes en el plano. Las soluciones que se obtienen en los casos anteriores, se conocen como modos TE y modos TM, respectivamente.

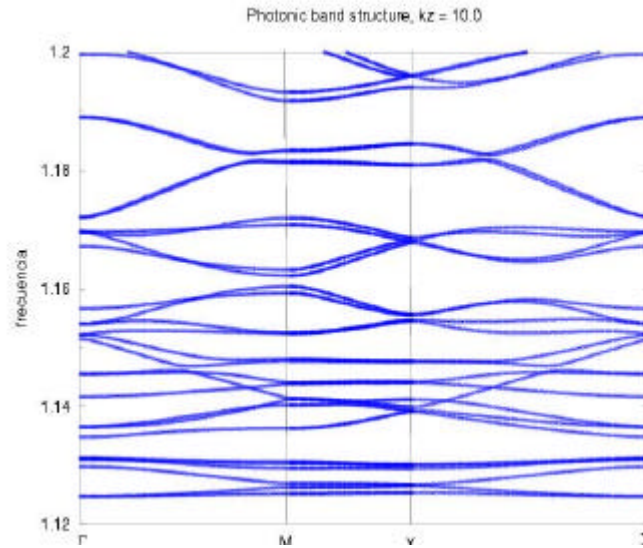


Figura 2. Estructura de bandas para los modos más bajos del cristal fotónico que encierra al núcleo de la fibra óptica de la figura (1). La frecuencia está dada en términos de $(\omega/2\pi c)$.

En forma general, los coeficientes de Fourier $\eta(\mathbf{G}-\mathbf{G}')$ son:

$$\mathbf{h}(\mathbf{G}-\mathbf{G}') = \frac{1}{A_c} \int_{A_c} \mathbf{h}(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{G}-\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \text{ donde la integral se efectúa solo sobre los aros y } A_c \text{ Atomos}$$

$\eta(\mathbf{r}) = 1/\epsilon(\mathbf{r})$. En nuestro caso obtenemos para $\mathbf{G} = \mathbf{G}'$, $\eta(0) = f \eta_a + (1-f) \eta_b$, donde $\eta_a = 1/\epsilon_a$ y $\eta_b = 1/\epsilon_b = 1$, f es la fracción de llenado de un aro en la celda unitaria y es igual a $f = \pi(r_2^2 - r_1^2)/A_c$ siendo A_c el área de la celda unitaria.

Por otro lado cuando $\mathbf{G} \neq \mathbf{G}'$ obtenemos,

$$\mathbf{h}(\mathbf{G} \neq \mathbf{G}') = 2(\mathbf{h}_a - \mathbf{h}_b) \left[\frac{p r_2^2}{A_c} \frac{J_1(|\mathbf{G}-\mathbf{G}'| r_2)}{|\mathbf{G}-\mathbf{G}'| r_2} - \frac{p r_1^2}{A_c} \frac{J_1(|\mathbf{G}-\mathbf{G}'| r_1)}{|\mathbf{G}-\mathbf{G}'| r_1} \right] \quad (2)$$

con J_1 la función de Bessel de orden 1. Al calcular la estructura de bandas tomando los parámetros de la fibra mostrada en la figura (1), observamos que para propagación en el plano de la periodicidad no es posible obtener gaps fotónicos

completos, es decir unos intervalos de frecuencias para las cuales esté prohibida su propagación en todas las direcciones del cristal. Sin embargo, si consideramos propagación fuera del plano de la periodicidad, es decir tomamos el vector \mathbf{k} , con una componente k_z diferente de cero, es posible obtener gaps fotónicos completos. En este último caso ya no podemos separar los modos en TE y TM, y es necesario resolver el conjunto de ecuaciones (1) de forma completa. Hemos calculado la estructura de bandas para diferentes valores de k_z y observamos que, a medida que aumentamos su valor, aumenta el número de gaps fotónicos completos en la estructura. En la figura (2) mostramos la estructura de bandas a lo largo de las direcciones especiales de la zona de Brillouin, para el caso en que $k_z=10$. Podemos ver que en el rango de frecuencias mostrado se pueden apreciar claramente tres gaps fotónicos completos. El gap fotónico más bajo se encuentra alrededor de $(\omega/2\pi c)=1.13$.

Conclusiones

Hemos calculado la estructura de bandas de un cristal fotónico bidimensional formado por un arreglo hexagonal de aros de dióxido de silicio en una matriz de aire. Este cristal se ha usado como envolvente en una fibra óptica con núcleo de aire. Observamos que este cristal fotónico no posee gaps fotónicos completos cuando se considera la propagación de ondas electromagnéticas en el plano de la periodicidad. Sin embargo, es posible obtener gaps fotónicos completos en la estructura si se considera propagación fuera del plano.

Referencias

- [1] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, J. N. Winn, Photonic Crystals: Molding the flow of light, Princenton Univ. Press, Princenton, NJ, 1995.
- [2] Rigby Pauline, NATURE 396 415-416 (1998).
- [3] R. F. Cregan, B. J. Mangan, J. C. Knight, T. A. Birks, P. St. J. Russell, P. J. Roberts, D. C. Allan, SCIENCE 285 1537-1539.

33. Cálculo de la concentración de impurezas incorporadas en una película delgada

A. Canizo-Cabrera, Neftalí Pérez-Amaro, Bernardo Cumplido-Espíndola, J.C. Pérez-Hernández, Omar Pérez-Amaro y Valentín García-Vázquez

Instituto de Física LRT, Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla, Pue. 72570

Resumen

Presentamos un método novedoso para determinar, la concentración de impurezas incorporadas en una película delgada. El método de cálculo está basado en el uso de curvas de calibración obtenidas empíricamente al utilizar los parámetros de crecimiento durante la fabricación de recubrimientos metálicos. La fabricación de recubrimientos metálicos de alta calidad (con niveles muy bajos de concentración de impurezas) se realizó mediante sputtering magnetrón en un sistema de alto vacío operado limpiamente por bombeo criogénico (presión base de 5×10^{-8} Torr) en el cual se implementó un controlador de conductancia altamente confiable. Se utilizan mediciones eléctricas con niveles extremadamente bajos de ruido realizadas con instrumental de alta precisión (picoamperes y nanovolts) dentro de un diseño experimental optimizado en la caracterización de materiales superconductores, para determinar de manera experimental la concentración de impurezas incorporadas en una película delgada. Se presentan detalles del método de cálculo, la forma de como puede ser utilizado para identificar los parámetros críticos de fabricación, y la manera de minimizar las impurezas presentes en materiales metálicos depositados en forma de películas delgadas mediante la técnica de sputtering.

Introducción

La obtención de películas delgadas epitaxiales de alta calidad mediante sputtering está relacionado con la poca o ninguna evidencia de contaminación en las misma película. Para el crecimiento de estos materiales, sin embargo, es necesario saber que condiciones de sputtering son óptimas. Ya que el sputtering toma lugar a presiones relativamente altas [1], la pregunta de contaminación de estos materiales, así como, de los materiales compuestos de capas y de la contaminación en las interfaces entre capas es de vital importancia. Existen dos parámetros importantes que permiten una

comparación de la calidad de multicapas metálicas preparadas artificialmente en diferentes sistemas de sputtering [2]. Estos parámetros son *la concentración de impurezas* incorporadas en una película, la cual se expresa como un porcentaje:

$$\% imp \cong \frac{100}{\left(\frac{(0.5 R_{sputt})(2.2 \times 10^{-3})(Q_{Ar})}{(P_{sputt})(Q_{leak})} \right) + 1} \quad (1)$$

donde P_{sputt} es la presión obtenida durante el sputtering medida en mTorr, Q_{leak} es la velocidad de fuga efectiva de las impurezas dentro del sistema de sputtering, Q_{Ar} es la velocidad de flujo del gas de sputtering de Ar y R_{sputt} es la velocidad de sputtering en Å/seg; y *la fracción de una monocapa de impurezas* que depende del tiempo en que una superficie pura sea expuesta un tiempo t antes de que se inicie el depósito de la siguiente capa.

El propósito de este trabajo es determinar la concentración de impurezas incorporadas en una película delgada [Ec. (1)] utilizando los parámetros de crecimiento durante la fabricación de recubrimientos metálicos depositados mediante sputtering magnetrón.

Preparación de las películas delgadas

Se prepararon películas delgadas de Nb mediante sputtering magnetrón DC [3,4]. Las películas de Nb fueron preparadas sobre sustratos de zafiro orientados 90° , manteniendo fijos todos los parámetros de crecimiento excepto la presión de plasma. El control de la presión de plasma fue posible al añadir al diseño del sistema de crecimiento un controlador de conductancia. Con este controlador y con el sistema de bombeo criogénico se puede obtener presiones de argón estables dentro de la cámara de crecimiento, cuando se introduce el gas de procesado (argón). Se realizó un estudio empírico y cuidadoso para relacionar la presión de argón P_{Ar} con la velocidad de flujo del gas de procesado Q_{Ar} , encontrándose que

$$Q_{Ar} (\text{sccm}) = 0.098331 P_{sputt} (\text{mTorr}) + 3.80141 \quad (2)$$

Los crecimientos se llevaron a cabo a temperatura ambiente conservando fija la potencia DC a 200 Watts, y usando una distancia blanco-sustrato de 15 cm. Todos los crecimientos se obtuvieron con un tiempo de depósito de 15 minutos con una presión de sputtering entre 5.2 mTorr y 40.1 mTorr, con la cual calculamos un grosor entre 100 Å y 2120 Å.

Se tomaron datos experimentales proporcionados por la Compañía KJL, acerca de la razón de depósito con respecto a la potencia aplicada a diferentes valores de la presión de argón. Realizando el cálculo para la obtención de la curva teórica a dichos puntos mediante el método algebraico de tres puntos para un análisis monoexponencial [5] se obtiene que,

$$R_{sputt} = 7.40522 \exp(-0.02592 P_{sputt}) - 4.10898, \quad (3)$$

donde R_{sputt} en Å/seg es la razón de depósito.

Cálculo de la concentración de impurezas

La Ec. (1) relaciona la dependencia de la concentración de impurezas con los parámetros de crecimiento de una película delgada crecida por la técnica de sputtering. Sustituyendo las Ecs. (2) y (3), y suponiendo que en el sistema de alto vacío la velocidad de fuga efectiva durante el crecimiento se mantiene constante y teniendo en cuenta que los valores típicos para esta velocidad en un sistema de vacío con bombeo de difusión es de 4×10^{-3} sccm, se tiene que

$$\%imp. \cong \frac{100}{\left(\frac{(1.1)(7.40522 \exp(-0.02592 P_{sputt}) - 4.10898)(0.09833 P_{sputt} + 3.80141)}{4(P_{sputt})} + 1 \right)}. \quad (4)$$

Esta última ecuación nos indica que la concentración de impurezas depende únicamente de la presión durante el crecimiento P_{sputt} . Graficando la concentración de impurezas en función de la presión de plasma, se observa que la concentración de impurezas aumenta monótonamente conforme aumenta la presión de sputtering (ver Fig. 1). Este resultado es interesante ya que muestra que la presión durante el sputtering va a determinar el grado de impurezas, *i. e.*, se puede controlar la calidad de las películas crecidas mediante el valor de la presión de sputtering.

Caracterización eléctrica

Se usó la técnica estándar de cuatro puntas para medir la resistividad en función de la temperatura en el intervalo de medición de 10 - 300 K de las películas de Nb, crecidas a diferentes valores de la presión de Sputtering. Una forma de evaluar la pureza y el contenido de defectos de las películas metálicas es mediante la razón de la resistividad RRR [6], definida para nuestro caso como $RRR = \rho(290 \text{ K}) / \rho(10 \text{ K})$. Ésta es fácil de determinar experimentalmente al medir la resistividad en las dos

temperaturas indicadas. Las determinaciones de la razón de la resistividad han sido una forma útil para evaluar la calidad [7-9] de las películas depositadas mediante sputtering. Obteniendo el valor de RRR para cada muestra medida y graficando el resultado en función de la presión de plasma utilizada en cada muestra (ver Fig. 2), se observa que el valor de RRR va disminuyendo conforme aumenta el valor de la presión.

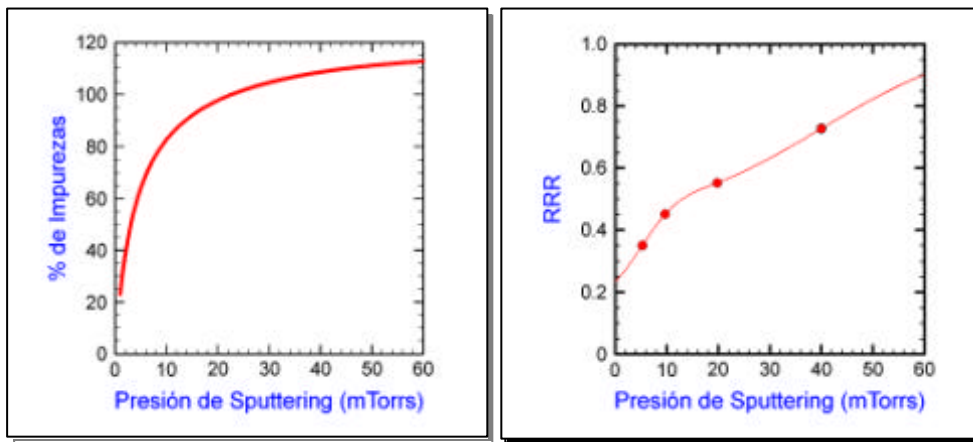


Figura 1. (Izquierda) El porcentaje de impurezas como función de la presión de sputtering P_{Ar} . La concentración de impurezas durante el crecimiento de una película dependerá directamente del valor de la presión utilizada.

Figura 2. (Derecha) La razón de la resistividad residual RRR (indicador de la concentración de impurezas a $T = 0$ K) como función de la presión de plasma.

Conclusiones

Se determinó la concentración de impurezas incorporadas en una películas delgada, basándonos en el uso de curvas de calibración obtenidas empíricamente al utilizar los parámetros de crecimiento durante la fabricación de recubrimientos metálicos. Se encontró, mediante un cálculo, que la concentración de impurezas aumenta monótonamente conforme aumenta la presión de sputtering. Se depositaron películas delgadas de Nb sobre sustratos de zafiro (orientado 90°) mediante la técnica de pulverización catódica tipo magnetrón, bajo diferentes condiciones de plasma. Se utilizó la técnica de 4 puntas para obtener perfiles de resistencia contra temperatura en un intervalo de temperatura de 10 - 300 K. Mediante las mediciones de resistencia se pudo observar que la presión de sputtering influye en la calidad de las películas, lo

cual se confirma con el incremento de la *RRR* (indicador de la concentración de impurezas) conforme disminuye la presión. Al aplicar la regla de Matthiessen se concluye que la concentración de impurezas aumenta conforme aumenta el valor de la presión de plasma. En otras palabras la calidad de las películas está relacionada directamente por la presión del plasma.

Agradecimientos. Trabajo financiado por CONACyT, proyectos F541-E9309, 3427P-E9607 y 481110-000/456-0/PAD; por la SEP, asignaciones FOMES 96-97, 98-99, 2000-2001, y asignación PROMEP 2000; y por la Universidad Autónoma de Puebla, proyecto VIEP II-17101.

Referencias

- [1] Ver por ejemplo, G. K. Wehner and G. S. Anderson, and L. Maissel, *Handbook of Thin Film Technology*, edited by L. I. Maissel and R. Glang (McGraw-Hill, New York, 1970), Caps. 3 y 4.
- [2] C. M. Falco, *J. Appl. Phys.* **56**, 1218 (1984).
- [3] Alberto Canizo-Cabrera, E. Gómez-Barojas, C. Tabares-Muñoz, R. Silva-González y Valentín García-Vázquez, *Fabricación de Películas Superconductoras*, Memorias de la 5ª. Reunión Nacional Académica de Física y Matemáticas, Escuela Superior de Física y Matemáticas IPN, México, D.F., 37 (2000).
- [4] Alberto Canizo-Cabrera, E. Gómez-Barojas, C. Tabares-Muñoz, R. Silva-González, and Valentín García-Vázquez, *Mod. Phys. Lett.*, **15**, 639 (2001).
- [5] A. A. Istratov and O. F. Vyenko, *Rev. Sci. Instrum.*, **70**, 1233 (1999).
- [6] Ver por ejemplo, M. Ohring, *The Materials Science of Thin Films* (Academic Press, New York, 1992) Cap. 10, p. 455.
- [7] W. P. Lowe, T. W. Barbee, Jr., T. H. Gaballe, and D. B. McWhan, *Phys. Rev. B* **24**, 6193 (1981).
- [8] D. W. Face, S. T. Ruggiero, and D. E. Prober, *J. Vac. Sci. Technol. A* **1**, 326 (1983).
- [9] V. Lacquaniti, S. Maggi, E. Monticone, and R. Steni, *Phys. Stat. Solid (a)* **151**, 335 (1995).

