Revista Tecnocientífica URU

Universidad Rafael Urdaneta Facultad de Ingeniería No. 12 Enero – Junio 2017

Depósito Legal: PPI 201402ZU4464

ISSN: 2343-6360

# Análisis elipsométrico de nanoestructuras híbridas Semiconductor/Metal: Co/AlN/AL<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y AlN/Co/AlN/ AL<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

José R. Fermin<sup>1,1,2</sup>, Dario Rincón<sup>1</sup>, Giovanni Marín<sup>3</sup>, Carlos Chesman Feitosa<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad del Zulia, Maracaibo Venezuela.

<sup>2</sup> Escuela de Ing. Industrial, Facultad de Ingeniería, Universidad Rafael Urdaneta, Maracaibo, Venezuela

<sup>3</sup> Laboratorio de Estructura e Ingeniería de Materiales Nanoestructurados, Centro de Investigación y Tecnología de Materiales, IVIC-Zulia, Maracaibo, Venezuela

<sup>4</sup> Departamento de Física y Tecnología, Universidad Federal de Rio Grande do Norte, Natal, Brasil. jfermin70@gmail.com

#### Resumen

Presentamos un estudio sobre las propiedades ópticas de nanoestructuras híbridas Co(10 nm)/AlN(5 nm) y AlN(10 nm)/Co(10 nm)/AlN(5 nm), crecidas mediante magnetrón evaporación catódica RF asistida por magnetrones, sobre sustratos de  $\alpha$ - $Al_2O_3(0001)$ . La técnica de Espectroscopia Elipsométrica es empleada para obtener los parámetros elipsométricos  $(\Delta,\Psi)$ , y a partir de estos determinar las funciones dieléctricas  $(\epsilon_1,\epsilon_2)$ . La data experimental es analizada en el marco de modelo teórico de capas equivalentes, el cual consiste en las superposiciones parciales de las propiedades semiconductoras del AlN con las propiedades de transporte electrónico del Co. Estos sistemas poseen las propiedades intrínsecas básicas de los elementos constituyentes, sin embargo, para explicar las propiedades ópticas observadas a nivel de la nano-escala es necesario considerar procesos de relajación electromagnética adicionales, tales como dispersión de luz en las capas de AlN. Otro efecto interesante es el desplazamiento de las oscilaciones plasmónicas volumétricas del AlN y Co desde el UV. hacia la banda VIS en la nanoestructura.

**Palabras clave:** Espectroscopía Elipsométrica; Nitruro de Aluminio; Modelo de Capas Equivalentes; Nanoestructuras híbridas; Modelo de Lorentz Dispersivo.

# Ellipsometric analysis of hybrid Semiconductor/ Metal nanostructures: Co/AlN/AL<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and AlN/Co/ AlN/AL<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

#### **Abstract**

Spectroscopic Ellipsometry is employed to characterized the optical properties of Co(10 nm)/AlN(5 nm) and AlN(10 nm)/Co(10 nm)/AlN(5 nm), hybrid nanostructures grown onto  $\alpha$ -Al $_2$ O $_3$ (0001) substrates by RF magnetron sputtering. The ellipsometric angles ( $\Delta$ , $\Psi$ ) and dielectric functions ( $\epsilon_1$ , $\epsilon_2$ ) were determined in energy range 1.5-4.5 eV, and interpreted in the framework of a model of Single Equivalent Layers, which considers the partial superposition of the semiconducting properties of AlN layers and the electric properties

of Co layer. These systems possess the main intrinsic properties of the single constituent elements, however, to explain the observed optical properties at the nanoscale, additional relaxation processes such as the light dispersion by the AlN layers, must be considered. Another interesting feature to be regarded is the energy shift of the AlN and Co bulk plasmonic oscillations from the UV, to the VIS in the nanostructure.

**Keywords:** Spectroscopic Ellipsometry; Aluminum Nitride; Single Equivalent Layers; Hybrid Nanostructures; Dispersive Lorentz Model.

#### Introduccion

En el transcurso de la última década los avances en los estudios de nanotecnología no se han hecho esperar, haciendo de ésta área una de las más amplias en cuanto a investigación y desarrollo. La fabricación de nanoestructuras y los métodos utilizados para su obtención han sido tema de investigación debido a su amplio campo de aplicación. Uno de estos campos es la aplicación en dispositivos de almacenamiento. Algunos de los materiales más estudiados para la producción de semiconductores en forma de películas delgadas son los de la familia III-N, dentro de los cuales se encuentran el GaN, InN y AlN, este último es de especial interés ya que posee el mayor valor en el ancho de banda, 6.2 eV para la fase hexagonal y 5.11 eV para la fase cúbica. La importancia en el estudio de este tipo de materiales se atribuye a su uso en la optoelectrónica, para la fabricación de dispositivos en sensores ópticos en el rango UV, como material piezoeléctrico SAW (Surface Acoustic Wave), como componente en circuitos de alta integración cuando se obtienen películas policristalinas orientadas en el eje c, y por ultimo como alternativa para accionamiento de sistemas micro-electro-mecánicos (MEMS) [1, 2].

Con el emerger de técnicas y métodos experimentales y teóricas cada vez más sofisticados, el interés en el estudio de sistemas nanoestructurados complejos ha llamo la atención de la comunidad científica. Tal es el caso de nanoestructuras híbridas semiconductor/metal basadas en Co/AlN [3]. Estudios sugieren que nanopartículas ó nanocapas de Co incrustadas en matrices con alto índice de reflexión, tal como el AlN, puede incrementar la respuesta magneto-óptico de los sistemas de la nanoestructura. Estos sistemas son considerados de gran importancia tanto desde el punto de vista fundamental como del aplicado, teniendo establecido que tanto el tamaño como la reducción de la simetria del material semiconductor y del metal pueden resultar en un cambio drástico en sus propiedades físicas. Modificar las propiedades ópticas de estos materiales abriría posibilidades tecnológicas, particularmente en dispositivos de almacenamientos de datos de alta densidad, sensores magneto-ópticos, sensores de campo, dispositivas laser, etc.

Para la estabilización de las propiedades físico-químicas de una nanoestructura híbrida es necesario seleccionar el substrato apropiado. En el caso de estructuras basadas en Co y otros metales de transición se ha utilizado substratos de Au [5], Pd(111) [6] ó Cu [7]. Como soporte alternativo, los sustratos de Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> son también utilizados en la deposición de compuestos III-V y II-VI tales como el GaN y AlN para aplicaciones LED y otros microdispositvos electrónicos [4].

En este trabajo presentamos un estudio de las propiedades ópticas de nanoestructuras híbridas semiconductor/metal del tipo AlN/Co sobre substratos de α-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Para esto utilizamos la técnica de la espectroscopía elipsométrica de ángulo fijo, en el rango de energía 1.5 eV hasta 4.5 eV. Este trabajo está organizado de la siguiente manera: en la Sección 2 se describen los métodos experimentales empleados; la Sección 3 presentamos los conceptos y modelos fundamentales para el análisis elipsométrico de nanoestructuras; en la Sección 4, presentamos los resultados y su discusión; la Sección 5 resume los aspectos más relevantes de este trabajo.

### **Metodos experimentales**

Las muestras objeto de estudio en éste trabajo se fabricaron mediante la técnica de Evaporación Catódica Asistida por Magnetrones (ECAM). Dos sistemas de nanoestructuras se obtuvieron: a) bi-capas de Co(10 nm)/AlN(5 nm)/Al $_2$ O $_3$ , y b) tri-capas de AlN(10 nm)/Co(10 nm)/AlN(5 nm)/Al $_2$ O $_3$ . Ambos sistemas se depositaron sobre substratos de  $\alpha$ -Al $_2$ O $_3$  (0001) obtenidos comercialmente. Los substratos fueron sometidos a tratamiento de limpieza con ultrasonido, en baño de metanol durante 10 minutos.

Para la fabricación se utilizó un sistema de evaporación catódica *Balzers/Pfeiffer PLS500*, en la configuración vertical (*sputter-up*), con distancia blanco-substrato de 9 cm. La deposición es asistida por magnetos, con un campo magnetostático entre los imánes de □10 Oe. El protocolo de deposición fue el siguiente: a) una capa de 5 nm de AlN es previamente depositada sobre el substrato, utilizando ECAM reactiva con plasma de Ar+N₂, con frecuencia centrada en 13.5 Mhz; b) sobre la capa de AlN depositamos el Co de espesor de 10 nm de espesor, utilizando deposición con corriente directa; c) para obtener las tri-capas, una última capa de AlN de 10 nm es depositada sobre el Co, sin modificar las condiciones anteriores. La cámara de deposición debe ser mantenida a una presión de base de 1.2 x 10<sup>-7</sup> Torr antes de la deposición, y presión de Ar de 3.3 x 10<sup>-3</sup> Torr, durante todo el proceso. La pureza del argón y de los elementos puros (Al, Co) es de 99.999% y 99.99%, respectivamente. La temperatura del substrato será de 400°C, y con una potencia aplicada de 20 W. El espesor de las películas es controlado mediante un cristal de cuarzo calibrado. Antes de proceder con las medidas experimentales las muestras fueron limpiadas en un baño de ultrasonido con etanol grado analítico durante 10 minutos seguidamente fueron pasados por nitrógeno seco.

Las medidas de elipsometría se realizaron en un Elipsómetro Espectroscópico marca J. A Woollam, Modelo M-2000x, en la configuración esquematizada en la Fig. 1. En esta configuración luz blanca no-polarizada, emitida por una fuente de Xenón de 75 W, pasa por un polarizador, que re-transmite la luz linealmente polarizada con el campo eléctrico paralelo a una dirección preferencial (p, s). La luz incide con un ángulo de 70° y es redirigida hacia un polarizador de rotación continua (analizador). La cantidad de luz detectada dependerá de la orientación del campo eléctrico de la elipse con respecto al eje de analizador. Del detector, la luz es enviada a un sistema electrónico que la convierte en señal digital. Esta información es comparada con la señal de referencia (luz inicial) para determinar los cambios de polarización. Las medidas fueron realizadas en el rango de energías 1.5-4.5 eV a temperatura ambiente. Los parámetros obtenidos del experimento son la variación de amplitud y la diferencia de fase  $(\Psi, \Delta)$  de la radiación reflejada con respecto a las direcciones (p, s).

#### Consideraciones teóricas

Los fundamentos teóricos de la Espectroscopia Elipsométrica han sido ampliamente discutidos en muchos textos y trabajos clásicos [8,9]. Sin embargo, en este trabajo discutimos algunos de los conceptos teóricos necesarios para la interpretación adecuada de una medida de elipsometría en películas delgadas y nanoestructuras complejas.

La señal de elipsometría es determinada a través de la reflectancia en términos de los parámetros elipsométricos  $(\Psi, \Delta)$ . Teóricamente, la reflectancia se expresa en términos de los coeficientes de Fresnel  $R_{ps}$  en las direcciones (p, s), mediante la función compleja,

$$\widetilde{\rho} = \frac{R_p}{R_s} = \tan(\Psi) \exp(i\Delta) = \rho_1 + i\rho_2 \tag{1}$$

donde  $tan(\Psi)$ , y  $\Delta$ , son la amplitud relativa y la diferencia de fase entre las componentes (p,s) de la luz reflejada. La interacción de la materia con la radiación electromagnética es descrita mediante la función dieléctrica compleja, dada por la expresión,

$$\widetilde{\varepsilon}(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) = \sin^2 \Phi_0 \left[ 1 + \tan^2 \Phi_0 \left( \frac{1 - \widetilde{\rho}}{1 + \widetilde{\rho}} \right)^2 \right]$$
(2)

donde  $\Phi_0$  es el ángulo de incidencia. Las componentes de la función dieléctrica contienen toda la información relevante sobre las propiedades ópticas de la materia, y se obtienen del experimento combinando con la función compleja (1). Después del álgebra, expresamos las componentes de la función dieléctrica (2) mediante las ecuaciones,

$$\varepsilon_1(\omega) = \sin^2 \Phi_0 \left[ 1 + \tan^2 \Phi_0 \left( a^2 - b^2 \right) \right] \tag{3}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -2\sin^2\Phi_0 a b \tan^2\Phi_0 \tag{4}$$

siendo,

$$a = \frac{(1 - \rho_1) \quad (1 + \rho_2) + \rho_2^2}{(1 + \rho_1)^2 - \rho_2^2}$$
(5)

$$b = \frac{2\rho_1 \quad \rho_2}{(1+\rho_1)^2 - \rho_2^2} \tag{6}$$

Esto parece una tarea simple, sin embargo en una nanoestructura el análisis de estas funciones no es trivial, requiriendo de modelos teóricos realísticos que incorporen los efectos de cada sub-elemento de la nanoestructura y que permitan comprender los mecanismos físicos responsables de los procesos de absorción óptica. En las siguientes secciones discutiremos algunos de los modelos más básicos para la interpretación de un espectro elipsométrico en nano-estructuras híbridas semiconductor/metal

#### Absorción óptica en semiconductores. Modelo de osciladores de Lorentz

La absorción óptica en semiconductores está fuertemente ligada a las transiciones directas e indirectas en su estructura de bandas. Estas transiciones a su vez están relacionadas con las oscilaciones armónicas atómicas, de origen electrónico. Para comprender mejor el significado de la ecuación (2), consideremos un sistema de dipolos eléctricos de carga e y masa m, oscilando armónicamente con frecuencia natural  $\omega_0$  cuando son sometidos a la acción de un campo electromagnético polarizante  $E(\omega, t)$ =  $E \exp(-i\omega t)$ . La ecuación de movimiento de este sistema es,

$$m\frac{\partial^2 r}{\partial t^2} + m\gamma\frac{\partial r}{\partial t} + m\omega_0^2 r = -eE \exp(-i\omega t)$$
(7)

donde  $\gamma$  es la constante de amortiguamiento, ó dispersiva del medio. La solución de la Ec. (7) es

$$r = \frac{-eE/m}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega} \tag{8}$$

La respuesta de estos dipolos viene determinada por la polarizabilidad, P,

$$P = -\frac{erN}{V} = \frac{(e^2N/mV)E}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\gamma\omega}$$
(9)

Por otro lado, de las relaciones constitutivas del campo electromagnético corregidas,  $P = P_0 + \chi_e E$  y  $\varepsilon = 1 + 4\pi\chi_e$ , donde  $P_0$  es la contribución de la matriz semiconductora a las propiedades del material,  $\varepsilon$  la función dieléctrica compleja del medio y  $\chi_e$  la susceptibilidad eléctrica. Con esto, obtenemos las funciones dieléctricas

$$\widetilde{\varepsilon}(\omega) = (1 + \varepsilon_0) + 4\pi \frac{(e^2 N / mV)}{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right) - i\gamma\omega} = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \tag{10}$$

$$\varepsilon_{1} = (1 + \varepsilon_{0}) + \frac{4\pi e^{2}N}{mV} \frac{(\omega_{0}^{2} - \omega^{2})}{(\omega_{0}^{2} - \omega^{2})^{2} + \gamma^{2}\omega^{2}}$$
(11)

$$\varepsilon_2 = \frac{4\pi e^2 N}{mV} \frac{\gamma \omega}{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \gamma^2 \omega^2} \tag{12}$$

ó, en términos de la energía del fotón, E,

$$\varepsilon_1 = (1 + \varepsilon_0) + \frac{\left(E_0^2 - E^2\right)E_P^2}{\left(E_0^2 - E^2\right)^2 + E_\gamma^2 E^2} \tag{13}$$

$$\varepsilon_2 = \frac{E_P^2 E_{\gamma} E}{\left(E_0^2 - E^2\right)^2 + E_{\gamma}^2 E^2} \tag{14}$$

donde  $E_0$  es la energía de las transiciones electrónicas de interbanda,  $E_\gamma$  la energía dispersada y  $E_p = 4\pi e^2 N\Box^2/m^*V$  es la energía de las oscilaciones armónicas de los dipolos atómicos. Estas oscilaciones están en fase y se les denomina comúnmente plasma semiconductor.  $m^*$  es la masa efectiva del electrón en el semiconductor y sustituye a la masa electrónica en el vacío. En general, las ecuaciones (13)-(14) se pueden reescribir como una sumatoria de términos oscilatorios del tipo,

$$\varepsilon_{1} = (1 + \varepsilon_{0}) + \sum_{i} \frac{\left(E_{0i}^{2} - E^{2}\right)E_{P}^{2}}{\left(E_{0i}^{2} - E^{2}\right)^{2} + E_{\eta}^{2}E^{2}}$$
(15)

$$\varepsilon_2 = \sum_i \frac{E_P^2 E_{ji} E}{\left(E_{0i}^2 - E^2\right)^2 + E_{ji}^2 E^2}$$
(16)

donde el subíndice "i" se refiere a la *i-ésima* oscilación armónica. Existen semiconductores dieléctricos sin dispersión de luz, no absorbentes ópticos ( $E_{\gamma i} = 0$ ), y la función dieléctrica queda expresada como

$$\varepsilon_{1} = (1 + \varepsilon_{0}) + \sum_{i} \frac{E_{P}^{2}}{\left(E_{0i}^{2} - E^{2}\right)}$$

$$\tag{17}$$

$$\varepsilon_2 = 0 \tag{18}$$

Ejemplo de estos materiales son los semiconductores nitrogenados III-N (AlN, GaN, InN) [1], y óxidos semiconductores  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, MgO, etc. [10, 11]. La función dieléctrica,  $\varepsilon_I$ , para AlN cristalino es obtenida de la literatura y presentada en la Figura 2, en el rango de energías 1.0-5.0 eV [10]. La curva continua es calculada mediante la función de Lorentz (17) en la forma

$$\varepsilon_1 \cong 2.0 + \frac{170}{\left(6.5^2 - E^2\right)}$$
 (19)

De acuerdo con esta ecuación, en este rango de energías, el material presenta una transición electrónica alrededor de  $6.5 \ eV$ , con oscilaciones de plasma cerca de  $\approx 13 \ eV$ . La correspondencia entre teoría y experimento es aceptable en el rango de energías en consideración. Obsérvese también que la constante dieléctrica estática  $\varepsilon_0 \neq 1$ .

#### Absorción óptica en metales. Modelo de Drude.

El modelo de Drude es la aproximación clásica para describir el movimiento de electrones libres en presencia de un campo electromagnético. El modelo de Drude proporciona una base de la mecánica clásica para la conductividad óptica de los metales y se basa en la aplicación de la teoría cinética a los electrones en un sólido.

Consideremos el movimiento de una partícula de carga q confinada dentro de un metal isotrópico y homogéneo, realizando colisiones inelásticas entre ellos, con frecuencia  $1/\tau$ . Las ecuaciones que gobiernan el movimiento de la carga en presencia de un campo eléctrico oscilante dado por la onda plana  $E(\omega, t)=E_0\exp(-i\omega t)$  son:

$$m^* \frac{dv}{dt} + m^* \frac{v}{\tau} = qE(\omega, t)$$
(20)

$$J(\omega,t) = \sigma(\omega)E(\omega,t) = Nqv$$
(21)

donde J es la densidad de corriente,  $\sigma = \sigma_1 + i\sigma_2$  es la conductividad óptica compleja, N la densidad de cargas por unidad de volúmen,  $m^*$  la masa efectiva del portador  $\tau$  es el tiempo de relajación y v la velocidad de la carga. Combinando (20) con (21) y asumiendo que la velocidad está en fase con el campo externo ( $\Box exp(-i\omega t)$ ), obtenemos que la conductividad óptica compleja es,

$$\sigma(\omega) = \sigma_1 + i\sigma_2 = \sigma_0 \frac{1}{1 - i\omega\tau}$$
(22)

Aquí  $\sigma_0 = Nq^2\tau / m^* = \omega_p^2\tau / 4\pi$ , es la conductividad de y  $\omega_p$  la frecuencia del plasma electrónico en el metal. Las componentes real e imaginaria son,

$$\sigma_{1}(\omega) = \sigma_{0} \frac{1}{1 + \omega^{2} \tau^{2}} = \frac{1}{4\pi} \frac{\omega_{p}^{2} \tau}{1 + \omega^{2} \tau^{2}}$$
(23)

$$\sigma_{2}(\omega) = \sigma_{0} \frac{\omega \tau}{1 + \omega^{2} \tau^{2}} = \frac{1}{4 \pi} \frac{\omega_{P}^{2} \tau^{2}}{1 + \omega^{2} \tau^{2}} \omega \tag{24}$$

De acuerdo con la teoría electromagnética clásica, la respuesta del metal a la radiación electromagnética se expresa en términos de la conductividad y es descrita por las funciones dieléctricas,

$$\varepsilon_{1}(\omega) = \varepsilon_{\infty} - \frac{4\pi}{\omega} \sigma_{2}(\omega) \tag{25}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi}{\omega}\sigma_1(\omega) \tag{26}$$

Finalmente, expresadas en términos de la energía del fotón,  $E=\square \omega$ , las ecuaciones (19) y (20) se reescriben como,

$$\varepsilon_{1}(E) = \varepsilon_{\infty} - \frac{1}{1 + (E/E_{\tau})^{2}} \frac{E_{P}^{2}}{E_{\tau}^{2}}$$
(27)

$$\varepsilon_2(E) = \frac{1}{1 + (E/E_\tau)^2} \frac{E_P^2}{E_\tau E}$$
(28)

En el caso de un metal con transiciones de interbanda, estas ecuaciones deben combinarse con un término del tipo de Lorentz. El mismo argumento aplica para un semiconductor con pérdidas por conducción. A estos se les llama comúnmente modelos de Drude-Lorentz. Ejemplo de estos metales son los metales de transición tales como Fe, Ni, Cr, Co. Estos metales muestran una región de absorción alrededor de ≈2.0 eV en su espectro óptico [12]. Las funciones dieléctricas del Co volumétrico son obtenidas de la literatura [13] y se muestran en la Fig. 3. Las curvas segmentadas representan las contribuciones de Drude y Lorentz por separado. Las curvas continuas son ajustes numéricos empleando el modelo dispersivo de Drude-Lorentz,

$$\varepsilon_{1}(E) = (1 + \varepsilon_{0} + \varepsilon_{\infty}) - \frac{1}{1 + (E/E_{\tau})^{2}} \frac{E_{P,D}^{2}}{E_{\tau}^{2}} + \frac{(E_{0}^{2} - E^{2})E_{P,L}^{2}}{(E_{0}^{2} - E^{2})^{2} + E_{\gamma}^{2}E^{2}}$$
(29)

$$\varepsilon_{2}(E) = \frac{1}{1 + (E/E_{\tau})^{2}} \frac{E_{P,D}^{2}}{E_{\tau}E} + \frac{E_{P,L}^{2}E_{\gamma}E}{(E_{0}^{2} - E^{2})^{2} + E_{\gamma}^{2}E^{2}}$$
(30)

donde los sub-índices "D" y "L" se refieren a "Drude" y "Lorentz", respectivamente. La mejor coincidencia simultánea entre  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$  con la teoría, se obtuvo con los valores  $\varepsilon_0 + \varepsilon_\infty = 3.3$ ,  $E_0 = 1.90$  eV,  $E_\gamma = 2.20$  eV,  $E_{P,L} = 5.30$  eV,  $E_\tau = 5.55$  eV,  $E_{P,D} = 7.75$  eV. En el rango de energías E > 2.0 eV, el Co presenta un comportamiento típico de un metal normal. Sin embargo cerca de 2.0 eV,  $\varepsilon_1$  muestra una estructura débil y ancha, asociada con una oscilación armónica. Sin embargo, esta oscilación no es suficientemente intensa como para afectar el espectro de  $\varepsilon_2$ , como puede observarse en la Figura insertada. Los círculos abiertos son los valores experimentales de la función  $\varepsilon_2$  y la curva continua es calculada mediante el modelo de Drude-Lorentz utilizando  $E_{P,L} \approx 0.0$  eV en (30).

#### Absorción óptica en sistemas nanoestructurados. Modelo de capas equivalentes

El estudio de las propiedades ópticas de la materia a nivel nanoscópico no es una tarea simple. Esto es porque en ésta escala las superficies e interfaces predominan sobre las propiedades el sólido volumétrico, introduciendo efectos que modifican drásticamente las propiedades del material. Por otro lado, las teorías electrodinámicas clásicas son inaplicables en la mayoría de los casos, debiéndose aplicar teorías basadas en la mecánica cuántica. Sin embargo, cuando el tamaño de los elementos constituyentes de la nanoestructura es pequeño en comparación con la longitud de onda de la radiación, esta se puede considerar isotrópico y homogéneo. Considerando que cada elemento de la nanoestructura es homogéneo e isotrópico podemos extender el modelo de capas equivalentes [14] a la función dieléctrica compleja.

$$\varepsilon_{1}^{eff} = \sum_{i=1}^{L} \frac{d_{i}}{D} \varepsilon_{1i}^{L} + \sum_{j=1}^{L} \frac{d_{j}}{D} \varepsilon_{1j}^{D} + \varepsilon_{1S}$$
(31)

$$\varepsilon_{2}^{eff} = \sum_{i=1}^{L} \frac{d_{i}}{D} \varepsilon_{2i}^{L} + \sum_{j=1}^{L} \frac{d_{j}}{D} \varepsilon_{2j}^{D}$$
(32)

La respuesta electromagnética de la nanoestructura se puede describir entonces a través de funciones efectivas de la forma, donde  $d_i$ ,  $d_j$  son los espesores del elemento semiconductor y metálico, respectivamente, y D es el espesor total de la muestra.  $\varepsilon_{Ii}^L$  y  $\varepsilon_{2i}^L$  representan las funciones dieléctricas del semiconductor expresadas en las ecuaciones (15) y (16), y  $\varepsilon_{Ij}^D$  y  $\varepsilon_{2j}^D$  son las funciones dieléctricas del metal dadas por las ecuaciones (27) y (28).  $\varepsilon_{IS}$  es la función dieléctrica real del susbstrato. En nano-estructuras basadas en AlN y Co, con substrato transparente de  $\mathrm{Al}_2\mathrm{O}_3$ , las funciones dieléctricas se pueden expresar como,

$$\varepsilon_{1}^{eff} = \frac{d_{AlN}}{D} \varepsilon_{1}^{AlN} + \frac{d_{Co}}{D} \varepsilon_{1}^{Co} + \varepsilon_{1S}$$
(33)

$$\varepsilon_{2}^{eff} = \frac{d_{AlN}}{D} \varepsilon_{2}^{AlN} + \frac{d_{Co}}{D} \varepsilon_{2}^{Co}$$
(34)

para la nanoestructura doble AlN/Co, y

$$\varepsilon_{1}^{eff} = \frac{d_{AlN,1}}{D} \varepsilon_{1,1}^{AlN} + \frac{d_{Co}}{D} \varepsilon_{1}^{Co} + \frac{d_{AlN,2}}{D} \varepsilon_{1,2}^{AlN,2} + \varepsilon_{1S}$$
(35)

$$\varepsilon_{2}^{eff} = \frac{d_{AlN,1}}{D} \varepsilon_{2,1}^{AlN} + \frac{d_{Co}}{D} \varepsilon_{2}^{Co} + \frac{d_{AlN,2}}{D} \varepsilon_{2,2}^{AlN,2}$$
(36)

para la nanoestructura triple AlN/Co/AlN. A pesar que el AlN en estado volumétrico es casi transparente ( $\varepsilon_2 \approx 0$ ) en la región de energía en estudio, en la nano-escala pueden ocurrir la absorción y la dispersión de luz debido a impurezas ó defectos. Así mismo, las funciones dieléctricas de la capa de Co ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ) contienen términos oscilatorios y de Drude, como se mostró en la Sección 3.2. Para introducir el efecto del substrato, consideraremos que el  $\alpha$ -Al $_2$ O $_3$  es casi transparente en la región de trabajo y utilizaremos el valor reportado  $\varepsilon_8 \approx 1.30$  [11].

### Resultados y discusión

Los parámetros elipsométricos ( $\Delta$ ,  $\Psi$ ) son presentados en la Fig. 4 para los tres sistemas en consideración: (a) Co(10 nm)/AlN(5 nm), (b) AlN(10 nm)/Co(10 nm)/AlN(5 nm). Los rasgos más resaltantes de estos parámetros son: (1) Las muestras Co(10 nm)/AlN(5 nm) y AlN(10 nm)/Co(10 nm)/AlN(5 nm) presentan similar amplitud relativa en ambos sistemas, un decaimiento en el cambio de fase a medida que aumenta la energía, y un máximo local entorno de 2.0 eV; (2) ausencia de oscilaciones en  $\Delta$  y  $\Psi$ . Estas oscilaciones son observadas en nanoestructuras regulares y son asociadas con reflexiones múltiples en la interfaces y rugosidaxdes. En particular, estas estructuras se han reportado en nanoestructuras similares de AlNO/SiO<sub>2</sub> y AlN/Co [15, 20]. Las funciones dieléctricas de las nanoestructuras son obtenidas a partir del par de parámetros elipsométricos ( $\Delta$ ,  $\Psi$ ) resolviendo las ecuaciones (1)-(6). Las funciones dieléctricas ( $\varepsilon$ <sub>1</sub>,  $\varepsilon$ <sub>2</sub>) así obtenidas son presentadas en la Fig. 5: (a) Co(10 nm)/AlN(5 nm), (b) AlN(10 nm)/Co(10 nm)/AlN(5 nm).

Las curvas continuas gruesas son calculadas mediante el modelo de capas equivalentes descrito en la Sección 3.3, donde las funciones dieléctricas de cada elemento de la nanoestructura se describen a través del modelo dispersivo de Lorentz-Drude. La mejor coincidencia teoría-experimento fue obtenida con los parámetros enlistados en la Tabla 1. Los espesores obtenidos de la teoría concuerdan con los determinados durante la fase de fabricación. Observamos una variedad de efectos interesantes en estas nanoestructuras híbridas. Los parámetros obtenidos tienen valores razonables en comparación con los calculados para los El efecto de la capa de AlN sobre el Co, en la tri-capa, disminuye la intensidad del máximo de absorción alrededor de la oscilación típica de Co entorno de 2.0 eV. Aunque el AlN no es absorbente en el rango óptico, en ciertos casos puede absorber la radiación por efecto de impurezas materiales puros (ver Secc. 3.1 y 3.2). Primeramente, las transiciones inter-banda debido al AlN y Co ocurren a energías muy cercanas de aquellas esperadas en los respectivos materiales en estado volumétrico.

Las capas de AlN contribuyen con oscilaciones de plasma en el rango de energía **óptico** 2.0-3.0 eV, mucho menor que el valor de 13.0 eV en el semiconductor volumétrico. Así mismo, el plasma electrónico en el Co volumétrico se desplaza desde la banda UV ( $\approx 7.75 \ eV$ ), hasta el centro de la banda visible en las nanoestructuras (1.30-2.80 eV). Esto no es contradictorio, ya que, siendo la oscilación de plasma una propiedad colectiva del sólido continuo, es de esperar que en una nanoestructura estas oscilaciones se

activen a menor energía. Esto es interesante ya que proporciona a estas estructuras propiedades ideales para una diversidad de aplicaciones tecnológicas tales como, recubrimientos ópticos [15], super-lentes ópticos [16], terapia parasítica [17], circuitos opto-electrónicos [18] y otros dispositivos ultra-rápidos [19]. Otro aspecto que debe ser resaltado es el valor no nulo de la energía de dispersión en las capas de AlN,  $E_{\gamma}^{\text{AlN}} \approx 1.28 \ eV$ , en ambos sistemas. Al reducir las dimensiones del material hasta la nanoescala, las propiedades ópticas del semiconductor sólo pueden estabilizarse dispersando energía electromagnética a través de las impurezas y defectos. Por lo contrario esto no se observa en la capa de Co, en la cual los efectos de dispersión de energía son del mismo orden que en el material volumétrico.

Cabe mencionar, que en ambos sistemas Co(10 nm)/AIN(5 nm) y AIN(10 nm)/Co(10 nm)/AIN(5 nm) existe una ligera desviación entre teoría y experimento a energías E < 2.0 eV, como puede observarse claramente. Esta discrepancia puede ser debida a que el modelo teórico no considera algunos efectos tales como: la formación de algún compuesto intermetálico en las interfaces Co/AIN, posiblemente AlCo, ya que estas interfaces son muy reactivas [20]; las propiedades ópticas de las dos capas de AlN en las tri-capas son consideradas idénticas, lo cual es poco probable a nivel de la nano-escala; tampoco se consideran pérdidas por conducción en el AlN. Las líneas punteadas ( $\varepsilon_1$ ) y continuas delgadas ( $\varepsilon_2$ ) que se observan en los paneles 6(a) y 6(b), representan las contribuciones de las capas de Co y Co y Co y alN a cada función dieléctrica, por separado, y son calculadas a partir del modelo de capa equivalente. Podemos notar que el perfil de las curvas experimentales coincide cualitativamente con la contribución del Co. Las capas de Co y Co contribuyen con un fondo de absorción relativamente constante, esto, debido los procesos de dispersión discutidos previamente.

#### **Conclusiones**

espectroscopia elipsométrica empleada para estudiar propiedades ópticas de nanoestructuras híbridas Co/AlN y AlN/Co/AlN crecidas sobre substratos de α-Al<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, mediante evaporación catódica RF asistida por magnetrones. Los parámetros elipsométricos no presentan la estructura oscilatoria característica de reflexiones multiples. Probablemente debido a que las interfaces entre Co y AlN no son bien definidas. A partir de los ángulos elipsométricos, determinamos las funciones dieléctricas ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ) de las muestras. La data experimental es interpretada en el marco de un modelo teórico de capa equivalente, en el cual las propiedades de las capas de AlN son debidas a las oscilaciones armónicas atómicas, y son superpuestas a las propiedades electrónicas de la capa de Co. La concordancia del modelo teórico con la data experimental es en general aceptable introduciendo términos de absorción por dispersión electromagnética en el semiconductor. Esta dispersión de luz es asociada a la inclusión de defectos debidos a los efectos de tamaño de las capas semiconductoras. Encontramos además que las oscilaciones del plasma en AlN y Co volumétricos, se desplazan desde el UV al centro de la banda VIS. Esto confiere a las nanoestructuras Co/AlN y AlN/Co/ AlN propiedades únicas para nuevas aplicaciones tecnológicas.

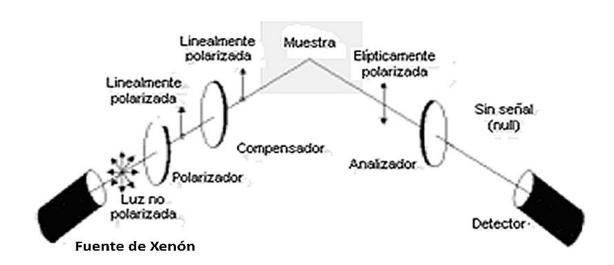
# Referencias bibliográficas

- [1] Kung P. and Razeghi M., III-Nitride wide bandgap semiconductors: a survey of the current status and future trends of the material and device technology, Opto Electronics Review, Vol. 8, No. 3, (2000), 201-239.
- [2] Technology Watch: An Introduction to MEMS, Prime Faraday Partnership, Loughborough University, UK (2002)
- [3] Yang C. J., Zhang M., Zhang Z. D. and Han J. S., Nanoscale Microstructure and Magnetic Transport in AlN/Co/AlN/Co... Discontinuous Multilayers, Journal of Magnetism, Vol. 8, No. 2, (2003), 98-102.

- [4] Huttel Y., Gómez H., Clavero C., Cebollada A., Armelles G., Navarro E., Ciria M., Benito L., Arnaudas J. I. and Kellog A. J., Cobalt nanoparticles deposited and embedded in AlN: Magnetic, magneto-optical, and morphological properties, J. Appl. Phys., Vol. 96, No. 3, (2004), 1666-1673.
- [5] Dürr H. A., Dhesi S. S., Dudzik E., Knabben D., van der Laan G., Goedkoop J. B. and Hillebrecht F. U., <u>Spin and orbital magnetization in self-assembled Co clusters on Au(111)</u>, Phys. Rev. Vol. 59, No. 701, (1999).
- [6] Félix-Medina R., Dorantes-Dávila J. and Pastor G. M., <u>Ground-state magnetic properties of CoN\_clusters on Pd(111): Spin moments, orbital moments, and magnetic anisotropy</u>, Phys. Rev. Vol. 67, 094430, (2003)
- [7] Klautau A.B., Frota-Pessôa S., <u>Magnetism of Co clusters embedded in Cu(0 0 1) surfaces: an ab initio study</u>, Surf. Sci. 497, (2002), 385-397.
- [8] Tompkins H. G., E. Irene A. (Eds.), Handbook of Elipsometry, William Andrew Pub., NY (2005).
- [9] Fujiwara H., Spectroscopic Elipsometry Principles and Applications, John Wiley & Sons., England (2007).
- [10] Palik E. D. (Ed.), Handbook of Optical Constants, Academic Press Inc., NY. Vol. I, (1985) y Vol. II, (1991).
- [11] Wakaki M., Kudo K., and Shibuya T. (Eds.), Physical Properties and Data of Optical Materials, CRC Press, Taylor & Francis Group, USA (2007).
- [12] Johnson P. B. and R. Christy W., Optical Constants of Transition Metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, and Pd, Phys. Rev. Vol. 9, No. 12, (1974), 5056-5070.
- [13] Weaver J. H., Optical Properties of Metal, Part 1: The Transition Metals Physics Data, Nro. 18-1, Germany (1981).
- [14] Atkinson R., and Dodd P. M., Optical and Magneto-optical Properties of Sputter-deposited Co/Cu Multilayers, J. Magn. Magn. Mater. 173, (1997), 202-214.
- [15] Schurig D., Mock J. J., Justice B. J., Cummer S. A., Pendry J. B., Starr A. F. and Smith D. R., Metamaterial Electromagnetic Cloak at Microwave Frequencies, Science 314, (2006), 977-980.
- [16] Ramakrishna, S. A. and Pendry J. B., <u>Removal of absorption and increase in resolution in a near-field lens via optical gain</u>, Phys. Rev. Vol. 67, 201101-02, (2003).
- [17] Pissuwan D., Valenzuela S. M., Miller C. M., and Cortie M. B. <u>A., Golden Bullet? Selective Targeting of Toxoplasma gondii Tachyzoites Using Antibody-Functionalized Gold Nanorods</u>, Nano Lett. 7, (2007), 3808-3812.
- [18] Engheta N., Circuits with Light at Nanoscales: Optical Nanocircuits Inspired by Metamaterials, Science, 317, (2007), 1698-1702.
- [19] MacDonald K. F., Samson Z. L., Stockman M. I., and Zheludev N. I., Ultrafast active plasmonics, Nat. Photon, 3, (2009), 55-58.
- [20] Vovk V., Schmitz G., and Kirchheim R., Three-dimensional atom probe investigation of Co/Al thin film reaction, Microelectronic Engineering, 70, (2003), 533-538.

## Leyendas

- Figura 1. Diagrama esquemático del montaje experimental para las medidas de elipsometría.
- **Figura 2.** Función dieléctrica,  $\varepsilon_1$ , del AlN volumétrico. La curva continua es calculada empleando el modelo de osciladores de Lorentz, tal y como se describe en el texto.
- **Figura 3.** Funciones dieléctricas,  $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ , del Co volumétrico. Las curvas continuas son calculadas empleando los modelos de osciladores de Lorentz y de Drude, tal y como se describe en el texto.
- **Figura 4.** Parámetros elipsométricos ( $\Psi$ ,  $\Delta$ ) para: (a) Co(10nm)/AlN(5nm), (b) AlN(10nm)/Co(10nm)/AlN(5nm).
- **Figura 5.** Funciones dieléctricas ( $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ) para las nanoestructruas: (a) Co(10nm)/AlN(5nm), (b) AlN(10nm)/Co(10nm)/AlN(5nm). Las curvas continuas son calculadas con el modelo descrito en el texto.
- **Tabla 1.** Parámetros obtenidos de los ajustes numéricos de las funciones dieléctricas  $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$  utilizando el modelo de capas equivalentes descrito en la Secc. 3.



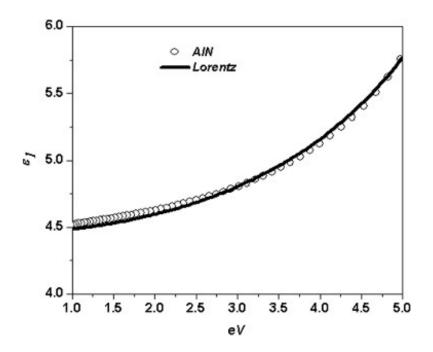


Figura 1. Fermin, et. al.

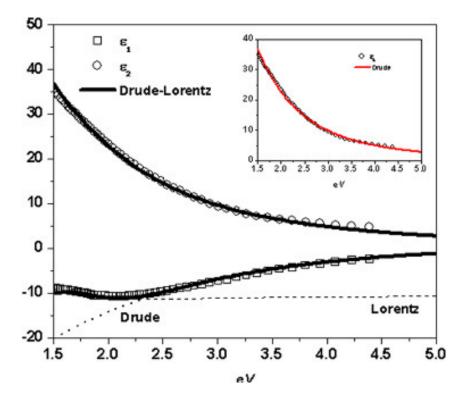


Figura 2. Fermin, et. al.

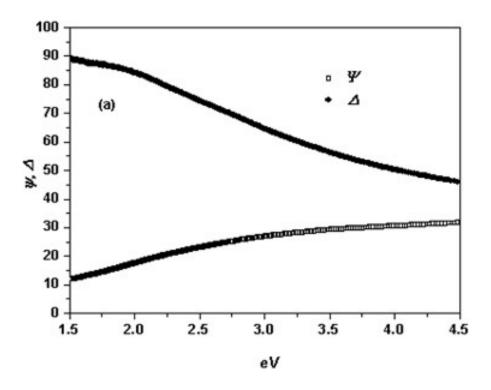


Figura 3. Fermin, et. al.

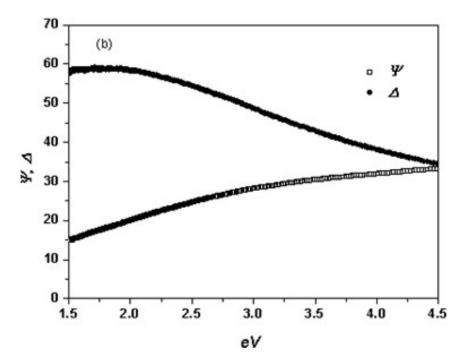


Figura 3. Fermin, et. al.

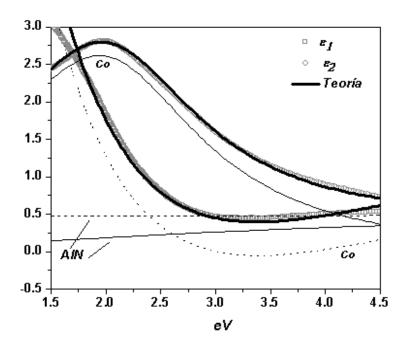


Figura 4. Fermin, et. al.

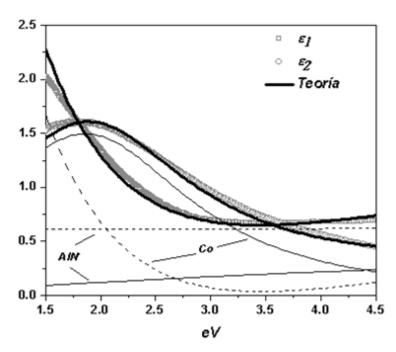


Figura 4. Fermin, et. al.

Tabla 1. Fermin, et. al.

	Co(10 nm)/AlN(5 nm)	AIN(10 nm)/Co(10 nm)/AIN(5 nm)
$\mathcal{E}_{\theta}^{AlN}$	1.40	1.0
$E_0^{AlN}$	7.0 eV	7.0 eV
$E_{PL}^{AlN}$	2.96 eV	2.13 eV
$E_{v}^{AlN}$	1.28 eV	1.28 eV
$(\varepsilon_{\theta}^{+} + \varepsilon_{\infty}^{-})^{C_{\theta}}$	2.20	2.20
$E_{\tau}^{Co}$	0.29 eV	0.32 eV
$E_{\theta}^{Co}$	1.90 eV	1.90 eV
$E_{\tau}^{Co}$ $E_{\rho D}^{Co}$	2.75 eV	1.27 eV
$E_{PL}^{Co}$	8.66 eV	8.83 eV
$E_{\gamma}^{Co}$	2.24 eV	2.38 eV