

## **B.1. Materiales para componentes fotónicos: propiedades estructurales**

### **B.1.1. Introducción**

Existen dos razones fundamentales por las que hemos optado por utilizar fotones para la transmisión de información. La primera de ellas es por sus características muy peculiares que ya hemos descrito (ver Tema B.0) y la segunda es por que el ser humano es sensible justamente a fotones entre las longitudes de onda de  $\lambda=4.000\text{\AA}$  y  $\lambda=8.000\text{\AA}$ . Nuestro cerebro es capaz de procesar esta información óptica a una gran velocidad. Incluso existen algunos colores que preferimos, hecho explotado por la industria del automóvil y la industria cosmética entre otras.

La primera razón es puramente objetiva ya que la elección de la longitud de onda dependerá de la optimización del sistema para una aplicación determinada. La segunda razón es subjetiva ya que está muy restringida por el margen de fotones que aprecia el ojo humano. Por todo ello, los materiales utilizados para generar, manipular y procesar fotones para el procesamiento de información son muy variados y van desde los semiconductores cristalinos hasta el cristal líquido.

En este capítulo vamos a examinar la estructura de materiales optoelectrónicos. Esta estructura que depende de cómo están distribuidos los átomos en el material está íntimamente relacionada con las propiedades ópticas y electrónicas del material. Para la mayoría de los materiales optoelectrónicos la estructura debe cuidarse con sumo detalle para que su calidad sea excelente.

### **B.1.2. Estados de la materia: orden**

Sabemos que se pueden distinguir en principio tres estados de la materia: sólido, líquido y gaseoso. Para nuestro propósito caracterizaremos el material por el orden existente entre sus átomos. Este orden se puede definir como la característica del material tal que si conocemos la posición espacial exacta de unos cuantos átomos podemos predecir la posición y naturaleza química de todos los demás átomos. En ese caso diremos que la estructura tiene un orden de largo alcance. Los sólidos que presentan este tipo de orden los llamaremos cristales.

Llamaremos sólidos policristalinos a los que presentan una gran región de átomos ordenados pero existen diferentes regiones en el mismo sólido. Además las regiones están separadas por lo que se llama un borde o frontera. En dicho borde o frontera tendremos unos cuantos átomos desordenados sin orden alguno. El tamaño de dichas regiones con orden se llama tamaño del grano siendo este tamaño del orden de algunas micras.

También existen materiales cuyo orden en los átomos se pierde al cabo de unos cuantos átomos. En dichos casos estaremos ante un material amorfo.

Otro estado de la materia es el cristal líquido. El cristal líquido se comporta como un líquido en el sentido en que adopta la forma del contenedor donde se encuentra aunque sus moléculas o átomos forman regiones de orden de largo alcance. Este orden se puede romper mediante un campo eléctrico y de esta manera alterar sus propiedades ópticas.

**B.1.3. Materiales cristalinos**

La mayoría de los materiales utilizados en la fabricación de componentes fotónicos son cristalinos. Básicamente son semiconductores los que se utilizan para la fabricación de dispositivos, pero también existen algunos materiales ferroeléctricos y dieléctricos.

<b>Materiales optoelectrónicos: Cristales sólidos</b>	
<u>semiconductores</u>	<u>ferroeléctrico / dieléctrico</u>
Dispositivos electrónicos para el control	Modulación de luz / interruptores de luz
Dispositivos de detección de luz	Almacenamiento de información óptico
Dispositivos de emisión de luz	
Dispositivos de modulación de luz / interruptores de luz	

Los materiales semiconductores se encuentran en la naturaleza formando una llamada estructura cristalina. Según esta estructura, los átomos del material semiconductor se encuentran distribuidos espacialmente formando una estructura regular (celosía, enrejado o “lattice”).

Sin embargo, los átomos no ocupan en el espacio posiciones fijas, sino que debido a las vibraciones térmicas están situados o localizados alrededor de esta posición. Para un material semiconductor dado, hay una estructura básica llamada celda unidad, a partir de la cual es posible mediante repetición tridimensional construir la estructura propia del cristal. En la siguiente figura se recogen tres tipos diferentes de celdas unidad en un cristal de tipo cúbico.

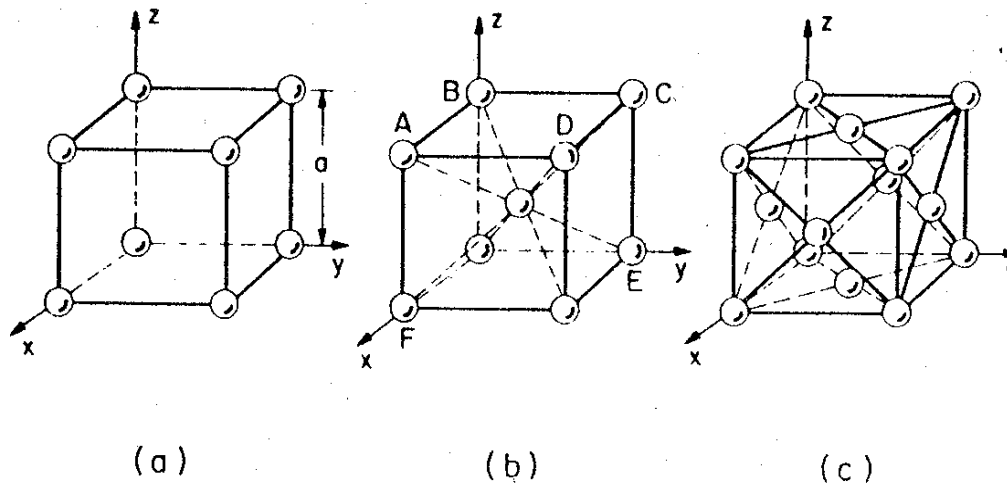


Fig. B.1.1: Tres tipos diferentes de celdas unidad en un cristal cúbico. (a) Celda de cubo simple. (b) Celda cúbica centrada en el centro. (c) Celda cúbica centrada en las caras.

2.a) Celda de cubo simple: En ella cada átomo del material ocupa los ocho vértices (aristas) del cubo. La cantidad  $a$  es llamada constante de la estructura. El Polonio cristaliza en esta forma.

2.b) Celda cúbica centrada en el centro: En esta estructura, además de los ocho átomos de las aristas hay uno ocupando el centro de la celda. Es la celda tipo (bcc) (body-centered-cubic). Ejemplos son el sodio y el wolframio o tungsteno.

2.c) Celda cúbica centrada en las caras: En este tipo de celda, además de los ocho átomos de las aristas se encuentran seis átomos más, localizados en el centro de cada cara. Es la celda de tipo (fcc) (face-centered cubic). Cada átomo tiene 12 vecinos. Ejemplos son el aluminio, cobre, oro y platino.

Los elementos semiconductores tales como el germanio y el silicio presentan una estructura cristalina del tipo del diamante. Dicha estructura puede ser vista como dos estructuras (fcc) encajadas con un desplazamiento de una con respecto a la otra de  $1/4$  de la distancia a lo largo de la diagonal del cubo ( $(\sqrt{3}/4) \cdot a$ ). En este caso, cada átomo del semiconductor está rodeado de cuatro átomos equidistantes configurando los vértices de un tetraedro.

La estructura del zinc es idéntica a la del diamante salvo que cada estructura (fcc) constituyente está formada por átomos de valencia diferente. A dicha estructura pertenecen materiales semiconductores del tipo del arseniuro de galio (AsGa) en que una de las estructuras (fcc) tiene átomos de Ga (III columna) y la otra de As (V columna).

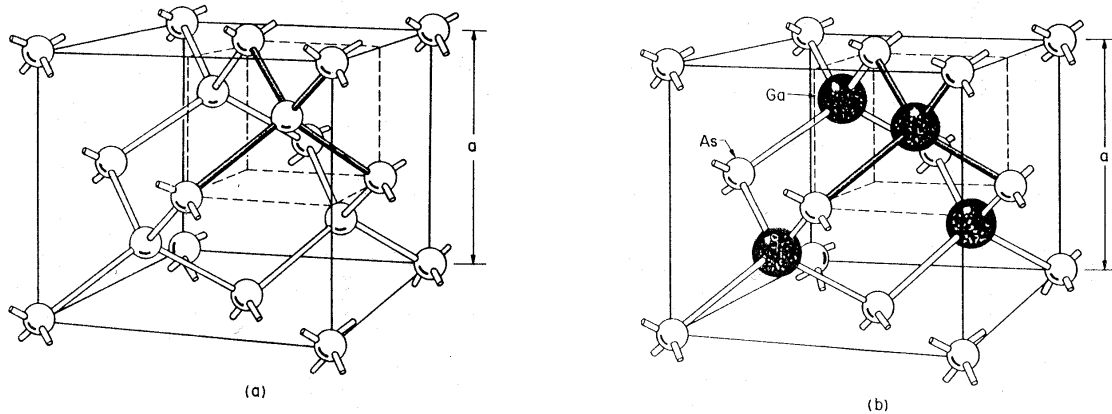


Fig. B.1.2: (a) Estructura cristalina del tipo del diamante. (b) Estructura cristalina del tipo del zinc.

Una clase importante de materiales utilizados en optoelectrónica son los llamados cristales ferroeléctricos. Un material ferroeléctrico se caracteriza por la presencia de un momento dipolar eléctrico incluso en ausencia de un campo eléctrico externo. Por tanto, en cristales ferroeléctricos, el centro de la carga positiva del cristal no coincide con el centro de la carga negativa. En un material con la estructura cristalina de tipo zinc como el GaAs (un material optoelectrónico importante), debido a la transferencia de carga, el átomo de Ga (del grupo III de la tabla periódica) está cargado negativamente (por lo que se le llama anión) mientras que el átomo de As (del grupo V de la tabla periódica) está cargado positivamente (por lo que se le llama catión). Sin embargo, no existe un dipolo eléctrico neto en el cristal debido a que en esta estructura los aniones y cationes están situados de tal forma que el centro de la carga positiva y el de la carga negativa coinciden al considerar todos los átomos. Podría presentarse un dipolo neto si, por ejemplo, la subestructura de Ga entera se moviese con respecto a la de As. Dicho desplazamiento no ocurre en el GaAs pero sí en determinados materiales.

Los cristales ferroeléctricos se producen principalmente debido a dos efectos:

- 1) La situación de los iones es tal que se produce un dipolo eléctrico neto.
- 2) El desplazamiento de una subestructura con respecto a la otra produce un dipolo neto.

Algunos materiales ferroeléctricos tienen presente hidrógeno o deuterio. El movimiento del protón en el hidrógeno o deuterio puede ser la causa del efecto ferroeléctrico.

Una clase importante de cristales ferroeléctricos es la categoría de la estructura "perovskita" presente en materiales como el titanato de bario ( $\text{BaTiO}_3$ ). Se trata de una estructura cúbica con iones  $\text{Ba}^{2+}$  en las esquinas del cubo, iones  $\text{O}^{2-}$  en los centros de las seis caras del cubo y un ión de  $\text{Ti}^{4+}$  en el centro del cubo. En ausencia de cualquier deformación y campo eléctrico, el material no tiene dipolo eléctrico neto pero se puede desarrollar un dipolo si hay un desplazamiento de los iones. En la siguiente figura se muestra cómo puede tener lugar dicho desplazamiento. El desplazamiento neto puede variar del orden de  $0,1\text{Å}$  a  $1\text{Å}$ .

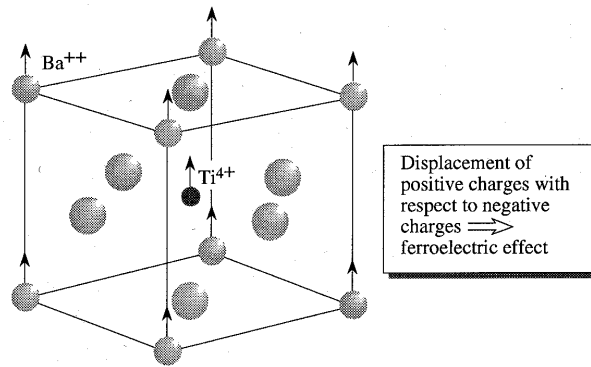


Fig. B.1.3: Desplazamiento de cargas lo que provoca un dipolo eléctrico. Esto se llama efecto ferroeléctrico.

Hasta ahora sólo hemos descrito estructuras naturales. Como las propiedades ópticas y electrónicas del semiconductor están totalmente determinadas por la estructura cristalina se ha estudiado la posibilidad de generar **estructuras cristalinas artificiales** para conseguir propiedades ópticas y electrónicas determinadas. Los estudios que más han avanzado son los de hetero-epitaxis que son crecimientos de materiales diferentes uno sobre el otro. Esto permite crecimientos de heteroestructuras de dos materiales A y B alternativamente con grosores determinados  $d_A$  y  $d_B$  (superestructuras). La precisión en los valores de  $d_A$  y  $d_B$  es tal que se han conseguido capas con grosor de un solo átomo. Debemos resaltar que las heteroestructuras más ampliamente utilizadas no son superestructuras sino que son utilizadas para conseguir un pozo de potencial cuántico. En estas, una única capa de semiconductor se coloca entre dos capas de material con una mayor anchura de la banda prohibida. Dichas estructuras permiten utilizar los efectos cuánticos, lo cual puede ser muy útil en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.

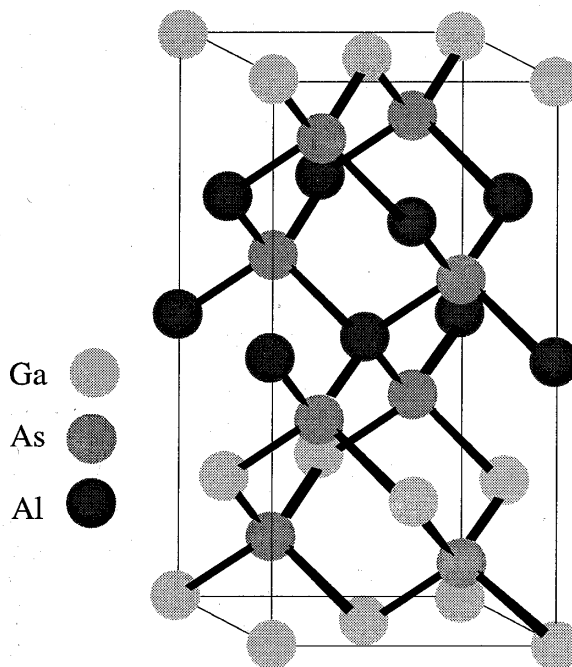


Fig. B.1.4: Una superestructura de átomos de  $(GaAs)_2(AlAs)_2$  con crecimiento a lo largo de la dirección (001) (eje z).

### B.1.4. Interfases

Las superficies de las interfases son una parte muy importante del dispositivo. Ya se ha visto el concepto de heteroestructuras y superestructuras, las cuales están relacionadas con interfases entre dos semiconductores. Estas interfases suelen ser de alta calidad, sin apenas enlaces rotos (excepto posibles dislocaciones). Aún así existe una discontinuidad en dichas interfases de una o dos capas de átomos, la cual es producida por la no idealidad del proceso de crecimiento o a un control impreciso en la conmutación entre las dos especies de semiconductor. El esquema general de dicha discontinuidad se muestra en la siguiente figura para interfases de crecimiento epitaxial. La cristalinidad y periodicidad se mantiene en la estructura subyacente, pero las especies químicas están desordenadas en la superficie de la interfase. Dicho desorden es bastante importante en muchos dispositivos fotónicos y electrónicos.

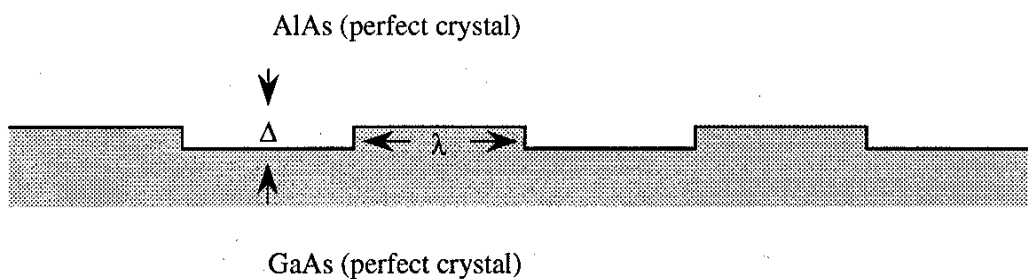


Fig. B.1.5: Esquema de una interfase entre materiales con la misma red cristalina como GaAs / AlAs. La interfase se caracteriza por las islas de altura  $\Delta$  y anchura  $\lambda$ .

Una de las interfases más importantes en electrónica es la interfase Si/SiO<sub>2</sub>. Esta interfase y su calidad es la principal responsable de la revolución que ha sufrido la electrónica de consumo moderna. Esta interfase representa una situación en que dos materiales con estructuras cristalinas muy diferentes se unen. A pesar de estas grandes diferencias, la calidad de la interfase es bastante buena. Dicha interfase presenta una región amorfa o desordenada de unas pocas capas de átomos en que hay presentes fluctuaciones en las especies químicas (y consecuentemente en la energía potencial) a lo largo de la interfase. Esta discontinuidad es la responsable de la reducción de la movilidad de los electrones y los huecos en los dispositivos MOS.

Por último tenemos las interfases entre los metales y los semiconductores. Dichas interfases se producen a elevadas temperaturas mediante complejas reacciones químicas que producen la difusión de elementos metálicos. Este tipo de interfases cubren regiones de anchura superior a varios cientos de Angstroms formando una compleja estructura no cristalina.

### B.1.5. Materiales policristalinos

Los materiales policristalinos son ampliamente utilizados en tecnología electrónica y optoelectrónica. Las estructuras policristalinas se producen cuando un material se deposita

sobre un sustrato que no tiene una estructura cristalina similar. Por ejemplo, si se deposita una película metálica sobre un semiconductor, la película crece en una forma policristalina.

Las películas policristalinas se caracterizan por el tamaño promedio del grano. Dentro de un grano los átomos se sitúan como en un cristal, es decir, perfectamente ordenados. Sin embargo, cada grano está limitado por una región con gran cantidad de defectos. Estos defectos se deben a roturas de enlaces o enlaces entre átomos no completados. Los diferentes granos en el policristal no tienen en esencia ningún tipo de orden entre los átomos que los constituyen.

Dependiendo del proceso de crecimiento y diferencias entre el sustrato y la película depositada, el tamaño del grano del policristal puede variar desde 0,1µm hasta 10µm o incluso más. Si el tamaño del grano supera los 10µm, para determinadas aplicaciones el material podría ser considerado como cristalino.

La presencia de estas regiones límite o bordes del grano afecta directamente a las propiedades eléctricas y ópticas del material. De hecho, determinados dispositivos como diodos emisores de luz (LEDs) o diodos láser (LDs) no pueden ser fabricados a partir de materiales policristalinos. Sin embargo, algunos transistores utilizados para el control de visualizadores sí se pueden fabricar a partir de estos materiales. La ventaja fundamental de los materiales policristalinos es su precio más económico. Esto es debido al bajo coste del proceso de deposición de la película y a la gran área que ésta puede llegar a tener. Por tanto, la tecnología policristalina es importante en visualizadores (TV, ordenadores personales y portátiles, etc).

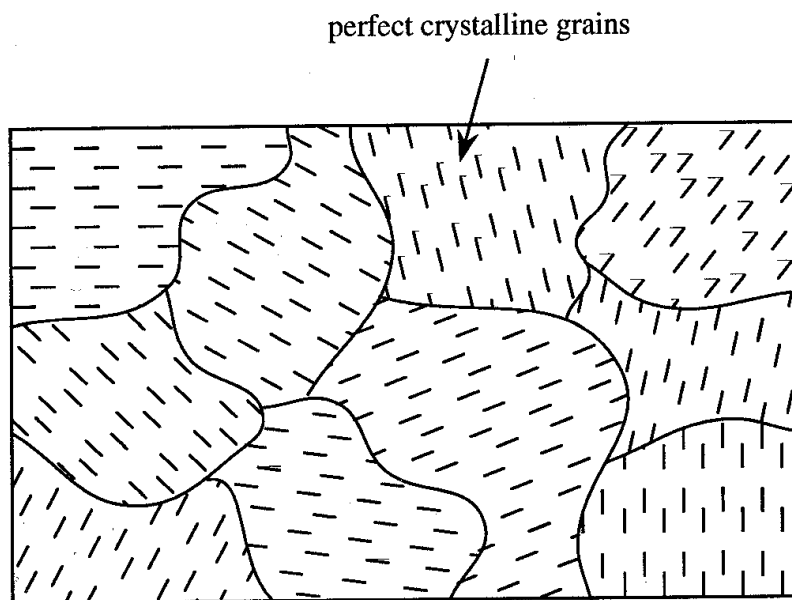


Fig. B.1.6: Estructura policristalina. Está compuesta por regiones en que los átomos están ordenados llamadas granos, no existiendo orden entre los distintos granos. Los límites del grano son regiones con defectos producidos por enlaces rotos o incompletos.

Debemos mencionar el PLZT ( $\text{PbZrO}_3\text{-PbTiO}_3\text{-La}_2\text{O}_3$ ) un material policristalino extremadamente importante en aplicaciones optoelectrónicas. Este material es un óxido



cerámico con propiedades ferroeléctricas. Mientras materiales electro-ópticos cristalinos sencillos como el KDP, BaTiO<sub>3</sub> y Gd(MoO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> que son muy importantes, están limitados por su coste, tamaño y sensibilidad a la humedad, los materiales cerámicos policristalinos no se ven afectados por estas limitaciones. La tecnología de fabricación del PLZT está altamente desarrollada en la actualidad y el material se utiliza para muchos componentes fotónicos.

### B.1.6. Materiales amorfos

En materiales amorfos el orden entre átomos es aun menor que en los materiales policristalinos. Los materiales amorfos más importantes en tecnología optoelectrónica son los basados en el SiO<sub>x</sub> (con diferentes sustancias dopantes) y los semiconductores amorfos como el Silicio amorfo (a-Si).

Los materiales amorfos se caracterizan por un buen orden a corto rango, pero un pobre orden a gran escala. Es decir, en los materiales amorfos los átomos vecinos aún están sujetos a perfecto orden cristalino, mientras que tres átomos más allá el orden ya se ha perdido. La disposición de los átomos es impredecible cuando nos alejamos hasta el tercer átomo vecino o más allá. Además el material amorfo puede tener una gran cantidad de enlaces rotos.

El material amorfo más importante en óptica es, por supuesto, el vidrio que es la materia prima para las lentes, prismas, fibra óptica, etc. El vidrio está fabricado a partir de algunos de los elementos más abundantes en la corteza terrestre, como es el oxígeno (62% de la corteza terrestre) y el silicio (21% de la corteza terrestre). En el vidrio, los átomos de silicio y oxígeno forman una estructura no cristalina pero que tienen un buen orden entre los átomos vecinos más próximos.

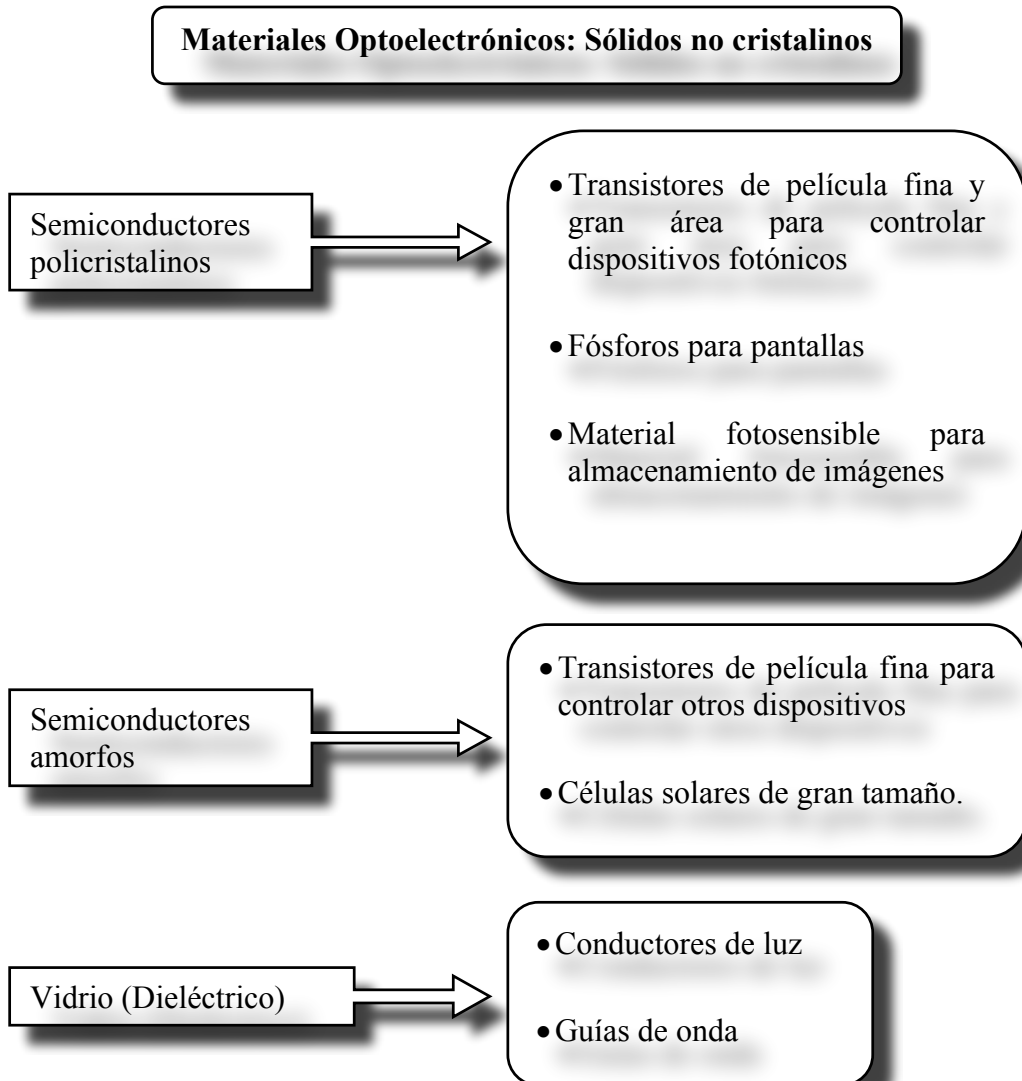
El vidrio generalmente está formado por un componente que constituye la base de la red - el formador de red- y un componente que puede introducir sutiles cambios en las propiedades del vidrio - el modificador de la red. En la siguiente tabla se muestran algunos importantes formadores y modificadores de la red:

Formador básico de la red	Modificador de la red
SiO <sub>2</sub>	K <sub>2</sub> O
B <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MgO
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO
Na <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	PbO



Así, en el caso del vidrio, basado en  $\text{SiO}_2$ , la introducción de una u otra sustancia dopante puede modificar su índice de refracción.

Los silicatos (vidrios que tienen silicio en su composición) son los materiales más utilizados debido a los altos niveles de pureza que se pueden obtener sobretodo en lo que respecta a la fibra óptica. Los vidrios basados en  $\text{B}_2\text{O}_3$  y  $\text{N}_2\text{O}_3$  se utilizan en otras aplicaciones industriales. Los modificadores de la red se pueden utilizar para modificar el índice de refracción del vidrio y mediante su introducción controlada se pueden conseguir variaciones espaciales del perfil de dicho índice.



Otra estructura de gran importancia que ya hemos mencionado es el silicio amorfo o a-Si debido a su uso en la tecnología de las células solares y visualizadores. En la siguiente figura podemos comparar las estructuras del silicio cristalino y del a-Si.

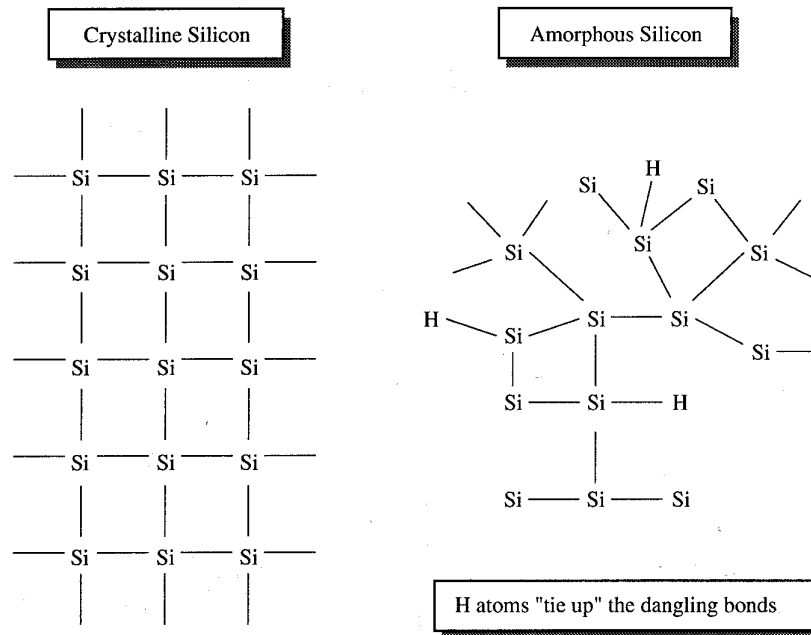


Fig. B.1.7: Orden del silicio cristalino y el silicio amorfo. Al silicio amorfo se han añadido átomos de hidrógeno para que no pierda sus propiedades eléctricas.

El silicio cristalino posee 4 enlaces con sus cuatro átomos vecinos, muchos de los cuales están rotos en el caso del silicio amorfo. Una gran cantidad de enlaces rotos puede hacer que el material sea inactivo eléctricamente. Para evitar que estos enlaces rotos hagan inútil el material en su aplicación a componentes optoelectrónicos se incorporan gran cantidad de átomos de hidrógeno (o flúor) dentro de la película en el proceso de crecimiento del a-Si. La presencia de estos átomos de H hace desaparecer estos enlaces rotos mejorando las propiedades del a-Si. El silicio amorfo hidrogenado se llama a-Si:H.

Una importante diferencia entre materiales amorfos y cristalinos es en lo que respecta a la simetría macroscópica del material. Los cristales son anisótropos (sus propiedades dependen de la dirección) mientras que los materiales amorfos son isotrópodos. A algunos materiales policristalinos como el PLZT se les puede dar propiedades optoelectrónicas anisótropas. La anisotropía de los cristales se caracteriza por la existencia de planos a lo largo de los cuales es fácil partir el cristal.

### B.1.7. Cristales líquidos

El cristal líquido es uno de los materiales más fascinantes de la naturaleza. Por una parte tiene las propiedades de los líquidos (tales como baja viscosidad y capacidad de adoptar la forma de su contenedor) y por otra parte las de un cristal sólido. Su habilidad para modular la luz cuando se le aplica un campo eléctrico lo ha hecho insustituible en las tecnologías de visualizadores planos.

Ya hemos visto que los materiales cristalinos tienen propiedades anisótropas (se ven diferentes según desde donde se miren) mientras que los materiales no cristalinos y los

líquidos son isótropos. El cristal líquido tiene propiedades anisótropas similares a las de los cristales sólidos debido a la forma en la que algunas de las moléculas constituyentes se ordenan. Sin embargo, el cristal líquido presenta una baja viscosidad y puede fluir. El cristal líquido es, esencialmente, una fase estable de la materia llamada "mesofase" entre la fase sólida y la líquida.

Existen multitud de cristales líquidos que se puedan fabricar y están formados básicamente por moléculas orgánicas en forma de barra o de disco de longitudes entre los 20Å y los 100Å. En la siguiente figura se muestra una molécula orgánica típica, el p-azoxyanisol (PAA). Esta molécula en forma de barra tiene una longitud de alrededor de 20Å y una anchura de 5Å. Una ordenación perfecta de dicho tipo de moléculas da lugar a un cristal sólido (b). Por otra parte, a altas temperaturas se pierde ese orden pasando a un estado líquido. La orientación de las moléculas define el "director" del cristal líquido. Las diferentes formas de organizarse de las moléculas nos lleva a definir tres tipos diferentes de cristales líquidos.

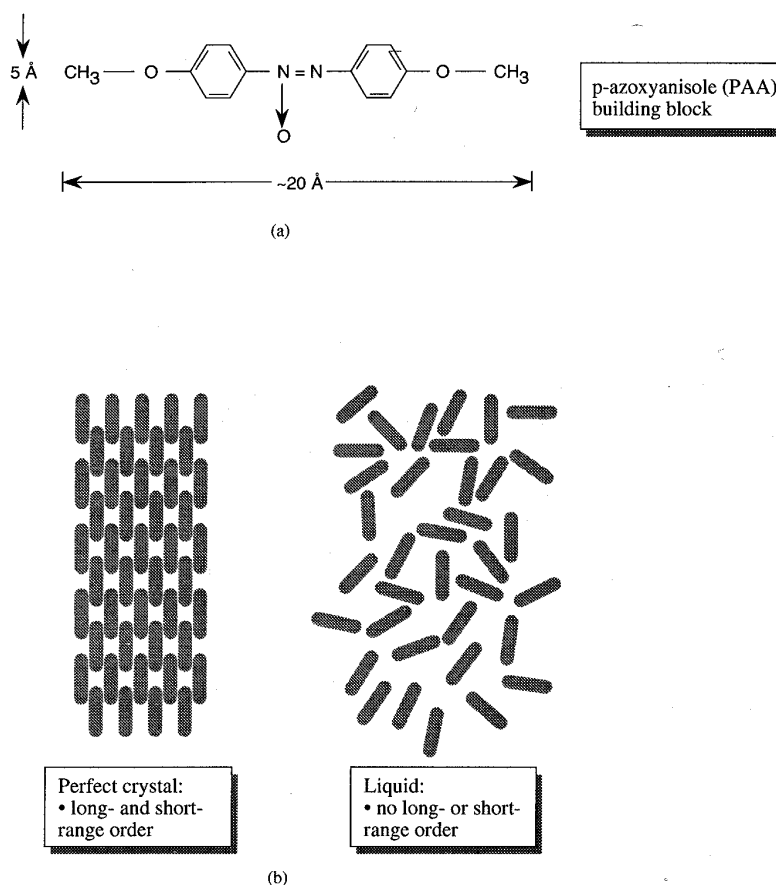


Fig. B.1.8: Compuesto clásico de una molécula de cristal líquido. Esquema de un cristal perfecto y un líquido.

La primera categoría agrupa a las moléculas que adoptan una estructura de tipo esméctica. En este caso las moléculas están ordenadas en capas y dentro de cada capa existe un orden de largo alcance. En una capa determinada todas las moléculas están orientadas en la misma dirección. Aparte de esto, las moléculas presentan un orden posicional. Por tanto, en los cristales esmécticos existe tanto orden en la orientación como en la posición.

La segunda categoría es la estructura nématica. En esta estructura el orden en la orientación se mantiene pero el orden posicional entre las capas de moléculas se pierde.

La tercera categoría de cristales líquidos se llama colestérica. En estos cristales líquidos las moléculas de una capa están orientadas con un ángulo diferente una respecto a las de otra capa. El orden en la orientación se mantiene dentro de cada capa.

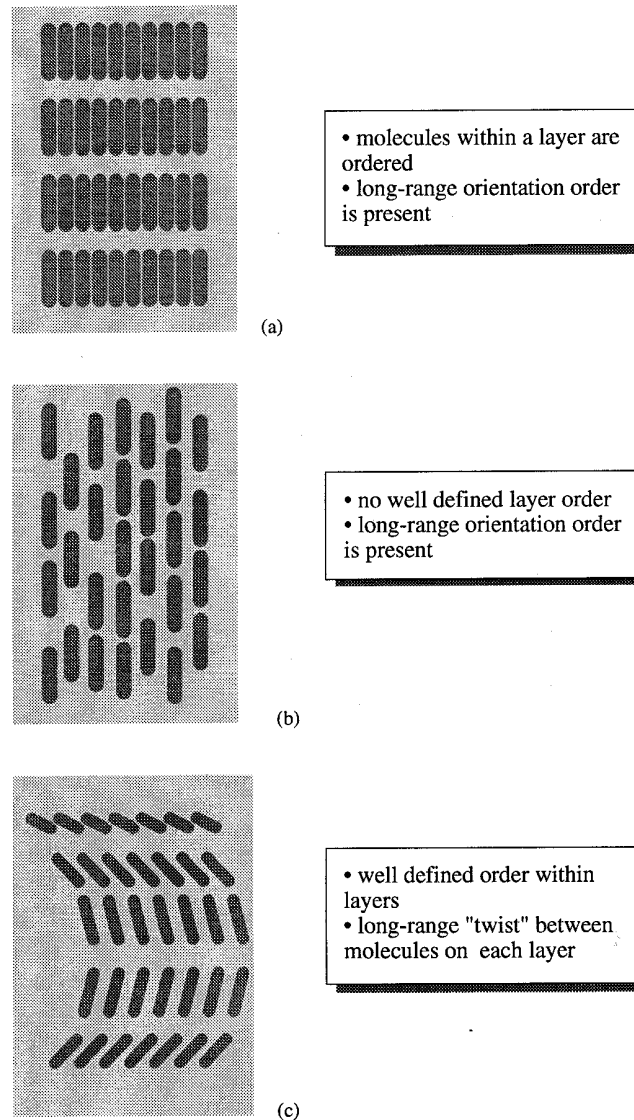


Fig. B.1.9: Las tres categorías de cristal líquido (a) esméctico, (b) nemático y (c) colestérico.

Además del orden en la orientación en cada capa existe otra característica en los cristales esmécticos y es la girabilidad que permite definir subcategorías. Esta característica hace referencia al giro relativo entre moléculas. La actividad óptica de los cristales depende de su orientación así como del giro presente en las capas moleculares.

Para que el cristal líquido sea útil en aplicaciones ópticas y optoelectrónicas, es importante que la anisotropía presente en el cristal de lugar a una anisotropía óptica y que seamos capaces de controlar dicha anisotropía mediante señales eléctricas externas. En

dispositivos optoelectrónicos de baja potencia es importante que las moléculas constituyentes del cristal líquido presenten alguna propiedad que les proporcione una interacción fuerte con la luz. Con este propósito se utilizan materiales ferroeléctricos en la preparación de cristales líquidos. Como se comentó con anterioridad dichos materiales presentan un dipolo eléctrico neto incluso en ausencia de aplicación de un campo eléctrico. Como consecuencia, presentarán una fuerte interacción con la luz.

Para explotar completamente el potencial de los cristales líquidos hay que comprender la interacción del líquido con las superficies cercanas. Se ha observado que si la superficie de una placa de vidrio es frotada en una determinada dirección (con un paño por ejemplo), las moléculas de la superficie de la placa se alinean en la dirección de frotamiento. Consideremos ahora que se frota una segunda placa de vidrio y se sitúa a una distancia entre  $5\mu\text{m}$  y  $20\mu\text{m}$  de la anterior. La orientación de las moléculas superficiales de las dos placas puede ser seleccionada previamente a partir de la dirección de frotamiento. El resultado es un giro de las moléculas del cristal líquido cuando se va desde una placa a la otra. Tales sistemas se llaman sistemas nemáticos girados y se pueden conseguir giros de hasta  $90^\circ$ . Si el ángulo de giro se incrementa, la película es inestable si se utilizan cristales nemáticos. En dicho caso, si se desea por ejemplo un giro de  $270^\circ$ , el estado estable utilizando cristales nemáticos es con un giro de  $-90^\circ$ . Sin embargo, si se utilizan cristales líquidos colestéricos en los cuales ya hay un giro incorporado, el giro de  $270^\circ$  sí es posible. Tales estructuras son llamadas estructuras supergiradas.

La orientación de las moléculas del cristal líquido además puede ser modificada por un campo eléctrico. Esto de hecho modifica sus propiedades ópticas haciendo que se puedan utilizar como válvulas ópticas.

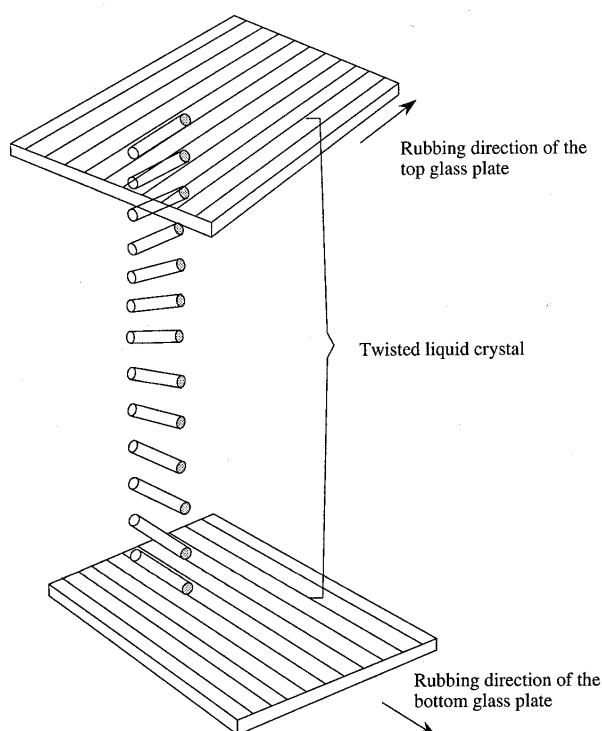


Fig. B.1.10: Sistema nemático girado.

## B.1.8. Defectos en los materiales

En los apartados anteriores se han comentado las propiedades de una estructura cristalina perfecta. En materiales reales, la invariabilidad de la estructura cristalina tiene algunos defectos (nada en la vida es perfecto) que son introducidos debido o bien a consideraciones termodinámicas o bien a la presencia de impurezas durante el proceso de crecimiento cristalino. En general, los defectos en los semiconductores cristalinos pueden ser clasificados en: i) defectos puntuales, ii) defectos lineales, iii) defectos superficiales y iv) defectos volumétricos. Estos defectos van en detrimento del buen funcionamiento de los dispositivos electrónicos y fotónicos y han de ser evitados en la medida de lo posible.

### i) Defectos puntuales

Un defecto puntual es un defecto altamente localizado que afecta la periodicidad del cristal en una sola o unas pocas celdas unitarias. Hay varios defectos puntuales definidos, como se muestra en la siguiente figura. Uno de ellos es la ausencia de un átomo de la estructura. Otro defecto puntual es la sustitución. Así por ejemplo, en semiconductores compuestos tales como el GaAs un átomo de Ga puede sustituir a uno de As en la subestructura de arsénico en lugar de estar en la subestructura de galio. Esto afecta directamente al buen funcionamiento del material. Otros defectos puntuales son los llamados defectos intersticiales en que un átomo se sitúa entre los puntos de la estructura, por lo que en algunos casos deforma la red a su alrededor afectando a varias celdas contiguas.

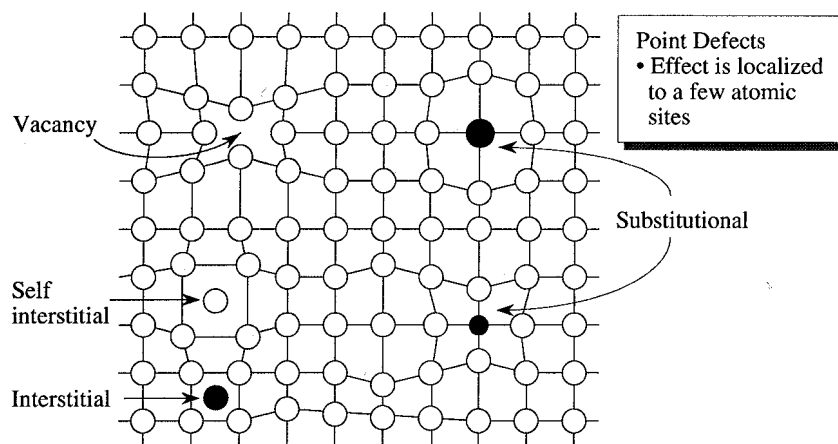


Fig. B.1.11: Esquema donde se muestran varios de los defectos puntuales posibles.

### ii) Defectos de línea o dislocaciones

En contraposición a los defectos puntuales, los defectos de línea, también llamados dislocaciones, involucran a un gran número de átomos conectados en línea. Las dislocaciones se producen si, por ejemplo, un semiplano extra de átomos es insertado (o eliminado) del cristal. Tales dislocaciones son llamadas dislocaciones de borde ya que a los átomos del extremo o borde del plano extra les falta un enlace.

Las dislocaciones pueden ser un problema serio en heteroestructuras en que la estructura es diferente en la capa superior que en el sustrato. En dispositivos optoelectrónicos, las dislocaciones pueden arruinar el funcionamiento del dispositivo siendo de gran importancia su control.

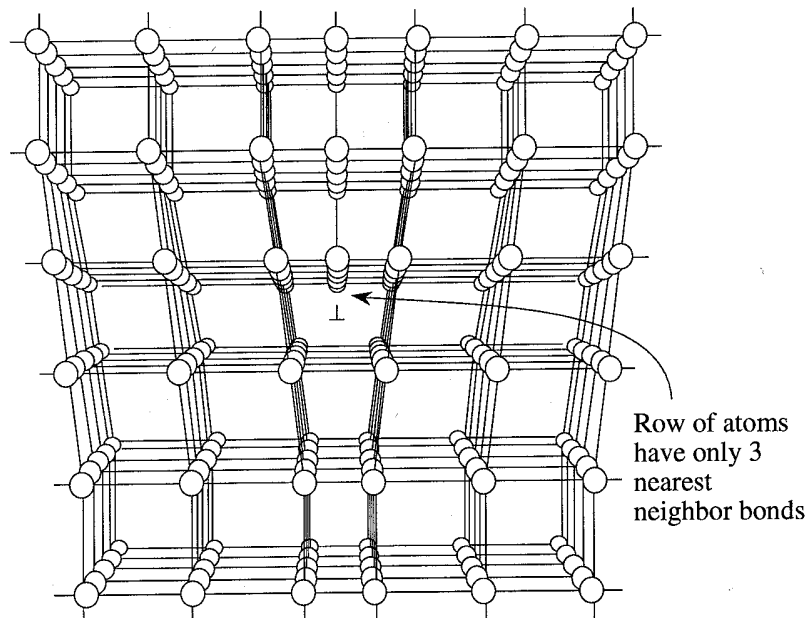


Fig. B.1.12: Esquema de una dislocación. Este defecto de línea se produce cuando se añade un semiplano extra de átomos. A los átomos del borde (extremo) del plano extra les falta un enlace.

### iii) y iv) Defectos superficiales y volumétricos

Los defectos superficiales y volumétricos no son importantes en materiales cristalinos sencillos pero sí en materiales policristalinos. Esto es debido a que estos defectos aparecen al unir materiales amorfos (como el vidrio) con cristales. Si, por ejemplo, sobre un sustrato de vidrio se produce el crecimiento del silicio, se producirá silicio policristalino. En el material policristalino, tenemos pequeñas regiones de pocas micras de diámetro perfectamente cristalinas llamadas granos las cuales podemos considerar como "microcristales". Los distintos "microcristales" presentan distintas orientaciones. La interfase entre estos "microcristales" constituye los límites del grano. Estos límites del grano pueden ser vistos como un conjunto de dislocaciones que constituyen los llamados defectos superficiales.

Los defectos volumétricos se producen cuando el proceso de crecimiento es de baja calidad. El cristal puede contener regiones que sean amorfas o puede contener vacíos (burbujas). En la mayoría de las técnicas de construcción actuales (epitaxiales), estos defectos no son un problema. Sin embargo, el desarrollo de nuevos materiales tales como el diamante (C) o el SiC está obstaculizado por dichos defectos.



## B.1.9. Nuevas técnicas y nuevos materiales

En este apartado se van a comentar brevemente los importantes retos que se plantean los científicos en los distintos campos descritos en este capítulo.

### Semiconductores cristalinos

En esta área, materiales como Si y GaAs han sido estudiados durante muchos años y, como consecuencia, sus tecnologías están bastante avanzadas. El reto en semiconductores permanece en materiales tales como el GaN, SiC y C (diamante), los cuales tienen una gran anchura de la banda prohibida. Dichos materiales se pueden utilizar en aplicaciones de alta potencia (en la actualidad la mayor parte de las transmisiones de radar, radio y satélite siguen produciéndose todavía mediante el uso de válvulas). Estos materiales pueden también producir luz de longitud de onda muy corta, la cual podría ser utilizada para la lectura de unos "tamaños característicos" más pequeños en CDs pudiendo obtener una mayor densidad de información. El problema de estos materiales es la falta de buenos sustratos (sólo los sustratos del Si, GaAs y InP son de alta calidad) con redes cristalinas congruentes con las suyas, y también debido a las dificultades en el dopado y la gran cantidad de defectos.

Hay muchos retos también en lo que respecta a materiales con una anchura de la banda prohibida pequeña tales como aleaciones de InAs, InSb, HgCdTe, etc. Estos materiales pueden ser utilizados para la detección del infrarrojo lejano (con longitudes de onda del orden de  $14\mu\text{m}$ ) para "visión nocturna" y otras aplicaciones relacionadas con imágenes térmicas. Estos materiales son muy "ligeros" haciendo difícil su fabricación con pocos defectos.

En el área de la heteroepitaxis se han producido numerosos nuevos dispositivos tanto electrónicos como optoelectrónicos. En estos nuevos materiales donde más se intenta avanzar es en producir interfases de alta calidad al unir dos materiales diferentes. Hay un interés considerable en producir estructuras en que un trozo de material de aproximadamente  $100\text{\AA}$  de grosor esté rodeado por otro tipo de material (pozos cuánticos). El objetivo fundamental del estudio de dichas estructuras es la producción de excelentes láseres. También existe un gran interés en la producción de estructuras en que un hilo fino (del orden de  $100\text{\AA} \times 100\text{\AA}$ ) de un determinado tipo de material es rodeado por otro material (hilo cuántico). Tales estructuras tienen previsiblemente propiedades ópticas mucho mejores aunque todavía no se hayan podido observar. También existe interés en producir puntos cuánticos donde un semiconductor de dimensiones aproximadamente  $100\text{\AA} \times 100\text{\AA} \times 100\text{\AA}$  es rodeado completamente de otro tipo de material. En la actualidad, únicamente los pozos cuánticos pueden ser fabricados con facilidad. Las demás estructuras están en su infancia y no se han podido comprobar las previsiones en lo que respecta a sus características ópticas.

Otro importante reto en tecnología de semiconductores es el crecimiento de materiales de alta calidad sobre un sustrato con diferentes propiedades cristalinas. Un ejemplo importante es el crecimiento de GaAs o InP sobre Si. El sustrato de silicio es barato y puede ser producido en grandes tamaños (por encima de 12 pulgadas). Sin embargo, los láseres de semiconductor y detectores de alta velocidad no pueden ser fabricados a partir de silicio. Si materiales tales como GaAs pudiesen ser depositados sobre un sustrato de silicio, el coste de los dispositivos optoelectrónicos podría ser reducido drásticamente. Desgraciadamente, es

muy difícil el crecimiento de un material sobre otro material con una constante de la estructura diferente sin obtener una gran cantidad de dislocaciones.

### Materiales policristalinos y amorfos

Estos materiales se utilizan principalmente cuando se desea un bajo coste y un funcionamiento medianamente bueno. Esto se refiere a células solares de gran tamaño así como los transistores de película fina ("thin film") para visualizadores. Las mejoras en estos materiales es poder reducir cada vez más los defectos, mejorando las cualidades de los materiales sin por ello aumentar los costes.