

00550

6



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

PROGRAMA DE MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS

"INESTABILIDADES DE ORIGEN ELASTICO DURANTE LAS PRIMERAS ETAPAS DEL CRECIMIENTO DE PELICULAS DELGADAS"

T E S I S
QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS
P R E S E N T A :
I.Q. DAVID MONTIEL TABOADA

DIRECTORA DE TESIS: DRA. EUGENIA CORVERA POIRE

MEXICO, D. F.

298177
41862

2001



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Integrantes del jurado

Presidente	Dr. Luis Alberto Vicente Hinestroza
Vocal	Dra. María Eugenia Costas Basín
Secretario	Dr. Sebastian Pathiyamattom Joseph
Primer suplente	Dr. Jesús Antonio del Río Portilla
Segundo suplente	Dra. Hailin Zhao Hu

Este trabajo se desarrolló en el Departamento de Física y Química Teórica de la Facultad de Química de la UNAM.

Directora de tesis: **Dra. Eugenia Corvera Poiré**

Agradezco al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo brindado a través de la beca 145167 durante la realización de mis estudios de maestría y la elaboración de esta tesis.

AGRADECIMIENTOS

Para comenzar quiero agradecer a las personas que contribuyeron directamente en la elaboración de este trabajo. Agradezco la Dra. Eugenia Corvera por su excelente labor como directora de esta tesis; agradezco también sus importantes aportaciones al contenido de este trabajo. Gracias Eugenia por tu ayuda tanto en cuestiones académicas como personales, por haber siempre estado ahí, por echarme la mano en tantas cosas que no te correspondían, por tus consejos, tus enseñanzas y sobre todo por tu amistad y confianza. Muchas gracias. Agradezco a Judith Müller por su colaboración en esta tesis y también por responder pacientemente a muchas de mis preguntas e inquietudes. Agradezco a los integrantes del jurado por sus correcciones y observaciones que contribuyeron a mejorar este trabajo.

Agradezco al Dr. Max Lagally por permitirme reproducir algunas de las imágenes de sus experimentos.

A los profesores de la Facultad de Química que impartieron los cursos a los que asistí en la maestría y de quienes aprendí tanto: Auster, Eugenia y Germund. A Vicente Talanquer y a Martín Hernandez por su apoyo.

A mis compañeros y profesores del 101: Emilio, Eugenia, Enrique, José Luis, gracias por tus tips que me ahorraron mucho tiempo, Mónica, gracias por tu amistad y tu cariño, Rosana y Laura.

A Paty Vargas y a Marcos Ordaz por ayudarme agilizando los trámites.

A mis amigos: Rich, Alex, Martín, Manuel, Nahanny, Ramón, Adrián, Alina, Cuauhtémoc, Javis, Eduard, Paola, Cristina, Gaby Perezacano, Osvaldo, Paulina, Walter, Rosi, Pepe, Rubén y Aurelio... gracias a todos ustedes y a muchos que no menciono porque sufro de bloqueo mental.

A Gaby por lo que has significado para mi, por tus buenos sentimientos y por tu amistad.

A mi familia, mis abuelos, primos y tios que siempre me han apoyado. Alita, gracias por ocuparte de tantos detalles.

A mis padres, Cristina y Hector, que me han apoyado en todo lo que hago, por su cariño y por ayudarme a salir adelante.

A mi hermana Angi, por su cariño. Gracias chenchí.

RESUMEN

En esta tesis realizamos un análisis de estabilidad para la forma del frente de crecimiento de una película delgada en un sistema heteroepitaxial. Nuestro estudio se enfoca en las primeras etapas del crecimiento por flujo de escalones sobre una superficie escalonada. Analizando el efecto de la deformación del sustrato y de la energía libre de escalón, determinamos las condiciones en las que un frente de crecimiento plano es estable y aquellas en las cuales es inestable. Para ello suponemos un mecanismo de transporte de materia que consiste en la difusión de partículas a lo largo del borde del escalón. Tomando en cuenta únicamente el efecto de la deformación obtenemos que para cubrimientos pequeños el frente plano es inestable y para cubrimientos grandes es estable. Encontramos también que el efecto de la energía de escalón, que es estabilizador, da lugar a la selección de modos cuando el frente es inestable. Finalmente, estudiamos cualitativamente el arreglo de islas dispuestas sobre los escalones del sustrato que se formaría al romperse el frente. Determinamos el tamaño y espaciamiento de dichas islas a partir de los resultados del análisis de estabilidad.

DECLARACIÓN DE ORIGINALIDAD

Los resultados originales de mi trabajo que se enuncian a continuación se encuentran en el capítulo 4.

- Adaptación del modelo (Corvera Poiré y Müller [01]) para estudiar la dinámica de inestabilidades de origen elástico de películas depositadas sobre un sustrato cuya constante de malla es distinta a aquella del material depositado.
- Obtención de la relación de dispersión para un frente de crecimiento plano en una superficie escalonada tomando en cuenta el efecto de la elasticidad y de la energía libre de escalón para cuando la difusión de partículas a lo largo del frente es el mecanismo dominante de redistribución de materia.
- Obtención de las expresiones para calcular el tamaño, el espaciamiento y la relación de aspecto de las estructuras formadas a partir del rompimiento de un frente de crecimiento inestable.
- Cálculo numérico del desplazamiento en un punto debido a una distribución de fuerzas en un escalón ondulado.

INDICE

1	INTRODUCCIÓN	1
2	CRECIMIENTO DE PELÍCULAS DELGADAS	4
2.1	Estructura de la Superficie de un Cristal	4
2.1.1	Rugosidad de una Superficie	6
2.2	Crecimiento de Películas Delgadas	6
2.2.1	Propiedades Termodinámicas de Estructuras	7
2.2.2	Procesos Atómicos en las Primeras Etapas de Crecimiento	9
2.2.3	Tipos y Modos de Crecimiento	13
3	ISLAS SOBRE UN SUSTRATO ESCALONADO	16
3.1	Energía de Deformación Elástica en un Sistema Heteroepitaxial	17
3.2	Energía de un Sistema de Tiras sobre las Terrazas de un Sustrato Escalonado	18
3.3	Energía de un Arreglo de Islas Rectangulares	22
3.4	Resultados del Análisis del Criterio Energético	23
4	ESTABILIDAD DE UN FRENTE DE CRECIMIENTO PLANO	25
4.1	Análisis de Estabilidad	25
4.2	Mecanismo de Transporte	27
4.3	Cálculo de la Energía Elástica Local	29
4.4	Efecto de la Elasticidad en la Relación de Dispersión	32
4.5	Contribución de la Energía Libre de Escalón	35
4.6	Rompimiento del Frente en un Arreglo Regular de Islas	37
4.7	Comparación con Resultados Experimentales	41
4.8	Propuestas para Trabajos Futuros	42
4.8.1	Perturbación del Frente de Crecimiento	42
4.8.2	Influencia de Otros Factores en la Estabilidad del Frente	45
5	CONCLUSIONES	46
	APÉNDICE	48
A.1	Fundamentos de Elasticidad	48
A.1.1	Conceptos Básicos y Definiciones	48
A.1.2	Condiciones de Equilibrio	50
A.1.3	Termodinámica de las Deformaciones Elásticas	50
A.1.4	Ley de Hooke	51
A.1.5	Propiedades Elásticas de Materiales	51
A.1.6	Equilibrio de un Medio Semiinfinito	52
	REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54

LISTA DE FIGURAS

2.1 Estructuras en la superficie de un cristal.	5
2.2 Superficie escalonada (001) del silicio.	5
2.3 Fuerzas efectivas en la superficie curva de un cristal.	9
2.4 Cruce de esquinas.	11
2.5 Potencial cerca de un escalón sobre la superficie de un cristal.	13
2.6 Modos de crecimiento heteroepitaxial.	14
2.7 Acumulación de escalones	15
3.1 Distribución de fuerzas en el sustrato debida a la presencia de una estructura plana en su superficie.	17
3.2 Crecimiento de un frente plano sobre un sustrato escalonado	19
3.3 Distribución de fuerzas sobre los bordes rectos del material depositado.	19
3.4 Desplazamiento en un punto debido a una distribución uniforme de fuerzas sobre una recta.	20
3.5 Desplazamiento en un punto sobre una recta debido a una distribución uniforme de fuerzas sobre la misma recta.	20
3.6 Dependencia de la energía elástica con el cubrimiento para un arreglo de tiras.	22
3.7 Arreglo regular de islas rectangulares.	22
3.8 Comparación energética entre un arreglo de tiras y un arreglo óptimo de islas rectangulares.	24
4.1 Perturbación en uno de los frentes de crecimiento del sistema.	27
4.2 Distribución de fuerzas sobre un borde ondulado.	29
4.3 Contribuciones al desplazamiento en un punto sobre el borde ondulado.	30
4.4 Contribución de la distribución de fuerzas sobre el borde ondulado al desplazamiento en un punto.	31
4.5 Gráfica de la función $\cot(\pi\theta)$	33
4.6 Relación de dispersión para distintos valores de θ (efecto de la elasticidad).	34
4.7 Interacción del frente de crecimiento con bordes cercanos.	34
4.8 Relación de dispersión cuando se toma en cuenta el efecto de la energía libre de escalón.	37
4.9 Ruptura de un frente inestable.	38
4.10 Tamaño de las islas formadas como función del cubrimiento.	39
4.11 Espaciamiento entre islas como función del cubrimiento.	39
4.12 Relación de aspecto.	39
4.13 Ángulo definido por la relación de aspecto como función del cubrimiento.	40
4.14 Imagen STM de CaF_2 depositado sobre una superficie escalonada de Si (111).	41

4.15	Perturbación idéntica en todos los frentes de crecimiento	43
4.16	Contribución al desplazamiento sobre un borde ondulado debida a otro borde ondulado o a otro borde recto.	44
4.17	Desfasamiento entre perturbaciones de los frentes de terrazas distintas.	44
A.1	Deformación homogénea de una columna	52
A.2	Fuerza puntual aplicada sobre la superficie de un medio semiinfinito. .	53

Inestabilidades de Origen Elástico durante las
Primeras Etapas del Crecimiento de Películas
Delgadas

INTRODUCCIÓN

El tema de estudio dentro del cual se ubica este trabajo es el de la morfología de interfases. La morfología de interfases (*pattern formation*) estudia, como su nombre lo indica, las formas que adoptan los sistemas en la naturaleza. Su objetivo es reconocer los principios físicos que dan lugar a una determinada forma o patrón y también predecir las propiedades del patrón formado.

La selección de formas en los sistemas físicos está relacionada con el concepto de estabilidad. Una determinada forma es inestable cuando tiene una tendencia a evolucionar hacia una forma distinta. En caso contrario la forma es estable.

Existen muchísimos ejemplos de patrones que se forman naturalmente durante la evolución de los sistemas físicos. El crecimiento de un sólido en contacto con su correspondiente líquido subenfriado, la solidificación direccional de una sustancia que contiene impurezas o el desplazamiento de un fluido de alta viscosidad por uno de baja viscosidad son algunos de ellos. Estos casos han sido objeto de múltiples estudios (Langer [80]; Pelcé [88]).

Las formas que nos interesan en este trabajo son las de estructuras que aparecen durante el crecimiento de películas delgadas sobre una superficie de cristal. Hasta hace poco, las investigaciones en esta área estuvieron dirigidas principalmente hacia la obtención de películas uniformes. Para lograr esto, es necesario inhibir el efecto de los factores que puedan desestabilizar una superficie plana.

Recientemente se ha encontrado que existen inestabilidades que dan lugar al rompimiento de una película delgada en estructuras de tamaño nanométrico en arreglos sorprendentemente regulares (Bimberg et al. [97]; Shchukin [96]; Tersoff, Teichert y Lagally [96]). Este fenómeno abre una nueva posibilidad: la de aprovechar estas inestabilidades para la fabricación de nanoestructuras cuánticas sobre superficies de

semiconductores. Este tipo de estructuras tiene una aplicación tecnológica importantísima en campos como la microelectrónica y la óptica.

La formación de este tipo de arreglos se ha observado cuando un material es depositado sobre un sustrato plano de naturaleza distinta al material depositado (sistema heteroepitaxial). En estos sistemas surge una inestabilidad de origen elástico. Esta inestabilidad existe porque el sustrato sufre una deformación debida a la diferencia entre las constantes de malla del sustrato y el material depositado. Para sistemas de este tipo se han identificado tres modos de crecimiento. En dos de ellos el frente plano de crecimiento se rompe para dar lugar a la formación de pequeñas estructuras. En la sección 2.2.3 se describe cada uno de estos modos de crecimiento.

Además del crecimiento sobre un sustrato plano, existe un tipo de crecimiento que consiste en la deposición de un material sobre las terrazas de un sustrato con escalones igualmente espaciados. Esta técnica, conocida como flujo de escalones, se ha utilizado principalmente para construir películas delgadas uniformes.

Cuando el crecimiento por flujo de escalones se hace en un material distinto al de la película depositada, se esperan, para las primeras etapas de crecimiento, análogos bidimensionales de los modos de crecimiento tridimensional. Estudiando esta posibilidad, Li et al. [00] encontraron que un frente de crecimiento uniforme no es energéticamente favorable para bajos cubrimientos. Sus resultados evidencian la existencia de una inestabilidad morfológica.

Motivados por los resultados del trabajo de Li et al., en el presente trabajo realizamos un análisis de estabilidad para el frente plano en un sistema heteroepitaxial de crecimiento sobre un sustrato escalonado (*vicinal*). Para ello tratamos el problema desde un punto de vista macroscópico utilizando la teoría de medios continuos. Este tratamiento ha demostrado dar excelentes resultados en el estudio de las formas adoptadas por superficies sujetas a esfuerzos (Tersoff, Teichert y Lagally [96]; Müller y Grant [99]; Li, Liu y Lagally [00]).

Para estudiar la estabilidad introducimos una perturbación en uno de los frentes planos de crecimiento y obtenemos una energía elástica local en cada uno de sus puntos. Una vez obtenida una expresión para la energía local, proponemos un mecanismo de redistribución de materia para el frente que consiste en la difusión de materia en

los bordes de la película depositada. Con estos resultados obtenemos la relación de dispersión, la cual nos indica las condiciones en las que el frente plano es estable o inestable. Posteriormente incluimos en el análisis el efecto de la energía libre de escalón. Suponiendo que para cubrimientos muy pequeños el frente inestable se rompe en pequeñas estructuras regulares, determinamos las características de espaciamiento, tamaño y relación de aspecto de dichas estructuras.

Nuestros resultados son los siguientes: El frente de crecimiento es inestable para cubrimientos menores a la mitad de una terraza y estable para cubrimientos mayores a la mitad de una terraza. El estudio del efecto de la elasticidad no predice la selección de modos. La contribución de la energía libre de escalón es estabilizadora y da lugar a la selección de modos para el caso del frente inestable. El modo seleccionado en cada caso define el tamaño, el espaciamiento y la relación de aspecto de las estructuras que resultarían del rompimiento del frente. Estas propiedades dependen del cubrimiento, el ancho de la terraza, la energía de escalón y la naturaleza del sustrato. Tanto el cubrimiento como el ancho de las terrazas son parámetros que en principio se pueden controlar experimentalmente, por lo que las predicciones de nuestra teoría son en principio verificables.

El contenido del trabajo se organiza de la siguiente manera: En el capítulo 2 se presenta una introducción al crecimiento de películas delgadas sobre superficies de cristales. El capítulo 3 contiene el desarrollo y resultados del trabajo de Li et al. [00], el cual está estrechamente relacionado con el tema de esta tesis. En el capítulo 4 se incluyen el desarrollo, resultados y discusión del análisis de estabilidad que hemos realizado (Montiel, Müller y Corvera Poiré [01]). El capítulo 5 contiene las conclusiones más importantes de este trabajo. Por último, en el apéndice A.1 se presentan el lenguaje de la teoría de la elasticidad utilizado en esta tesis y algunos resultados derivados de la misma, utilizados en los capítulos 3 y 4.

CRECIMIENTO DE PELÍCULAS DELGADAS

El estudio del crecimiento de películas delgadas sobre superficies de cristales se ha intensificado en los últimos años por varias razones. La más importante es la aplicación que tienen las películas delgadas al desarrollo tecnológico en campos como la microelectrónica y la óptica. Además de esto, el desarrollo reciente de técnicas como la Microscopía de Barrido por Tunelaje (STM por las siglas de *Scanning Tunneling Microscopy*; Binnig y Rohrer [87]), que permite una visualización directa de la superficie de un cristal, ha impulsado importantes avances en el área experimental. La STM puede emplearse por ejemplo para determinar cuantitativamente las propiedades cinéticas y termodinámicas de estructuras tan pequeñas como un átomo. Esta información hace posible la comparación directa entre los resultados experimentales y aquellos que se obtienen de la teoría, propiciando un creciente sinergismo entre estas dos áreas.

2.1 Estructura de la Superficie de un Cristal

La superficie de un cristal, a nivel microscópico se caracteriza por presentar una serie de estructuras. Las más comunes son: terrazas, escalones, codos (*kinks*), átomos libres, vacantes e islas (figura 2.1). Como ya hemos mencionado, la observación directa de estas estructuras es posible por medio de la técnica STM. Cuando la superficie se encuentra cerca de alguna orientación de alta simetría (001 ó 111 para un cristal cúbico), sus estructuras se observan más fácilmente (figura 2.2).

Aunque la resolución de la STM es altísima, esta técnica tiene algunas desventajas. La principal es que no puede emplearse cuando la temperatura es muy alta (a partir de 1500K aproximadamente). Esto hace que la STM no siempre sea adecuada para la observación del movimiento de estructuras en la superficie. Sin embargo, existen

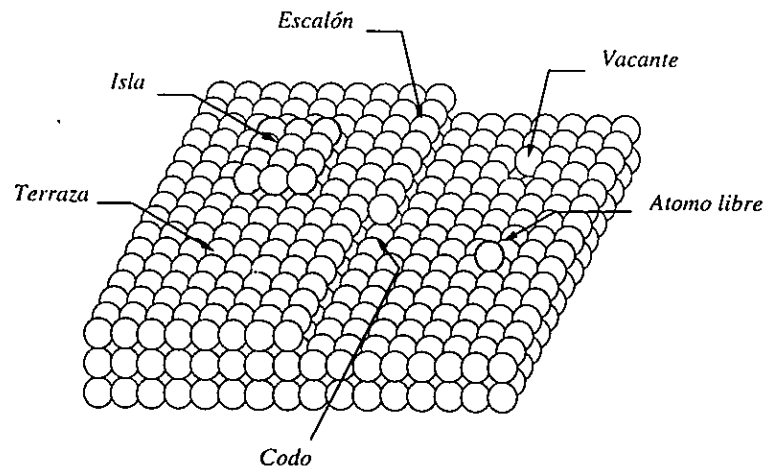


Figura 2.1: Estructuras en la superficie de un cristal.

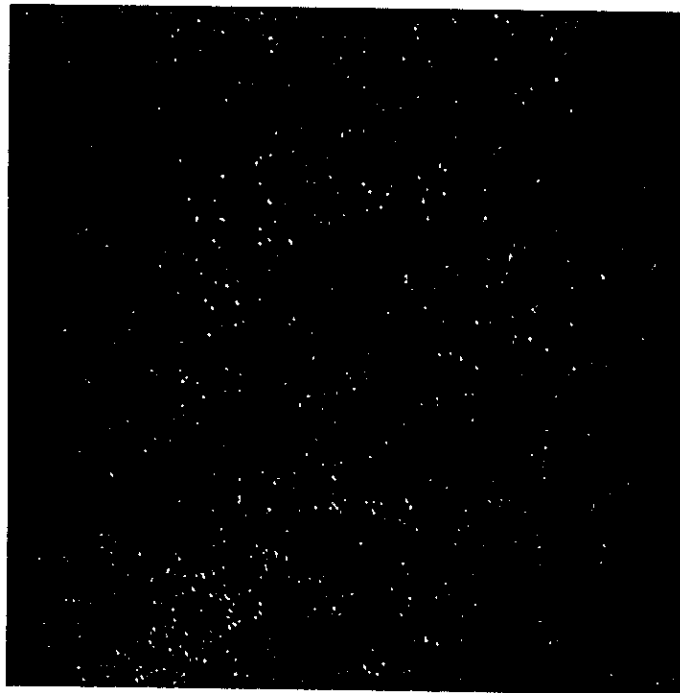


Figura 2.2: Superficie escalonada (001) del silicio. Técnica experimental: STM (Lagally et al. [90]). Extraída del libro *Physics of Crystal Growth* (Pimpinelli y Villain [98]).

otras técnicas como la Microscopía de Reflección Electrónica (REM), que superan este problema. Aunque la resolución obtenida con esta última es mucho menor que la obtenida con la STM, permite visualizar estructuras como terrazas y escalones. Otra técnica, particularmente útil para rastrear el movimiento de átomos individuales es la Microscopía de Campo Iónico (Ehrlich y Hudda [66]; Ehrlich [77]; Wang y Ehrlich [91]).

2.1.1 *Rugosidad de una Superficie*

Sobre una superficie a baja temperatura, se encuentran átomos libres, pares de átomos (dímeros) y, en mucho menor cantidad, algunos cúmulos de átomos (terrazas cerradas ó islas) bordeados por escalones. Se ha observado que la densidad de estas estructuras aumenta con la temperatura¹. Cuando la temperatura llega a un cierto valor, la densidad de escalones aumenta abruptamente y de manera considerable. Esto ocurre porque la energía libre de formación de un escalón se hace cero. De modo que a partir de esta temperatura la superficie se vuelve rugosa. Se ha identificado pues, una transición de rugosidad en la superficie de los cristales caracterizada por una temperatura T_R , que depende de la orientación de la superficie. Esta transición es muy débil y difícil de identificar porque el aspecto de la superficie casi no cambia. Además, se caracteriza por presentar propiedades poco comunes como el hecho de que, en contraste con otras transiciones, el calor específico no diverge y todas sus derivadas con respecto a la temperatura son continuas (Balibar y Castaing [85]; van Beijeren y Nolden [87]; Lapujoulade [94]; Nozières [91]; Weeks [80]).

2.2 *Crecimiento de Películas Delgadas*

En esta sección se introducen y discuten las propiedades termodinámicas de las estructuras más importantes en la superficie de un cristal. También se revisan los procesos cinéticos, a nivel atómico, presentes en las primeras etapas de crecimiento. Ambos son factores que tienen una influencia determinante en el tipo de crecimiento y en la formación de estructuras durante el mismo. Finalmente se mencionan algunos de los

¹Las técnicas experimentales empleadas para estudiar este efecto son la difracción de rayos X y la dispersión atómica.

tipos y modos de crecimiento que se conocen hasta ahora.

2.2.1 Propiedades Termodinámicas de Estructuras

Energía libre de superficie

Sea S la superficie de un cristal en equilibrio con su líquido o su vapor y σ la energía libre por unidad de área de la superficie S . La energía libre de esta superficie está dada entonces por

$$F_{sup}(T) = \int_S \sigma(\hat{\mathbf{m}}, T) dA \quad (2.1)$$

donde T es la temperatura, $\hat{\mathbf{m}}$ es un vector normal a la superficie y dA es un elemento diferencial de área. Como se indica en (2.1), σ depende de la temperatura y de la orientación de la superficie en cada punto, definida por $\hat{\mathbf{m}}$.

La estructura de equilibrio de un cristal se puede calcular minimizando el valor de F_{sup} . Se ha encontrado que la función σ , tiene picos (no es diferenciable) para ciertas orientaciones. Este comportamiento se manifiesta en la formación de facetas, que son las caras de un cristal en equilibrio. Al aumentar la temperatura estos picos se suavizan y las facetas comienzan a encojarse. Una faceta desaparece cuando se alcanza la temperatura de rugosidad T_R para esa orientación (Rottman y Wortis [84]).

Las superficies con facetas periódicas (Herring [51]; Marchenko [81]) son un ejemplo de estructuras en las que la dependencia de la energía libre de superficie con la orientación juega un papel muy importante.

Energía libre de escalón

Consideremos ahora una terraza sobre una superficie de alta simetría. Esta terraza está limitada por un escalón, el cual constituye una interfase y por lo tanto tiene asociada una energía libre o costo energético de formación. Llamamos energía libre de escalón a este análogo unidimensional de la energía libre de superficie. La ecuación con la que se calcula es muy similar a (2.1):

$$F_{escalón}(T) = \int \gamma(\hat{\mathbf{m}}, T) dl \quad (2.2)$$

donde dl es un elemento diferencial de longitud. Ahora γ es la energía libre por unidad de longitud del escalón y $\hat{\mathbf{m}}$ es un vector normal a la línea que define el escalón. Más adelante estudiaremos el efecto de la energía libre de escalón en la morfología de algunas estructuras.

Esfuerzo intrínseco de superficie

En la superficie de un cristal los átomos no se encuentran en las mismas condiciones que en el bulto por el hecho de tener un número de coordinación distinto. Por esta razón, las separaciones interatómicas (constantes de malla) entre los átomos de la superficie y el bulto tienden a ser distintas (Marchenko y Parshin [80]), por lo que la superficie está intrínsecamente deformada (expandida o comprimida). Esta deformación tiene asociada una energía libre que, expresada por unidad de área y a orden lineal en la deformación, está dada por

$$\sigma_{elástica}(\hat{\mathbf{m}}, u_{\alpha\beta}) = \tau_{\alpha\beta}(\hat{\mathbf{m}})u_{\alpha\beta} \quad (2.3)$$

donde $u_{\alpha\beta}$ es el tensor de deformación y $\tau_{\alpha\beta}$ es el tensor de esfuerzos de superficie.

Efecto de la curvatura (capilaridad)

Las superficies sólidas presentan fenómenos capilares similares a los que ocurren en superficies líquidas curvas. Estos fenómenos se explican por medio de la presencia de fuerzas efectivas en la superficie que dan lugar a un campo de deformación en el bulto (Marchenko y Parshin [80]). La energía elástica total (bulto y superficie), se puede expresar como

$$E = \frac{1}{2} \int \lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl} dV + \int \tau_{\alpha\beta}(\hat{\mathbf{m}}) u_{\alpha\beta} dA \quad (2.4)$$

Esta expresión nos da la energía elástica para una determinada configuración de la superficie. La existencia de fuerzas efectivas en una superficie curva se explica con el siguiente argumento: notamos que el campo de esfuerzos $\tau_{\alpha\beta}$ depende de la orientación de la superficie $\hat{\mathbf{m}}$. En una superficie curva, la orientación varía para cada punto y por lo tanto $\tau_{\alpha\beta}$ también cambia. Hay entonces una divergencia en el tensor de esfuerzos y también una fuerza, dado que

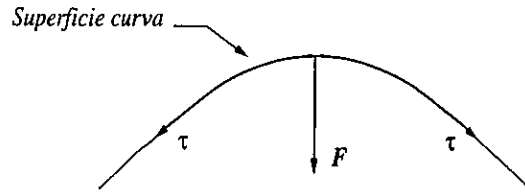


Figura 2.3: Fuerzas efectivas en la superficie curva de un cristal.

$$F_i = \frac{\partial \tau_{i\beta}}{\partial x_\beta} \quad (2.5)$$

La fuerza, cuyas componentes son F_i , genera un campo de deformación en el sólido, contribuyendo así a la energía de un sistema en que la superficie es curva (figura 2.3).

En la siguiente sección se describen algunos de los mecanismos, a nivel microscópico que en gran parte determinan lo que ocurre en las etapas iniciales del crecimiento de una película delgada sobre la superficie de un cristal.

2.2.2 Procesos Atómicos en las Primeras Etapas de Crecimiento

El crecimiento sobre la superficie de un cristal a partir de un vapor es un proceso fuera de equilibrio y está gobernado por factores tanto termodinámicos como cinéticos. En la sección anterior fueron presentadas, en forma breve, algunas de las propiedades termodinámicas de la superficie de un cristal. A continuación nos ocuparemos de describir algunos de los mecanismos cinéticos, a nivel atómico, que juegan un papel importante durante el crecimiento de estas superficies.

Difusión de átomos libres en una terraza

Este es el proceso cinético más importante en el crecimiento de una película delgada y está caracterizado por un coeficiente de difusión D . Para el caso de un átomo libre sobre una terraza, D es una medida de la rapidez con la que este átomo se desplaza de un sitio a otro.

Dada la rapidez de deposición F de átomos provenientes de la fase fluida, el valor de D está relacionado con la distancia que en promedio tendrá que recorrer un átomo recién depositado antes de encontrarse con alguna otra estructura

en la superficie (otro átomo o un cúmulo de átomos, por ejemplo) (Zhang y Lagally [97]). En las primeras etapas de crecimiento, los átomos libres tienden a agruparse para formar cúmulos de una monocapa de altura, a los que llamaremos islas. Se ha encontrado que el número de islas por unidad de área aumenta con F y decrece con D (Mo et al. [91]; Pimpinelli, Villain y Wolf [92]), aunque depende también de otros factores.

Desafortunadamente, el coeficiente de difusión es, en general, difícil de determinar. Sin embargo, la aplicación de nuevas técnicas, entre las que se incluye la STM, ha permitido un progreso significativo en la determinación del mismo.

Nucleación

La formación de una isla tiene asociados dos cambios en energía libre. El primero es una disminución de energía relacionada con la cohesión de los átomos que constituyen la isla. El segundo es un término positivo asociado a la creación de la línea del borde de la isla (tensión de línea o energía de escalón). Para islas de tamaño pequeño, el término de energía del escalón (positivo) es el más importante y la isla es inestable. Conforme el tamaño aumenta, el término proporcional al área cubierta (negativo) comienza a dominar hasta que, a partir de un cierto tamaño (denominado tamaño crítico) la estructura se vuelve estable. De esto podemos concluir que para que se pueda formar una isla deben coincidir cierto número de átomos libres de modo que al unirse, la estructura formada sobrepase el tamaño crítico. Para un sistema dado, este tamaño depende de la temperatura y el grado de sobresaturación. Se ha encontrado que para superficies de semiconductores y metales a condiciones típicas de crecimiento, el tamaño crítico es tan pequeño como el de un solo átomo (Mo et al. [91]; Pimpinelli, Villain y Wolf [92]; Vasek et al. [95]; Quesenberry y First [96]). De modo que una estructura de tamaño igual o mayor que un dímero es estable.

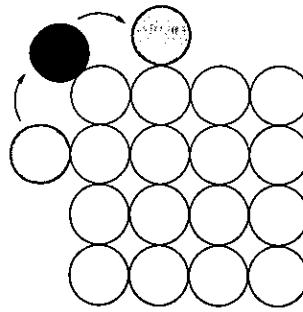


Figura 2.4: Cruce de esquinas.

Difusión en los bordes

Este mecanismo entra en juego cuando las islas comienzan a crecer. Los átomos que constituyen el borde de una isla pueden difundirse a lo largo de este borde. Dependiendo de la libertad con la que lo hagan (alta o baja difusión en los bordes) se define la forma que la isla adopta al ir creciendo (Zhang, Chen y Lagally [94]; Witten y Sander [81]; Meakin [83]). Se han identificado dos clases de islas de acuerdo a su forma: compactas y fractales. Las formas compactas se observan en los casos en que la difusión en los bordes es alta, porque esto permite la relajación energética por medio de la redistribución libre de átomos en los bordes. Algunos ejemplos de formas compactas son cuadradas (o rectangulares), triangulares y hexagonales. Por supuesto, estas formas dependen de la geometría de la malla del cristal.

En los casos en los que la difusión es baja, se favorece la formación de islas fractales con bordes rugosos, en donde los átomos recién incorporados al borde de una isla permanecen en el sitio en el que se incorporaron o cerca de él.

Difusión en esquinas

Otro factor importante es la energía asociada al cruce de esquinas (figura 2.4). Aun cuando exista difusión en los bordes, el cruce de una esquina (el punto que une dos bordes rectos de un escalón) puede ser difícil, porque este proceso requiere que un átomo disminuya su número de coordinación. Cuando no existe un cruce de esquinas efectivo, el crecimiento da origen a islas de formas fractales.

Difusión de islas y *ripening*

Cuando la temperatura es lo suficientemente alta como para hacer cinéticamente activos a los átomos internos de una isla, ocurren nuevos fenómenos. Los más importantes son la difusión de islas y el *ripening*. La difusión de islas se refiere al movimiento del centro de masa de una isla. Por lo general este proceso es más lento entre mayor sea el tamaño de la isla. El *ripening* es la redistribución de materia entre islas distintas (Ostwald [1900]). Cuando este fenómeno ocurre las islas grandes crecen a expensas de las islas pequeñas. Se ha observado que la temperatura a la que comienza a manifestarse el *ripening* es cercana a la temperatura de transición de islas fractales a islas compactas.

Cruce de escalones

El transporte de materia entre capas es también un factor importante en el crecimiento de películas delgadas. Está controlado principalmente por una barrera energética que debe pasar un átomo libre para subir o bajar un escalón (Ehrlich y Hudda [66]). Esta barrera existe porque al cruzar un escalón, un átomo libre debe disminuir su número de coordinación (figura 2.5). En este sentido, este es un fenómeno similar al cruce de esquinas. Para hacer crecer una película uniforme es indispensable que el cruce de escalones sea un proceso eficaz. Cuando la barrera energética es grande, la película depositada tenderá a ser rugosa. Por ejemplo, si los átomos libres sobre una isla no pueden migrar hacia la terraza inferior, su densidad irá aumentando hasta que estos átomos se unan entre sí, formando una nueva isla sobre la ya existente. Esto ocurrirá también con los átomos depositados sobre la nueva isla y así sucesivamente, formando islas tridimensionales e imposibilitando que la capa formada sea lisa o uniforme.

Efecto Schwoebel

Schwoebel [68] encontró que, debido a la existencia de la barrera para el cruce de escalones, un átomo libre que se encuentra cerca de un escalón tiene una probabilidad distinta de incorporarse a este escalón desde la terraza superior o inferior a este. Este efecto es uno de los factores determinantes en la estabilidad de un tipo de crecimiento conocido como flujo de escalones.

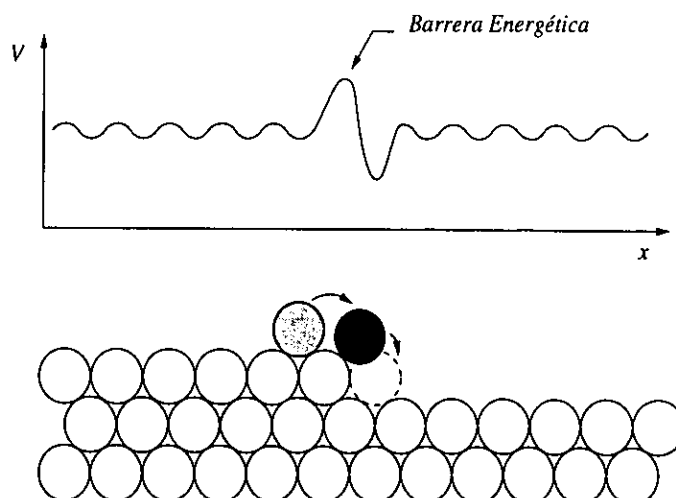


Figura 2.5: Potencial que siente un átomo libre sobre la superficie de un cristal cerca de un escalón.

2.2.3 Tipos y Modos de Crecimiento

El crecimiento de películas delgadas sobre cristales puede clasificarse según distintos criterios. Algunos ejemplos son: la morfología del sustrato empleado, las condiciones de crecimiento y la naturaleza del material depositado.

Comenzaremos por distinguir entre dos tipos de crecimiento según la naturaleza del material depositado: aquel en el que los átomos de un material se depositan en un sustrato del mismo material (crecimiento homoepitaxial) y aquel en el que el sustrato y el material depositado son diferentes (crecimiento heteroepitaxial). Para cada caso se favorecen distintos modos de crecimiento. La razón principal es que en un sistema heteroepitaxial, la diferencia entre las constantes de malla del sustrato y el material depositado, genera un campo de esfuerzos y también un campo de deformación conocido como *misfit*. La relajación energética debida a esta deformación *misfit* puede crear dislocaciones o bien la ruptura de un frente uniforme para dar lugar a un arreglo de estructuras tridimensionales (Goldstein et al. [85]; Eaglesham y Cerullo [90]; Mo et al. [90]).

Modos de crecimiento en un sistema heteroepitaxial

Se han identificado tres modos de crecimiento heteroepitaxial. La presencia de cada uno depende del grado de diferencia en las constantes de malla y de las energías de interfase. Uno de estos modos consiste en el crecimiento uniforme (capa por capa) del material depositado. A este se le conoce como el modo de Frank-van der Merwe

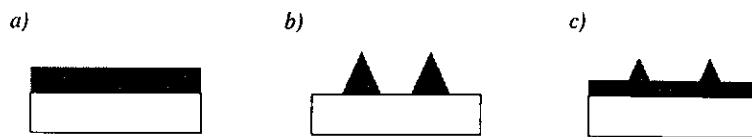


Figura 2.6: Modos de crecimiento heteroepitaxial: a) Modo de Frank-van der Merwe, b) Modo de Volmer-Weber y c) Modo de Stranski-Krastanow.

(FM; Frank y van der Merwe [49]) y se da cuando la diferencia en constantes de malla (y por lo tanto la deformación *misfit*) no es muy grande. Además de esto, debe cumplirse que $\sigma_d + \sigma_{s-d} < \sigma_s$, donde σ_s , σ_d y σ_{s-d} son, respectivamente, las energías de superficie de sustrato, material depositado y de interfase entre estos dos. Si estas dos condiciones no se cumplen, el mecanismo de relajación energética del sistema da lugar a una ruptura del frente uniforme que se manifiesta en los modos de Volmer-Weber (VW; Volmer y Weber [26]) y de Stranski-Krastanow (SK; Stranski y Krastanow [37]). En el primero de estos (figura 2.6), el material depositado forma islas tridimensionales sobre el sustrato y lo cubre parcialmente. En el modo de Stranski-Krastanow el crecimiento comienza, como en el modo de Frank van-der Merwe, con una capa que moja al sustrato. Cuando la película alcanza un cierto espesor, surge una inestabilidad y el crecimiento procede en forma de islas. En este sentido el modo SK puede considerarse como una combinación de los modos FM y VW.

Flujo de escalones

Dentro de la clasificación del tipo de crecimiento según la morfología del sustrato, una variante al crecimiento de capa por capa es el crecimiento por flujo de escalones. Este se da cuando el material es depositado sobre un superficie escalonada. Para obtener una superficie así, el cristal (sustrato) se corta en una orientación muy cercana a una orientación de alta simetría, consiguiendo así una escalera. Frecuentemente esta escalera tiene escalones igualmente espaciados y de una monocapa de altura. En un crecimiento homoepitaxial sobre este sustrato, los átomos depositados se van incorporando a los bordes de los escalones haciéndolos avanzar uniformemente en dirección paralela a la superficie (Villain [91]). En la figura 3.2 se representa un crecimiento de este tipo. Esta técnica se utiliza con el fin de hacer crecer películas delgadas uniformes. Esto se logra gracias a que los átomos recién depositados, se incorporan con alta probabilidad a un escalón ya existente en lugar de formar cúmulos (islas) entre

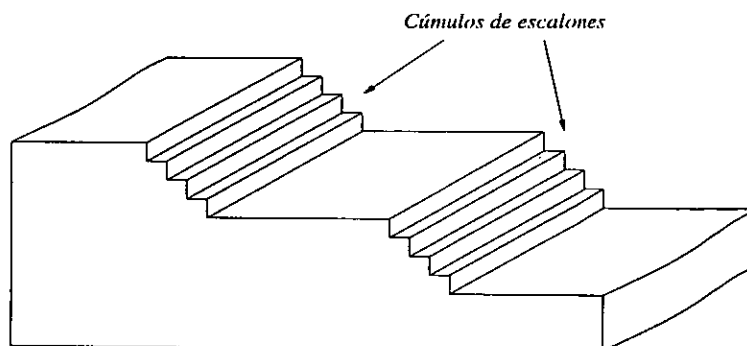


Figura 2.7: Acumulación de escalones

ellos. Sin embargo, existe un gran número de factores, tanto termodinámicos como cinéticos, que producen inestabilidades en este tipo de crecimiento.

El tipo de inestabilidad que más se ha estudiado en este sistema es la acumulación de escalones (*step bunching*). Cuando en un frente de crecimiento, los escalones tienden a no permanecer igualmente espaciados, comienzan a formarse regiones de alta densidad de escalones conocidas como cúmulos de escalones (figura 2.7). Este fenómeno hace a la superficie más rugosa. La combinación y competencia de distintos factores definen cuando un modo de crecimiento es estable o inestable frente a la acumulación de escalones. Ejemplos de factores que desestabilizan el frente de crecimiento son la presencia de impurezas (van der Eerden y Müller-Krumbhaar [86]) y las interacciones elásticas entre escalones (Tersoff [95]). Por otra parte, factores como el efecto Schwoebel contribuyen a impedir la acumulación de escalones (Pimpinelli y Villain [98]).

Además de la acumulación, existe otro tipo de inestabilidad en el flujo de escalones. Bales y Zangwill (Bales y Zangwill [90]) encontraron que, debido al efecto Schwoebel, la forma recta de los escalones en crecimiento puede ser inestable, produciendo escalones ondulados. Recientemente, Li et al. [00] encontraron, por medio de un criterio energético, otra inestabilidad del frente plano para el crecimiento heteroepitaxial en sus primeras etapas. El origen de esta inestabilidad es elástico. En el capítulo 3 se describe con más detalle este trabajo y se discuten sus resultados.

ISLAS SOBRE UN SUSTRATO ESCALONADO

En el capítulo 2 nos referimos a una técnica de crecimiento de películas delgadas que consiste en el flujo de escalones sobre una superficie escalonada. Se mencionó también la existencia de algunos tipos de inestabilidad presentes en este modo de crecimiento.

En este capítulo nuestra atención se centrará en las primeras etapas del flujo de escalones en un sistema de crecimiento heteroepitaxial, cuando aún no se ha alcanzado un cubrimiento de una monocapa sobre el sustrato.

Para el crecimiento heteroepitaxial por flujo de escalones se esperan análogos bidimensionales de los modos de Frank-van der Merwe, Volmer-Weber y Stranski-Krastanow (Ball [58]) observados en el crecimiento heteroepitaxial sobre un sustrato plano.

Li et al. [00] demostraron, con un criterio energético, que existe una inestabilidad de origen elástico en el crecimiento heteroepitaxial sobre una superficie escalonada cuando el cubrimiento es bajo. Específicamente, mostraron cómo para cubrimientos bajos el tener un frente de crecimiento plano (con tiras rectas paralelas a los escalones de sustrato) es energéticamente más costoso que tener un frente no uniforme. Esto no sucede a cubrimientos altos en donde el frente plano es estable. Estos resultados fueron corroborados experimentalmente para el sistema $CaF_2/Si(111)$.

En lo que resta de este capítulo se describe con cierto nivel de detalle el desarrollo y resultados obtenidos por Li et al., dado que su trabajo está íntimamente relacionado con el tema central de esta tesis.

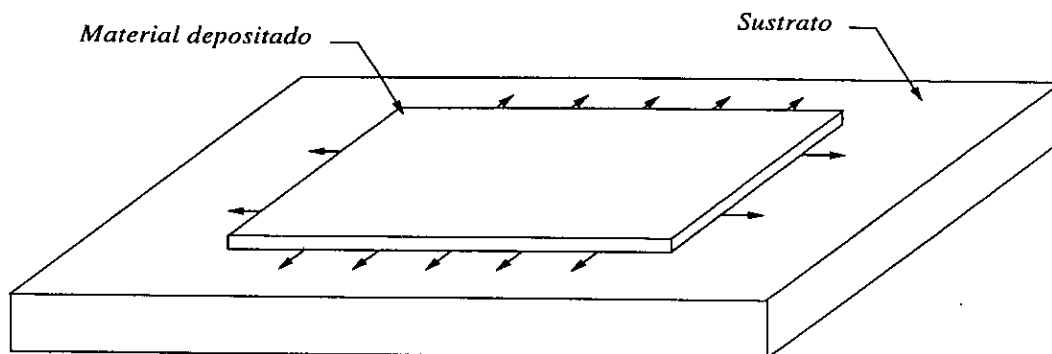


Figura 3.1: Distribución de fuerzas en el sustrato debida a la presencia de una estructura plana en su superficie.

3.1 Energía de Deformación Elástica en un Sistema Heteroepitaxial

Como se menciona en el capítulo 2, la deformación *misfit*, presente en el crecimiento heteroepitaxial, se origina por una diferencia en las constantes de malla entre el sustrato y el material depositado. El hecho de que esta deformación exista, implica que existe también una energía asociada a la deformación. De modo que la presencia de cualquier estructura de un material depositado distinto al sustrato, tiene asociada una energía de deformación. Nuestro objetivo es calcular esta energía para cuando se tiene una estructura plana de una monocapa de altura, ya que este es el tipo de estructuras que encontramos en el sistema que nos interesa. El problema puede abordarse de la siguiente manera:

Se tiene una estructura cuya altura es la de una monocapa, depositada sobre un sustrato plano. Como el espesor de la monocapa es muy pequeño comparado con el del sustrato, este último puede tratarse físicamente como un medio semiinfinito sujeto a fuerzas en la región en la que se encuentra la estructura. El sustrato estará entonces deformado debido a dichas fuerzas, que podemos considerar distribuidas a lo largo del borde de la región que define la estructura (figura 3.1). Como consecuencia habrá un campo de desplazamiento en todo el sustrato. Nos interesa calcular este desplazamiento únicamente para los puntos que constituyen el borde de la estructura porque es en esta región donde se localizan las fuerzas que deforman el medio y hacen trabajo.

El campo de desplazamiento en un punto se puede calcular integrando las ecuaciones (A.16) y (A.17)¹ sobre la línea que define el borde del material depositado. La energía libre local en ese mismo punto está dada por la ecuación (A.19). Integrando nuevamente sobre todo el borde, obtendremos la energía libre elástica total asociada a la presencia de la estructura considerada. En forma general podemos expresar esta energía como

$$E_{def} = -\frac{1}{2} \int \int \mathbf{u}(\mathbf{r}_1, \mathbf{F}(\mathbf{r}_2)) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}_1) dr_2 dr_1 \quad (3.1)$$

En un punto \mathbf{r}_1 del borde de la estructura de material depositado el desplazamiento está dado por

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}_1) = \int \mathbf{u}(\mathbf{r}_1, \mathbf{F}(\mathbf{r}_2)) dr_2 = \frac{1+\sigma}{2\pi E} \oint \frac{1}{r} \left(2(1-\sigma)\mathbf{F} + 2\sigma \frac{\mathbf{r}}{r^2} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}) \right) dr_2 \quad (3.2)$$

en donde $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ y la integración es sobre los puntos \mathbf{r}_2 en donde está la distribución de fuerzas.

3.2 *Energía de un Sistema de Tiras sobre las Terrazas de un Sustrato Escalonado*

Consideremos un sustrato escalonado sobre el cual ha crecido una estructura en forma de tira en cada una de sus terrazas. Este caso es un análogo bidimensional al modo de crecimiento de Frank-van der Merwe. Como se muestra en la figura 3.2, los bordes de los escalones del sustrato fungen como base para el crecimiento. En cada terraza hay una tira de material depositado que la cubre parcialmente y este cubrimiento es el mismo en todas las terrazas. Este es el escenario clásico para un crecimiento de flujo de escalones en sus primeras etapas.

Nos interesa calcular la energía por unidad de área que tiene asociado un sistema con frentes de crecimiento planos. Esta energía debe ser la suma de las contribuciones elástica, de escalón de material depositado y de interescalón. Llamamos escalón de material depositado al frente de crecimiento de la película e interescalón al borde de la película en contacto con el escalón del sustrato. La energía elástica se puede calcular con el método descrito en la sección anterior.

¹Sólo nos interesan las componentes del desplazamiento paralelas al plano

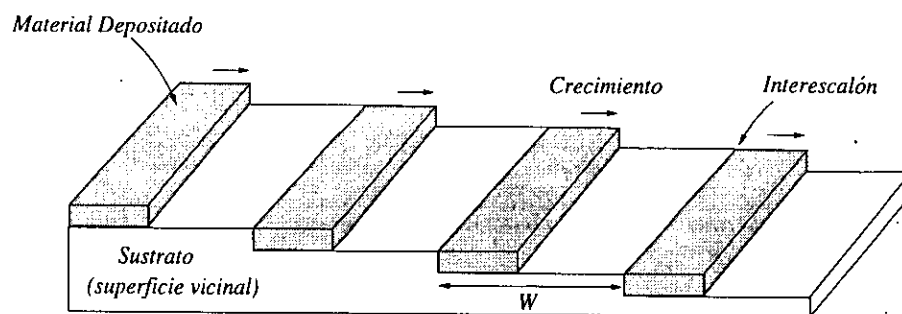


Figura 3.2: Crecimiento de un frente plano sobre un sustrato escalonado en su etapa inicial.

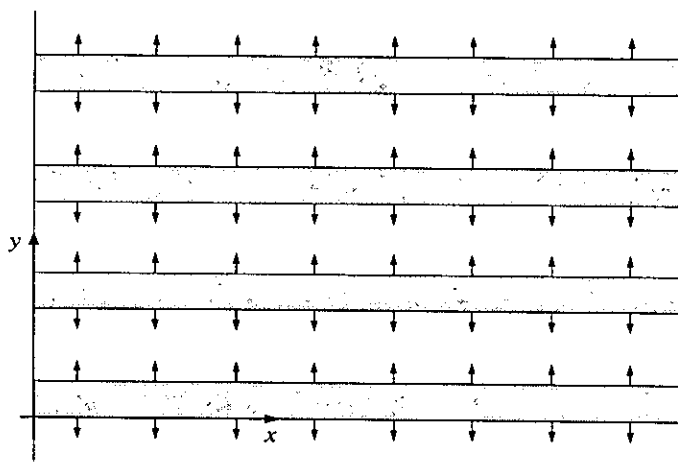


Figura 3.3: Distribución de fuerzas sobre los bordes rectos del material depositado.

Considerado como un medio semiinfinito deformado por fuerzas aplicadas sobre su superficie, el sistema se representa en la figura 3.3.

Para el cálculo de la energía por unidad de área consideraremos un sistema infinito en el que, por simetría, la energía local en los bordes de las tiras sea uniforme en la dirección x e igual en todas las terrazas¹.

A continuación se presentan dos resultados a partir de los cuales se puede calcular sistemáticamente la energía por unidad de área de la configuración de tiras. El primero es el desplazamiento u en un punto x debido a una distribución uniforme de fuerzas sobre una recta separada una distancia b de dicho punto (figura 3.4). El

¹Estrictamente tendríamos que considerar un sistema finito, en el cual se tome en cuenta el efecto de las fronteras. Sin embargo, si el sistema es muy grande y nos limitamos a estudiar una región lejos de estas fronteras, la aproximación de considerar al sistema como infinito es aceptable.

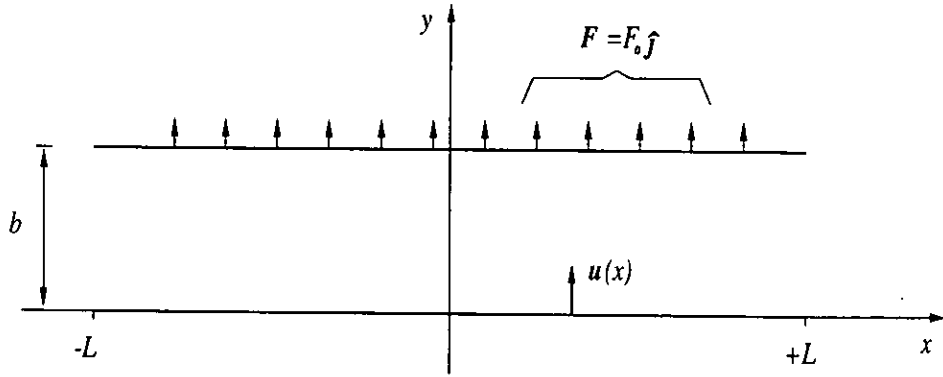


Figura 3.4: Desplazamiento en un punto debido a una distribución uniforme de fuerzas sobre una recta.

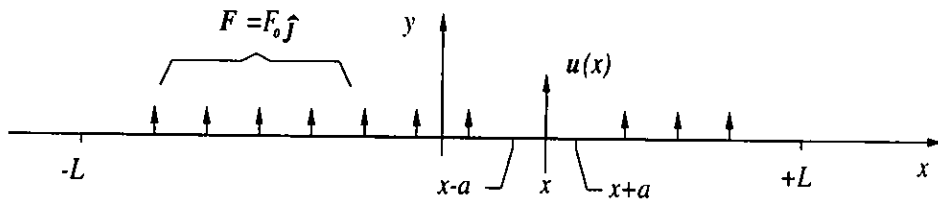


Figura 3.5: Desplazamiento en un punto sobre una recta debido a una distribución uniforme de fuerzas sobre la misma recta.

desplazamiento, u para este caso está dado por

$$\begin{aligned}
 u_b(x) = \frac{1 + \sigma}{2\pi E} 2F_0 \left\{ \left[(1 - \sigma) \ln \left(\frac{\sqrt{b^2 + (L - x)^2} + (L - x)}{\sqrt{b^2 + (L + x)^2} - (L + x)} \right) + \right. \right. \\
 \left. \left. \sigma \left(\frac{L - x}{\sqrt{b^2 + (L - x)^2}} + \frac{L + x}{\sqrt{b^2 + (L + x)^2}} \right) \right] \hat{j} + \right. \\
 \left. \sigma b \left[\frac{1}{\sqrt{b^2 + (L + x)^2}} - \frac{1}{\sqrt{b^2 + (L - x)^2}} \right] \hat{i} \right\} \quad (3.3)
 \end{aligned}$$

donde F_0 es la magnitud de la fuerza por unidad de longitud, x es la posición del punto en donde se calcula el desplazamiento, y $2L$ es la longitud del segmento de recta en donde se encuentra la distribución de fuerzas. El subíndice b indica que (3.3) es válida únicamente para $b \neq 0$.

Además del resultado anterior, es necesario obtener el desplazamiento en un punto sobre la recta en la que se encuentra la distribución de fuerzas. Este caso se esquematiza en la figura 3.5. El desplazamiento está dado por

$$u_0(x) = \frac{1 + \sigma}{2\pi E} 2F_0 (1 - \sigma) \ln \frac{(L + x)(L - x)}{a^2} \hat{j} \quad (3.4)$$

donde a es un parámetro llamado *cutoff* que corresponde a un intervalo alrededor del punto x que se ha excluido de la integral de u porque el integrando diverge cerca de este punto¹. Físicamente a corresponde a una distancia del orden de magnitud de la constante de malla del sustrato.

Como se mencionó anteriormente, si se considera un sistema muy grande, se pueden ignorar las fronteras y podemos obtener una expresión independiente de x para la energía. Esta condición puede expresarse como $|x| \ll L$. Introduciendo esta aproximación, eliminamos la dependencia en x de las ecuaciones (3.3) y (3.4) y obtenemos

$$u_b = \frac{1 + \sigma}{\pi E} 2F_0 \left((1 - \sigma) \ln \frac{L + \sqrt{b^2 + L^2}}{|b|} + \frac{\sigma L}{\sqrt{b^2 + L^2}} \right) \hat{j} \quad (3.5)$$

y

$$u_0 = \frac{1 + \sigma}{\pi E} 2F_0 (1 - \sigma) \ln \frac{L}{a} \hat{j} \quad (3.6)$$

Con estos dos resultados como base, se calcula la contribución al desplazamiento de todos los bordes de la distribución de fuerzas. Luego, sumando estas contribuciones se obtiene el desplazamiento total en un punto. Con este resultado se puede calcular fácilmente la energía elástica por unidad de área. A esta energía hay que añadirle las energías de escalón (C_1) e interescalón (C_i) por unidad de longitud. El resultado es

$$E = \frac{1}{W} \left[C_1 + C_i - 2C_2 \ln \left(\frac{W}{2\pi a} \text{sen}(\pi\theta) \right) \right] \quad (3.7)$$

donde $C_2 = \frac{1-\sigma}{2\pi E} F_0^2$, W es el ancho de una terraza y θ es la fracción de la terraza cubierta por el material depositado ($\theta = \text{ancho de la tira} / \text{ancho de la terraza}$) a la que llamamos cubrimiento. La dependencia de la energía elástica con el cubrimiento se muestra en la figura 3.6. Como se puede apreciar, el valor de la energía es muy alto para cubrimientos cercanos a cero y a uno, valores que físicamente corresponden a tiras muy estrechas ($\theta \rightarrow 0$) y a tiras cuyo ancho es cercano al ancho de una terraza ($\theta \rightarrow 1$). En la siguiente sección se muestra que existen configuraciones alternativas que abaten el costo energético cuando el cubrimiento es bajo.

¹El desplazamiento en un punto no está definido para una fuerza aplicada en ese mismo punto.

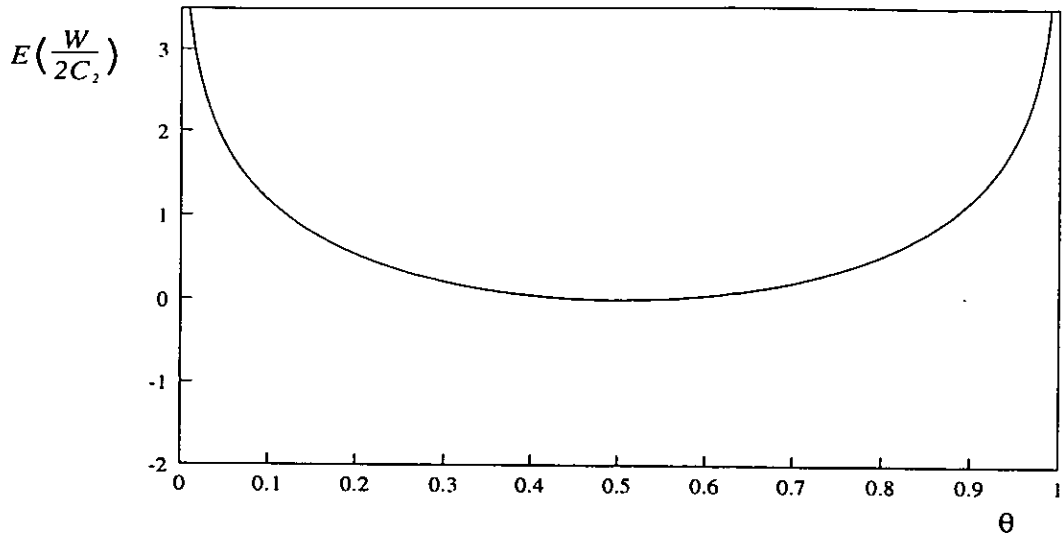


Figura 3.6: Dependencia de la energía elástica con el cubrimiento para un arreglo de tiras.

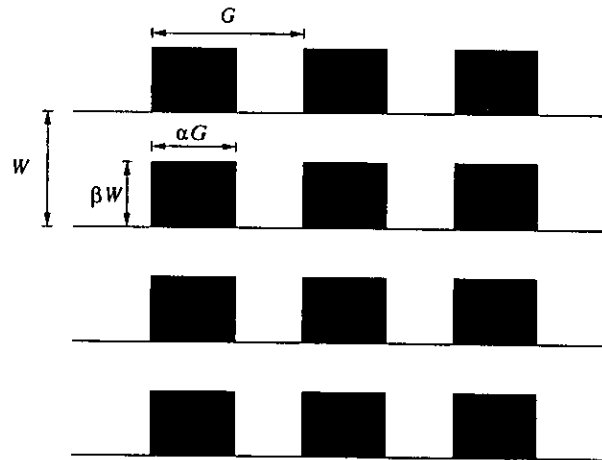


Figura 3.7: Arreglo regular de islas rectangulares.

3.3 Energía de un Arreglo de Islas Rectangulares

Li et al. estudiaron energéticamente una configuración alternativa al arreglo de tiras paralelas. Su propuesta es un arreglo de islas rectangulares con periodicidad G , en la dirección de los escalones del sustrato. En la figura 3.7 se representa esta configuración.

El ancho y largo de cada isla se definen como $g = \alpha G$ y $w = \beta W$ respectivamente, donde $0 \leq \alpha \leq 1$ y $0 \leq \beta \leq 1$. Se puede demostrar fácilmente que $\theta = \alpha\beta$. Obtenida de manera similar a la energía del arreglo de tiras, la energía por unidad de área para el arreglo de islas está dada por

$$E = \frac{\beta}{G} \left[C_\beta - C_2 \ln \left(\frac{G}{2\pi a} \operatorname{sen}(\pi\alpha) \right) \right] + \frac{\alpha}{W} \left[C_\alpha - C_2 \ln \left(\frac{W}{2\pi a} \operatorname{sen}(\pi\beta) \right) \right] + \frac{\alpha}{W} (C_i - C_s - C_\alpha) + \frac{1}{W} C_s \quad (3.8)$$

donde C_s es la energía de escalón de sustrato y C_α y C_β son las energías de escalón de la isla en las orientaciones α y β respectivamente.

Dado un cierto cubrimiento y un cierto ancho de la terraza, las variables que especifican completamente una configuración son G y α ó β . La energía de la configuración estará entonces determinada por los valores que tomen estas variables independientes. Entonces, para cada cubrimiento deben existir determinados valores de G y α (por ejemplo) que optimicen el arreglo de islas, *i.e.*, que minimicen la energía. Estos valores pueden calcularse numéricamente para obtener una configuración de equilibrio para cada valor de θ .

Para los sistemas en los que la energía elástica domina sobre las energías de escalón, la dependencia de la energía de equilibrio con θ estará determinada únicamente por la relación W/L_0 . L_0 corresponde al tamaño lineal de una isla aislada estable (valga la redundancia) y está dada por $L_0 = 2ae^{\frac{C_1}{C_2}+1}$ (Ng y Vanderbilt [95])¹.

3.4 Resultados del Análisis del Criterio Energético

Li et al. compararon la energía asociada a un arreglo de islas para distintos valores de W/L_0 con la energía asociada a un arreglo de tiras. En todos los casos considerados encontraron que un arreglo de islas es favorable a bajos cubrimientos. En la figura 3.8 se muestra la comparación para $W/L_0 = 10$.

El punto donde se unen las curvas corresponde físicamente a la transición de islas a tiras. Cuando esto sucede, el crecimiento procede como flujo ideal de escalones. Existe entonces un cubrimiento crítico para cada valor W/L_0 en donde ocurre la transición de islas a tiras. Este cubrimiento está dado por la expresión

$$\theta_c \left(\pi \cot \pi \theta_c + \frac{W}{L_0} \right) + \ln \frac{L_0 \pi}{W e \operatorname{sen} \pi \theta_c} + \frac{C_i - C_s - C_1}{2C_2} = 0 \quad (3.9)$$

que se obtiene al sustituir el valor $\alpha = 1$ en la condición de minimización de la energía del arreglo de islas.

¹Esta expresión se obtiene minimizando (con respecto al tamaño y la forma) la energía asociada a una isla rectangular depositada sobre un sustrato en donde no hay ninguna otra estructura.

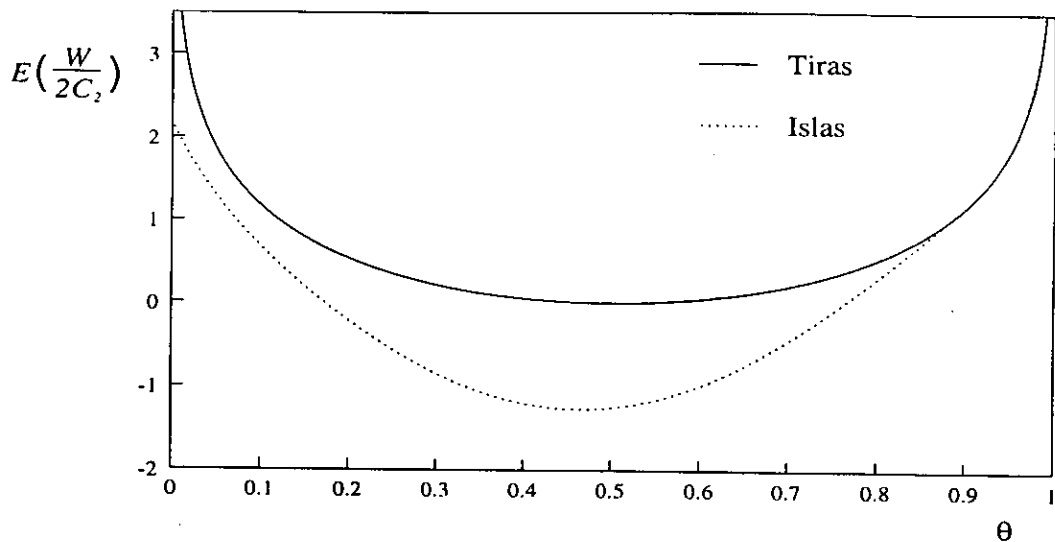


Figura 3.8: Comparación energética entre un arreglo de tiras y un arreglo óptimo de islas rectangulares.

Resolviendo (3.9) numéricamente, se puede encontrar el valor del cubrimiento crítico, θ_c .

En resumen, el estudio teórico realizado por Li et al. predice una inestabilidad del frente plano a cubrimientos bajos. El criterio energético sustenta la alternativa de un arreglo de islas para esta condición. Se ha encontrado también que esta inestabilidad se suprime a cubrimientos altos dando lugar a un frente de crecimiento plano. La transición involucrada representa un tipo de crecimiento de Stranski-Krastanow invertido en dos dimensiones, es decir, el crecimiento comienza con la formación de islas que en etapas posteriores se unen para dar lugar a un frente uniforme.

En el siguiente capítulo, la parte medular de esta tesis, se presentan los resultados de un análisis de estabilidad lineal aplicado a un frente de crecimiento plano.

ESTABILIDAD DE UN FRENTE DE CRECIMIENTO PLANO

En el trabajo de Li et al. [00] (descrito en el capítulo 3) se demuestra que a cubrimientos bajos, el frente plano en el crecimiento por flujo de escalones es energéticamente menos favorable que un arreglo regular de islas rectangulares.

Estos resultados nos han motivado a realizar un análisis de estabilidad lineal para el frente plano. Un análisis de estabilidad lineal nos permite estudiar la dinámica del sistema a tiempos cortos.

Si bien con un criterio energético podemos identificar el estado de menor energía entre dos o más estados posibles, el análisis de estabilidad nos da mucha más información, ya que nos permite conocer la forma en la que cada modo crece o decae y el modo que crece más rápidamente. Este, en muchos casos, define la longitud de onda del patrón así como la evolución de la interfase hacia un nuevo estado. En este trabajo proponemos una dinámica de relajación de energía consistente en el reacomodo de materia por difusión a lo largo del borde del frente. Nuestro análisis será válido cuando el mecanismo de transporte aquí considerado sea el mecanismo dominante del crecimiento.

4.1 *Análisis de Estabilidad*

El concepto de inestabilidad es fundamental para la teoría de morfología de interfases ya que en todos los sistemas de interfases fuera de equilibrio en los que se forman patrones existe una inestabilidad morfológica. Podemos entender inestabilidad como la tendencia de un sistema a evolucionar hacia otro estado cuando se somete a una perturbación. Un método para estudiar la estabilidad de un sistema es el análisis de estabilidad lineal. Para describir en que consiste utilizaremos un ejemplo concreto.

Supongamos que tenemos una interfase dentro de un sistema bidimensional, cuya

posición está descrita por la función $y = y(x, t)$. La interfase está en un estado estacionario si $y = y_s(x)$, *i.e.*, si su posición no depende del tiempo. Decimos que este estado es linealmente estable, si cualquier estado $y = y_s(x) + f(x, t)$ para el cual $f(x, 0)$ es muy pequeña, evoluciona hacia $y_s(x)$. En caso contrario, el estado es inestable. La función $f(x, t)$ se llama perturbación.

Para estudiar entonces la inestabilidad de cualquier forma, en principio se debe proponer una perturbación general. Una forma de hacerlo es descomponer esta perturbación en ondas planas y estudiar la estabilidad de cada modo¹. La función $f(x, t)$ puede definirse entonces como

$$f(x, t) = \delta_0 e^{\omega t + ikx} \quad (4.1)$$

donde el primer término del exponente, ωt , indica la dependencia temporal y el segundo, ikx , la dependencia espacial, en donde k es el modo de Fourier. Dependiendo de su signo, ω determina si la función crece o decrece en el tiempo y que tan rápido lo hace. Definimos entonces a ω como la rapidez de crecimiento. Esto se traduce en que un modo sea estable si $\omega < 0$ ó inestable si $\omega > 0$, de tal forma que si se conoce ω para cada modo k , se puede saber si un estado o configuración es estable. Cuando $\omega < 0$ para todos los modos la interfase $y_s(x)$ es estable, cuando existe al menos un modo para el cual $\omega > 0$ la interfase $y_s(x)$ es inestable. Con frecuencia cuando existe inestabilidad, ω es positiva solo para ciertos valores de k y existe un valor de k para el cual ω es máxima. Este valor de k corresponde al modo que crece más rápidamente. Físicamente esto se refleja en que comienza a formarse un patrón cuya longitud de onda característica es la que corresponde a dicho modo.

Desgraciadamente el análisis de estabilidad lineal sólo es capaz de predecir lo que ocurre a tiempos cortos. En la dinámica hacia otro estado, un sistema puede estar afectado por factores de tipo no lineal. Sin embargo, en muchos casos se ha observado que la longitud de onda dominante en el análisis de estabilidad lineal coincide con la del estado estacionario o el estado de equilibrio en cuestión.

Para estudiar la estabilidad del frente plano en el crecimiento por flujo de escalones, se propone una perturbación como la que se muestra en la figura 4.1 en uno de los

¹Se puede demostrar que para el análisis de estabilidad lineal, los diferentes modos se desacoplan.

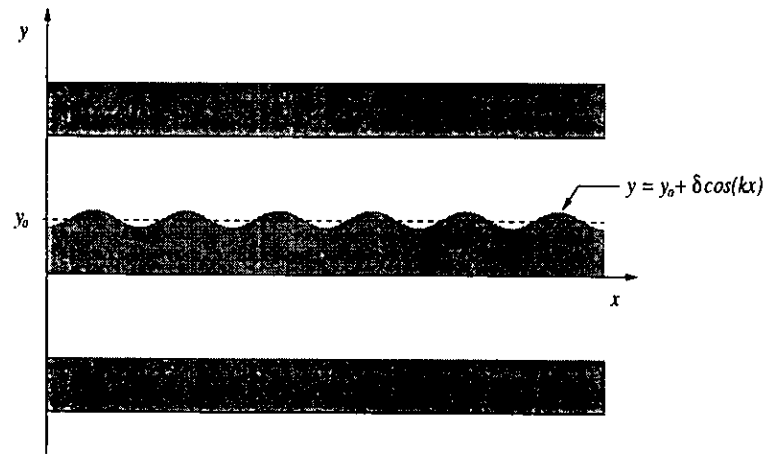


Figura 4.1: Perturbación en uno de los frentes de crecimiento del sistema.

frentes de crecimiento¹. Matemáticamente esta perturbación se describe como

$$\begin{aligned} y &= y_0 + \delta(t)\cos(kx) \\ \delta(t) &= \delta_0 e^{\omega t} \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde δ_0 es la amplitud de onda de la perturbación a $t = 0$ y k está dado por

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

donde λ es la longitud de onda. El parámetro ω es la rapidez de crecimiento de la perturbación. Dependiendo de su signo, el sistema será estable o inestable.

Para poder llevar a cabo el análisis de estabilidad es necesario establecer una dinámica o mecanismo de transporte de materia mediante el cual pueda variar la forma del borde del escalón.

4.2 Mecanismo de Transporte

Proponemos como mecanismo de redistribución de materia, la difusión a lo largo del frente de crecimiento perturbado. Esta consideración es válida en tanto existan argumentos que la justifiquen. Presentamos algunos en los siguientes puntos:

- A la temperatura a la que típicamente se lleva a cabo el crecimiento, la difusión de partículas en el bulto es muy baja, como también lo es la probabilidad de

¹En la sección 4.8.1 se discute esta propuesta.

que un átomo se desprenda del borde de un escalón hacia la terraza ya que disminuiría su número de coordinación.

- Es razonable suponer que la difusión de átomos sobre una terraza es lo suficientemente alta para que los átomos recién depositados tarden poco en incorporarse al frente de crecimiento.
- Consideramos el caso particular en el que el flujo de partículas que provienen de la terraza es tan lento, que en todo momento existe un equilibrio mecánico entre la película depositada y el sustrato.

Estudiamos pues el caso de tiras a las que ya fueron incorporados los átomos de la terraza (por lo que tienen una cantidad de materia fija), ya alcanzaron el equilibrio mecánico con el sustrato y por lo tanto, el mecanismo más probable de redistribución de materia para alcanzar el equilibrio termodinámico es la difusión a lo largo de los bordes.

Un gradiente en la energía local μ a lo largo del borde genera una fuerza impulsora y esta fuerza origina un flujo de partículas en la periferia. Suponiendo una respuesta lineal, este flujo está dado por

$$J_s \propto -\frac{\partial \mu}{\partial S} \quad (4.3)$$

donde $\frac{\partial}{\partial S}$ es la derivada a lo largo del borde. La velocidad normal del escalón en cualquier punto está directamente relacionada con la acumulación de materia en ese punto y es proporcional al gradiente del flujo a lo largo del borde.

$$v_n \propto -\frac{\partial J_s}{\partial S} \quad (4.4)$$

Al combinar las ecuaciones (4.3) y (4.4) obtenemos

$$v_n = D \frac{\partial^2}{\partial S^2} \mu(x) \quad (4.5)$$

donde D es proporcional a la constante de difusión. A primer orden en δ , $\frac{\partial^2}{\partial S^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ y tenemos

$$v_n = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mu(x) \quad (4.6)$$

Necesitamos entonces una expresión para la energía libre local μ en los puntos del borde perturbado.

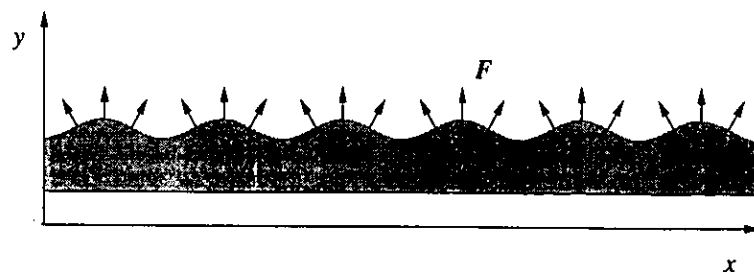


Figura 4.2: Distribución de fuerzas sobre un borde ondulado.

4.3 Cálculo de la Energía Elástica Local

El procedimiento a seguir en esta sección es muy similar al del cálculo de la energía para un sistema de tiras rectas, descrito en el capítulo anterior. Nos ocuparemos de calcular únicamente la energía elástica local sobre el borde de la tira ondulada, ya que suponemos que todos los demás bordes están fijos y que no pueden participar en el mecanismo de relajación energética del sistema.

La metodología, principios y suposiciones que utilizaremos para calcular la energía elástica local son esencialmente los mismos que se utilizaron en el capítulo 3. Por ejemplo, podremos emplear nuevamente la ecuación (3.5) para calcular la contribución de los bordes rectos al desplazamiento en un punto. Sin embargo, debemos encontrar una nueva expresión para calcular la contribución al desplazamiento en un punto del borde ondulado debido a una distribución de fuerzas en dicho borde. Al sumar estas dos contribuciones obtendremos la energía elástica local utilizando nuevamente la ecuación (A.19).

El carácter lineal del análisis de estabilidad demanda que se desprecien con respecto a todas las longitudes características del sistema (λ , W y y_0), los términos en δ de orden cuadrático o mayor. De aquí en adelante, esta condición se hará efectiva a lo largo del desarrollo de las ecuaciones.

Comenzaremos por describir la distribución de fuerzas en el borde ondulado descrito por (4.2). Consideramos que esta distribución es normal al borde y constante en magnitud (figura 4.2). De modo que la fuerza por unidad de longitud en la dirección x es

$$\mathbf{F}(x) = F_0(\delta n \text{sen}(kx) \hat{i} + \hat{j}) \quad (4.7)$$

En la figura 4.3 se muestran los tipos de contribuciones al desplazamiento en un

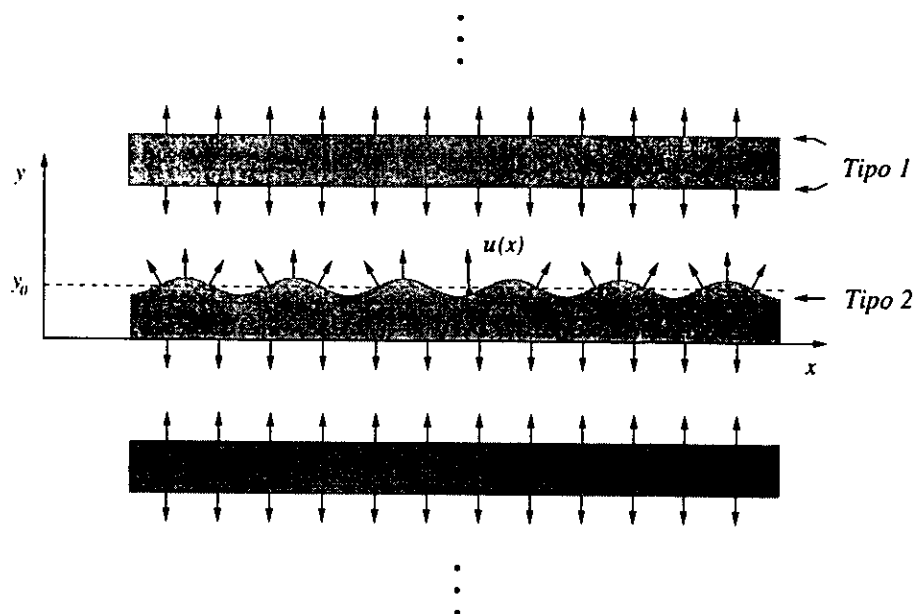


Figura 4.3: Contribuciones al desplazamiento en un punto sobre el borde ondulado; (1) es la contribución de la distribución de fuerzas a lo largo de los bordes rectos y (2) la contribución de la distribución a lo largo del mismo borde ondulado.

punto sobre el borde ondulado.

La contribución tipo 1, debida a los bordes rectos, está dada por la ecuación (3.5)¹, sólo que ahora, como el borde donde se evalúa $u(x)$ es ondulado, es necesario tomar la distancia b como variable (dependiente de x). Tenemos entonces que, en un punto sobre el borde ondulado, el desplazamiento debido a una distribución de fuerzas sobre una recta (borde recto) está dado por

- Contribución tipo 1

$$u_1(x) = \frac{1 + \sigma}{\pi E} 2F_0 \left((1 - \sigma) \ln \frac{L + \sqrt{(b_0 \pm \delta \cos kx)^2 + L^2}}{|b_0 \pm \delta \cos kx|} + \frac{\sigma L}{\sqrt{(b_0 \pm \delta \cos kx)^2 + L^2}} \right) \hat{j} \quad (4.8)$$

donde b_0 es la distancia de y_0 al borde recto y $b(x)$ en (3.5) está dado por $b(x) = b_0 \pm \delta \cos kx$.

Ahora presentaremos la contribución de la distribución sobre el borde ondulado al desplazamiento en un punto sobre este mismo borde (figura 4.4).

¹Nos situamos nuevamente en una región en x lejos de los bordes ($|x| \ll L$). A lo largo de este

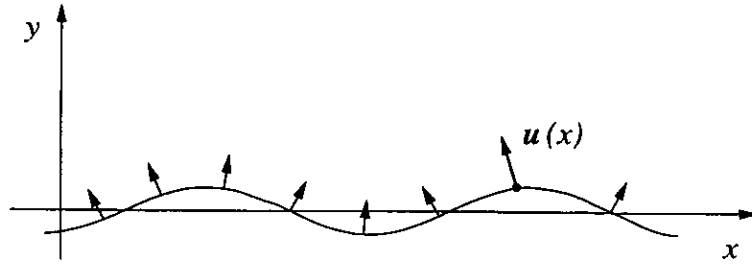


Figura 4.4: Contribución de la distribución de fuerzas sobre el borde ondulado al desplazamiento en un punto.

La expresión correspondiente es

- Contribución tipo 2

$$\mathbf{u}_2(x) = \frac{1 + \sigma}{\pi E} 2F_0 (1 - \sigma) \ln \frac{L}{a} \hat{\mathbf{j}} + \delta u_x \hat{\mathbf{i}} \quad (4.9)$$

La componente δu_x no se ha expresado de manera explícita porque es muy complicada. Como demostraremos más adelante, esta componente no contribuirá a la energía elástica. La dependencia en δ se escribió explícitamente por razones que se verán más adelante.

Sumando las contribuciones de todos los bordes se obtiene una expresión para la deformación en un punto en el borde ondulado. El resultado es

$$\mathbf{u}_{total}(x) = \frac{1 + \sigma}{\pi E} 2F_0 \left\{ (1 - \sigma) \ln \frac{\theta W + \delta \cos(kx)}{2a} + (1 - \sigma) \sum_{j=1}^m \ln \left(1 - \frac{(\theta W + \delta \cos(kx))^2}{j^2 W^2} \right) - \sigma \right\} \hat{\mathbf{j}} + \delta u_x \hat{\mathbf{i}} \quad (4.10)$$

donde m es el número de terrazas a ambos lados de la terraza donde se calcula el desplazamiento. En la obtención de la ecuación (4.10) se hizo una suposición adicional: el sistema es mucho más grande en la dirección x que en la dirección y , o bien, $jW \ll L$.

Para m grande se cumple la siguiente aproximación (Gradshteyn y Ryzhik [80]).

$$\text{sen } x \approx x \prod_{j=1}^m \left(1 - \frac{x^2}{j^2 \pi^2} \right) \quad (4.11)$$

capítulo, seguiremos tomando como válida esta consideración.

La identidad se cumple en el límite $m \rightarrow \infty$. Al utilizar esta relación, la ecuación (4.10) se transforma en

$$\mathbf{u}_{total}(x) = \frac{1+\sigma}{\pi E} 2F_0 \left\{ (1-\sigma) \ln \left[\frac{W}{2\pi a} \operatorname{sen} \left(\pi\theta + \frac{\pi\delta}{W} \cos(kx) \right) \right] - \sigma \right\} \hat{\mathbf{j}} + \delta u_x \hat{\mathbf{i}} \quad (4.12)$$

El siguiente paso es encontrar la energía elástica local, $-\frac{1}{2}\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}$, donde \mathbf{F} está dada por (4.7). Como la componente en x de la fuerza tiene una δ como factor, al multiplicarse por δu_x obtendremos un término en δ^2 que podemos despreciar. Queda justificado entonces el no haber expresado explícitamente el término u_x . La expresión que resulta para la energía elástica es

$$\mu_e(x) = -\frac{1+\sigma}{\pi E} F_0^2 \left\{ (1-\sigma) \ln \left[\frac{W}{2\pi a} \operatorname{sen} \left(\pi\theta + \frac{\pi\delta}{W} \cos(kx) \right) \right] - \sigma \right\} \quad (4.13)$$

Desarrollando a primer orden en δ , tenemos

$$\begin{aligned} \mu_e(x) = & -\frac{1+\sigma}{\pi E} F_0^2 \left\{ (1-\sigma) \ln \left[\frac{W}{2\pi a} \operatorname{sen}(\pi\theta) \right] + \right. \\ & \left. (1-\sigma) \frac{\pi\delta}{W} \cot(\pi\theta) \cos(kx) - \sigma \right\} \end{aligned} \quad (4.14)$$

La ecuación (4.14) representa la energía elástica local.

4.4 Efecto de la Elasticidad en la Relación de Dispersión

Tomando $\mu_e(x)$ de (4.14) y utilizando (4.6) con $\mu(x) = \mu_e(x)$ obtenemos

$$v_n = D' k_e \frac{\pi\delta k^2}{W} \cot(\pi\theta) \cos(kx) \quad (4.15)$$

donde $k_e = \frac{1+\sigma}{\pi E} (1-\sigma) F_0^2$. La constante de difusión se escribió primada porque más adelante consideraremos más de un efecto. Por otra parte, v_n está definida como

$$v_n = \mathbf{v} \cdot \hat{\mathbf{n}} \quad (4.16)$$

donde $\hat{\mathbf{n}} = \delta n \operatorname{sen}(kx) \hat{\mathbf{i}} + \hat{\mathbf{j}}$ es un vector normal al borde y $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt}$. Utilizando (4.2), obtenemos

$$v_n = \omega \delta \cos(kx) \quad (4.17)$$

Al igualar (4.15) y (4.17) y despejar ω obtenemos

$$\omega = k_e \left(\frac{D' \pi \cot(\pi\theta)}{W} \right) k^2 \quad (4.18)$$

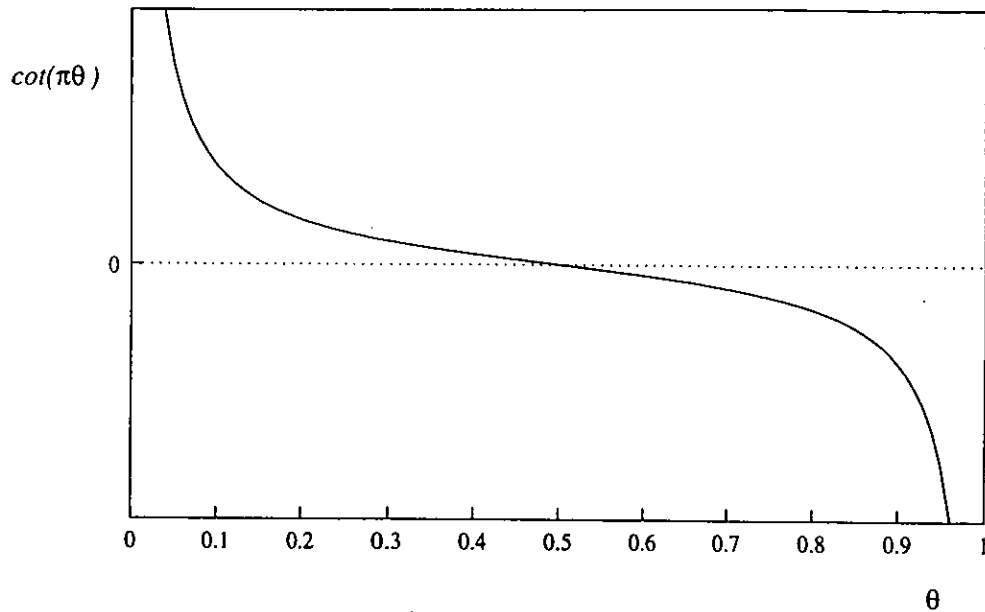


Figura 4.5: Gráfica de la función $\cot(\pi\theta)$ para el intervalo $0 < \theta < 1$.

Esta es la relación de dispersión. Es el resultado más importante del análisis de estabilidad lineal ya que nos indica cuando una perturbación crece o decrece. Dada su importancia, presentamos a continuación de manera gráfica, la información que se puede extraer de (4.18). Lo primero que es importante notar es que ω depende del cubrimiento θ y que de hecho, el término que define esta dependencia, $\cot(\pi\theta)$, definirá el signo de ω .

La gráfica de la función $\cot(\pi\theta)$ se muestra en la figura 4.5. En $\theta = 0$ y $\theta = 1$ hay asíntotas verticales. En $\theta = 0.5$ hay un cambio de signo. Esto implica que existe inestabilidad ($\omega > 0$) para todos los modos cuando $\theta < 0.5$ y estabilidad cuando $\theta > 0.5$. El cubrimiento crítico está dado por $\theta = 0.5$ y su estabilidad es neutra. En la figura 4.6 se grafica la relación de dispersión para distintos valores de θ . Es importante notar además que, para un modo k dado, entre mayor sea el valor de θ , más rápido decrecerá este modo cuando $\theta > 0.5$. Por otra parte, si $\theta < 0.5$, dicho modo crecerá más rápido entre menor sea el valor de θ .

La conclusión más importante que obtenemos a partir de estos resultados es que, para cubrimientos bajos el frente plano es inestable y para cubrimientos grandes es estable. En este sentido los resultados son consistentes con lo que predice el criterio energético. El factor que desestabiliza el frente cuando el cubrimiento es muy bajo

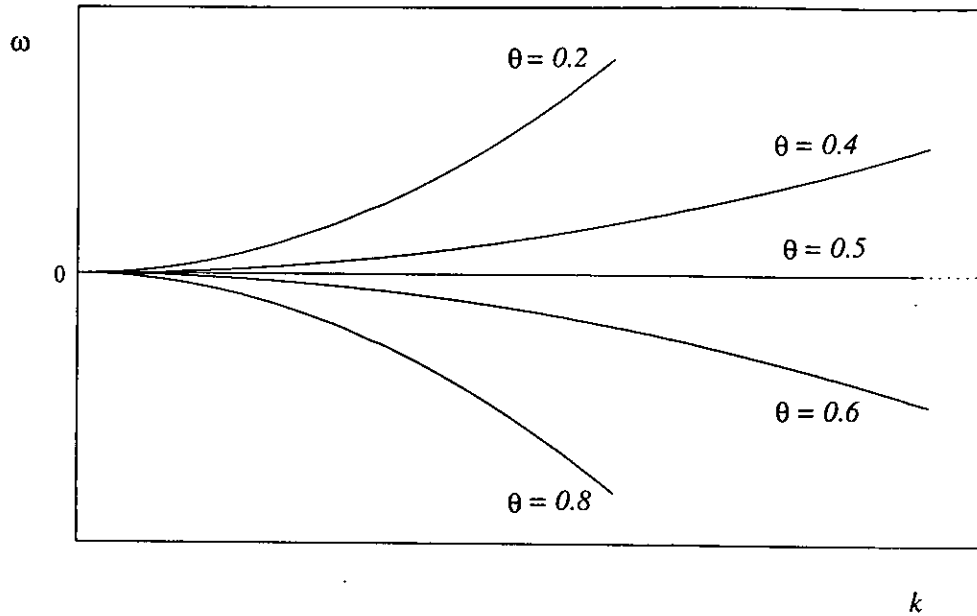


Figura 4.6: Gráfica de ω como función de k (relación de dispersión) para distintos valores de θ .

es la interacción del frente con el borde recto más próximo a él, en este caso, el interescalón. Para cubrimientos grandes, la interacción del frente con el interescalón de la terraza más próxima es lo que hace que el frente sea estable (figura 4.7).

Otra conclusión importante es que para la región de inestabilidad, no hay selección de modos, es decir, no hay un valor finito de k que corresponda a un máximo en ω .

A continuación se obtendrá la contribución de la energía libre de escalón. De esta contribución surgirá un nuevo término tanto en la energía libre local como en la relación de dispersión.

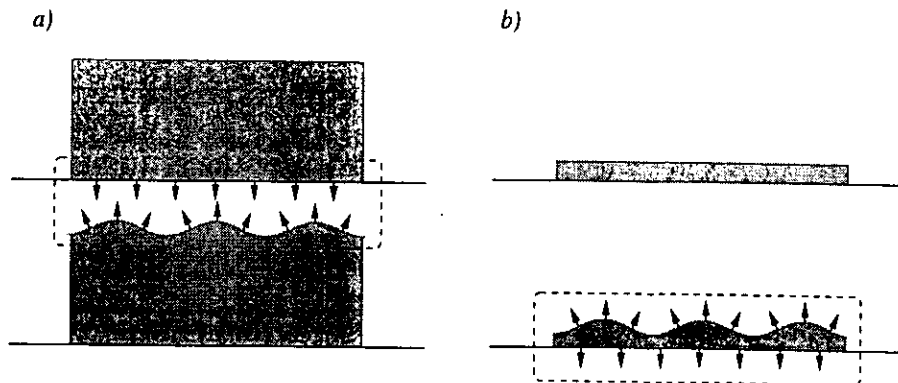


Figura 4.7: Interacción del frente de crecimiento con bordes cercanos para cubrimiento grande (a) y para cubrimiento pequeño (b).

4.5 Contribución de la Energía Libre de Escalón

Hasta ahora, la única contribución energética que se ha tomado en cuenta es la elástica. A continuación nos ocuparemos de calcular el costo energético que implica la creación del borde de un escalón. Definimos un borde, a lo largo de la dirección x , por una función $y = y(x)$ en el intervalo (a, b) . La energía libre asociada a la formación de dicho borde puede calcularse como

$$G = \int_a^b \gamma dS \quad (4.19)$$

donde γ es la tensión de línea que depende de la orientación local y dS es un elemento diferencial de longitud de línea. Definimos una cantidad ϕ , como la tensión de línea proyectada, esto es

$$\phi = \gamma \sqrt{1 + y_x^2} \quad (4.20)$$

donde $y_x = \frac{\partial y}{\partial x}$. Desarrollando a primer orden en y_x obtenemos

$$\phi = \gamma + \frac{1}{2} \gamma y_x^2 \quad (4.21)$$

Entonces la ecuación (4.19) puede reescribirse como

$$G = \int_a^b \phi dx \quad (4.22)$$

Herring y Mullings (Herring [53]; Mullins [63]) obtuvieron una expresión para la energía libre local cerca del escalón. Su resultado es

$$\mu(x) = \mu_0 - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \phi}{\partial y_x} \right) \quad (4.23)$$

Sustituyendo ϕ de (4.21) en (4.23) se tiene

$$\mu(x) = -\gamma \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \quad (4.24)$$

Empleando (4.24) podemos obtener la energía libre local asociada a la forma $y(x)$ que nos interesa, esto es, aquella que define el borde ondulado de un escalón de material depositado¹. En general γ depende de la orientación, pero para mostrar el efecto global de la energía de escalón la suponemos isotrópica. La expresión que resulta es

$$\mu_c(x) = \gamma \delta k^2 \cos(kx) \quad (4.25)$$

¹El desarrollo efectuado para obtener (4.21) es válido por que la condición $\frac{\delta}{\lambda} \ll 1$, que hemos impuesto para la perturbación, implica que y_x es pequeña.

El subíndice c se ha puesto para diferenciar la energía local de escalón, μ_c de la energía libre de origen elástico, μ_e .

Ahora, con la ecuación (4.3) podemos obtener una nueva contribución al flujo de partículas en la periferia, proporcional al gradiente de μ_c en la dirección S . Sumamos esta contribución al flujo que es proporcional al gradiente de μ_e para obtener el flujo total de partículas. Empleando nuevamente (4.4) obtenemos

$$v_n = \delta \cos(kx) \left[\frac{D' k_e \pi \cot(\pi\theta)}{w} k^2 - D'' \gamma k^4 \right] \quad (4.26)$$

en donde D' y D'' son proporcionales a la constante de difusión. Estas constantes no son iguales porque μ_e y μ_c tienen unidades distintas; μ_e es una energía por unidad de longitud y μ_c es una energía por partícula. A partir de (4.26) es posible obtener una nueva relación de dispersión siguiendo el mismo desarrollo de la sección 4.4. Esta relación está dada por

$$\omega = k_e \left(\frac{D' \pi \cot(\pi\theta)}{W} \right) k^2 - D'' \gamma k^4 \quad (4.27)$$

Puede notarse que la expresión anterior es la misma que (4.18) sólo que con un término adicional proporcional a k^4 . Este es un término de tipo estabilizante porque siempre es negativo y contribuye, en todos los casos, a que el valor de ω sea menor. En la figura 4.8 se muestra una gráfica similar a la de la figura 4.6 (ω vs. k) obtenida de la ecuación (4.27) para $\theta < 0.5$.

Analizando la gráfica de la figura 4.8, observamos que existe una región de inestabilidad (ω es positiva) para valores pequeños de k y una región de estabilidad cuando k es grande. Este comportamiento es consecuencia de que los signos de los términos de la ecuación (4.27) son opuestos cuando θ es menor a 0.5. El primer término es positivo y domina cuando k es pequeña ya que es proporcional a k^2 . El segundo término, negativo, domina cuando k es grande porque es proporcional a k^4 . Ahora, podemos inferir fácilmente lo que ocurrirá si tomamos valor de θ mayor a 0.5 : el sistema será estable para todos los modos porque ambos términos serán negativos y la perturbación decaerá rápidamente.

Otro aspecto que es importante considerar es que, para valores de θ menores a 0.5, el hecho de que tengamos una región delimitada de inestabilidad implica la existencia

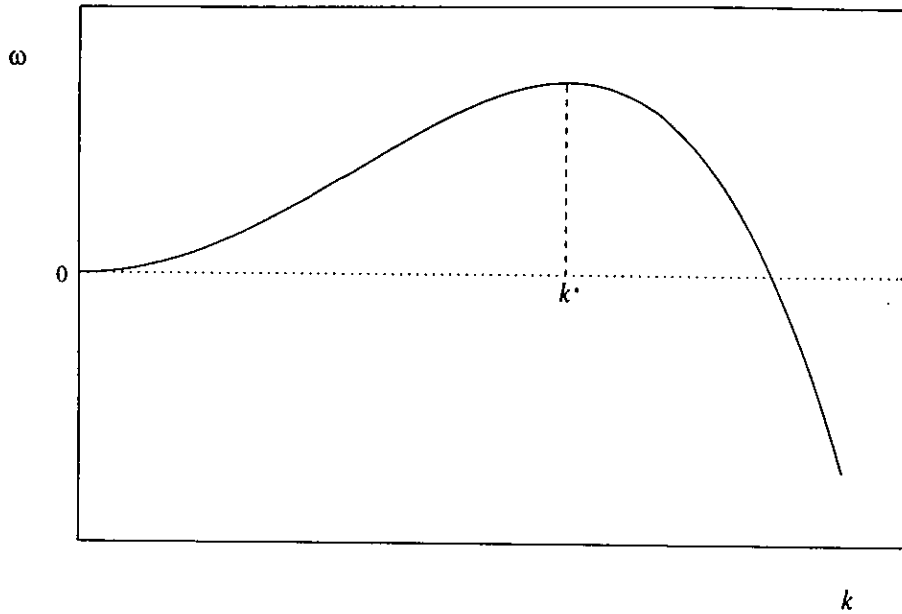


Figura 4.8: Relación de dispersión cuando se toma en cuenta el efecto de la energía libre de escalón para $\theta < 0.5$.

de un modo de crecimiento favorecido (selección de modos), *i.e.*, un modo que crece más rápido que los demás y determina la longitud característica del patrón a tiempos cortos. Este modo es el valor de k que corresponde al máximo de ω y está dado por

$$k^* = \sqrt{\left(\frac{D'}{D''}\right) \left(\frac{k_e \pi}{2\gamma W}\right) \cot(\pi\theta)} \quad \theta \leq \frac{1}{2} \quad (4.28)$$

La selección de modos en el análisis de estabilidad lineal es muy importante. En muchos sistemas se ha observado que el modo favorecido determina el patrón que se forma en etapas posteriores del crecimiento, ya sea del estado estacionario o de equilibrio.

4.6 Rompimiento del Frente en un Arreglo Regular de Islas

Supongamos que para cubrimientos bajos, la inestabilidad del frente provoca que éste se rompa en pequeñas estructuras o islas (figura 4.9). Dadas las condiciones, es razonable suponer que el tamaño y separación entre estas estructuras están determinados por el modo que crece más rápido en el análisis de estabilidad lineal. Si se supone

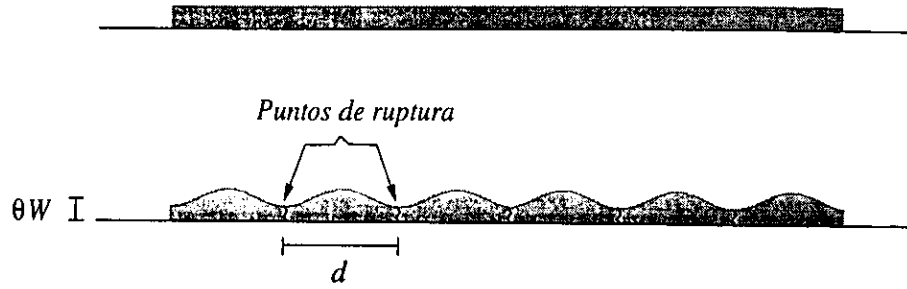


Figura 4.9: Ruptura de un frente inestable que da lugar a un arreglo regular de islas.

además que no hay un mecanismo de intercambio de materia entre islas distintas, el tamaño de cada isla estará dado por

$$A = \lambda^* \theta W = \frac{2\pi \theta W}{k^*} \quad (4.29)$$

donde A es el área de la superficie de sustrato cubierta por una isla. La separación característica entre islas está dada por la longitud de onda determinada por el modo k^* .

$$d = \lambda^* = \frac{2\pi}{k^*} \quad (4.30)$$

Sustituyendo k^* de (4.28) obtenemos

$$A = \frac{2\pi \theta W}{\sqrt{\left(\frac{D'}{D''}\right) \left(\frac{k_e \pi}{2\gamma W}\right) \cot(\pi \theta)}} \quad (4.31)$$

y

$$d = \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{D'}{D''}\right) \left(\frac{k_e \pi}{2\gamma W}\right) \cot(\pi \theta)}} \quad (4.32)$$

Estas expresiones son sumamente importantes porque tienen una utilidad práctica. Experimentalmente es posible controlar tanto el cubrimiento como el ancho de las terrazas. Este último se puede controlar con el ángulo de corte del sustrato. De esta manera, bajo ciertas condiciones, es posible lograr que las estructuras formadas tengan el tamaño y espaciado deseados. En las figuras 4.10 y 4.11 se muestra gráficamente la dependencia del tamaño A y espaciado d de las estructuras formadas como función del cubrimiento.

Además de su tamaño, las islas están definidas por su forma. Esta forma dependerá de la redistribución de materia en cada isla una vez que el frente se ha roto. En esta

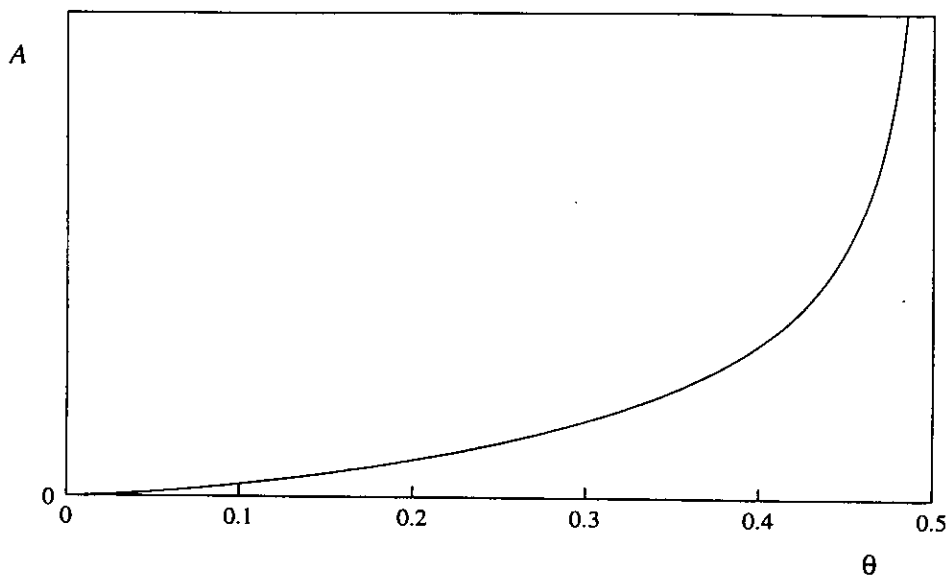


Figura 4.10: Tamaño de las islas formadas como función del cubrimiento.

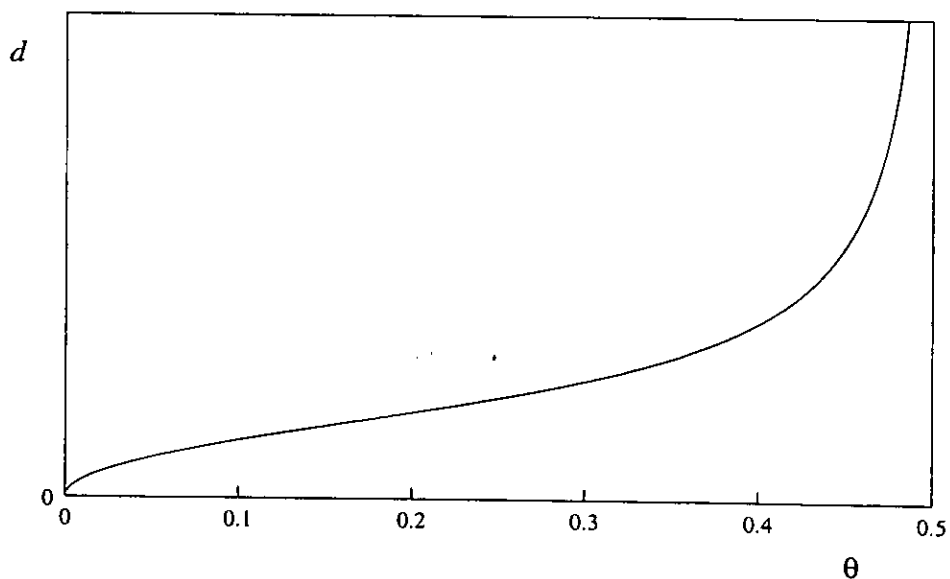


Figura 4.11: Espaciamiento entre islas como función del cubrimiento.

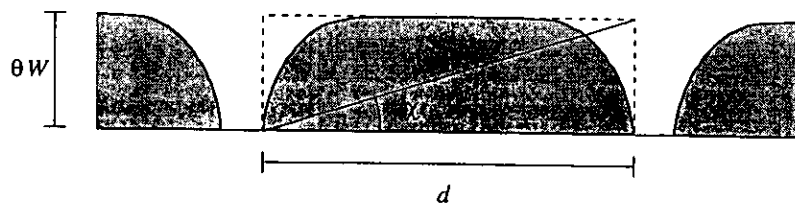


Figura 4.12: Relación de aspecto.

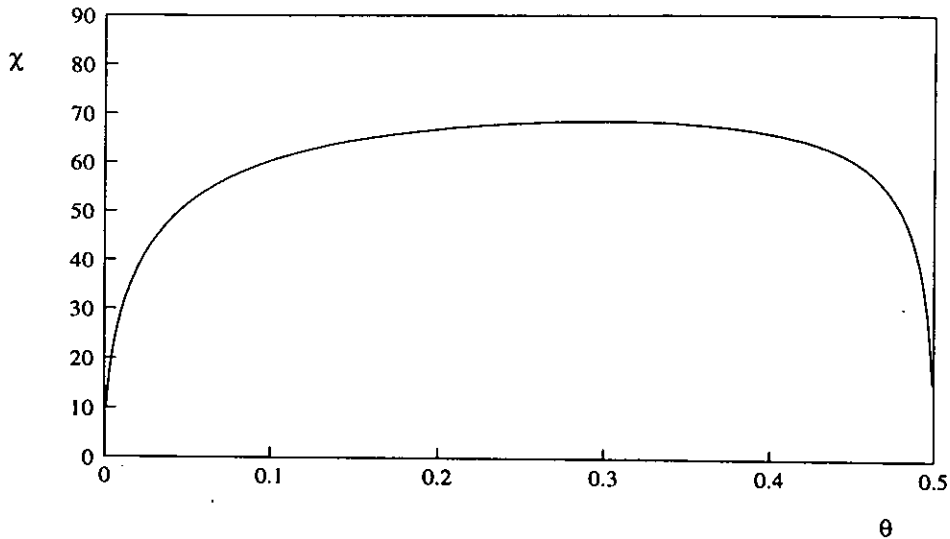


Figura 4.13: Ángulo (en grados) definido por la relación de aspecto como función del cubrimiento.

etapa, el análisis de estabilidad del frente plano pierde su capacidad predictiva. Habría que hacer un análisis de estabilidad para las islas pegadas al escalón del sustrato. Sin embargo, si suponemos que las islas preservan aproximadamente su forma desde que se originan podemos caracterizarlas por medio de su relación de aspecto c , dada por

$$c = \frac{\theta W}{d} = \frac{\theta W \sqrt{\left(\frac{D'}{D''}\right) \left(\frac{k_e \pi}{2\gamma W}\right) \cot(\pi\theta)}}{2\pi} \quad (4.33)$$

Esta relación es la tangente del ángulo χ (figura 4.12). En la figura 4.13 se muestra la gráfica de χ como función del cubrimiento.

Para cubrimientos más altos, pero todavía dentro de la región de inestabilidad, se espera que el frente tarde más en romperse. En este caso, el análisis de estabilidad lineal podría no ser útil para predecir el tamaño o la separación entre estructuras porque es válido únicamente para tiempos cortos. Por tanto, las gráficas 4.10, 4.11 y 4.13 deben interpretarse con cuidado. Sin embargo, podría darse el caso de que para este sistema el análisis de estabilidad lineal predijera siempre la longitud de onda del patrón. Entonces las expresiones (4.31), (4.32) y (4.33) seguirían siendo válidas. Esto podría verificarse experimentalmente depositando la película con un cubrimiento un poco mayor a la mitad de la terraza (para estar en la región de estabilidad) y evaporando para que el frente retroceda hacia la región de inestabilidad.

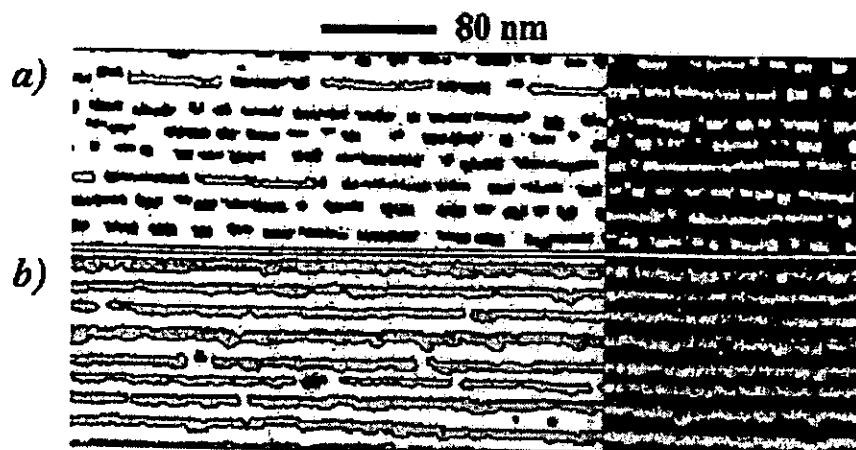


Figura 4.14: Imagen STM de CaF_2 depositado sobre una superficie escalonada de $\text{Si}(111)$. En (a) donde el cubrimiento es $\theta = 0.23$, predominan islas de menos de 80 nm de largo. Cuando el cubrimiento aumenta a 0.4 (b) predominan islas mucho más elongadas.

4.7 Comparación con Resultados Experimentales

Li et al. [00] reportaron los resultados de un experimento que describiremos resumidamente en esta sección y que corroboran, al menos cualitativamente, algunos de los resultados que hemos obtenido.

Una superficie escalonada de $\text{Si}(111)$ se utilizó como sustrato para la deposición de CaF_2 . La diferencia en constantes de malla entre estos dos materiales es aproximadamente de 2.4% a la temperatura a la que típicamente se lleva a cabo el crecimiento (600-650 °C). Se escogió un ángulo de corte de 1° en la dirección $(\bar{1}\bar{1}2)$. La rapidez de deposición fue de una monocapa por minuto.

Se encontró que para cubrimientos pequeños, el material se deposita en forma de islas elongadas en la dirección de los escalones del sustrato (figura 4.14 a). Desde el inicio del crecimiento, el ancho de las islas (su tamaño en la dirección perpendicular a los escalones de sustrato) se mantuvo aproximadamente constante en un valor que corresponde a la mitad del ancho de la terraza. A cubrimientos mayores las islas comenzaron a unirse entre sí formando secciones continuas de mayor tamaño (figura 4.14 b). A partir de un cubrimiento $\theta \approx 0.4$ se observaron tiras continuas.

El criterio de estabilidad establecido por las ecuaciones (4.18) y (4.27), *i.e.*, inestabilidad para cubrimientos pequeños y estabilidad para cubrimientos grandes, con-

cuerda cualitativamente con los resultados de este experimento.

En la sección 4.6 planteamos la posibilidad de que el frente se rompa en islas cuando es inestable. En el experimento que se reporta las islas no provienen de tiras rectas sino que comienzan a formarse desde que inicia el crecimiento, lo cual es consistente con que a muy bajos cubrimientos el frente sea inestable. Desafortunadamente, no existen estudios sistemáticos que permitan corroborar la validez de las ecuaciones (4.31), (4.32) y (4.33).

4.8 *Propuestas para Trabajos Futuros*

4.8.1 *Perturbación del Frente de Crecimiento*

El análisis de estabilidad para un sistema con un solo frente perturbado es insuficiente desde un punto de vista formal. La razón es que el simple hecho de que un solo frente sea inestable necesariamente implica que todos los demás frentes también lo sean.

Desde un principio hemos evitado analizar el sistema introduciendo la perturbación en todos los frentes, principalmente por dos razones. La primera es que, matemáticamente el problema se volvería mucho más complejo y probablemente no habríamos podido obtener una expresión analítica para la energía elástica local ni para las relaciones de dispersión. La segunda es que, realizando algunos cálculos numéricos para casos especiales, encontramos que el efecto de perturbar todos los frentes es muy similar al de perturbar uno solo. A continuación se presentan estos resultados.

Supongamos que se introduce una perturbación idéntica para todos los frentes de crecimiento (figura 4.15). Para conocer la energía local en uno (cualquiera) de los frentes ondulados sería necesario conocer primero el desplazamiento debido a todas las distribuciones de fuerza presentes y sumar todas las contribuciones. Sólo que ahora, tendríamos una nueva contribución, la de los bordes ondulados de otros frentes. En la expresión que resulta para el desplazamiento en este caso surgen integrales muy complicadas y no hemos podido obtener una solución analítica para la mayoría. Sin embargo, como demostraremos a continuación, existe una aproximación válida para ciertas condiciones, que nos ayudará a resolver este problema.

Tenemos un borde ondulado y nos interesa calcular el desplazamiento en todos

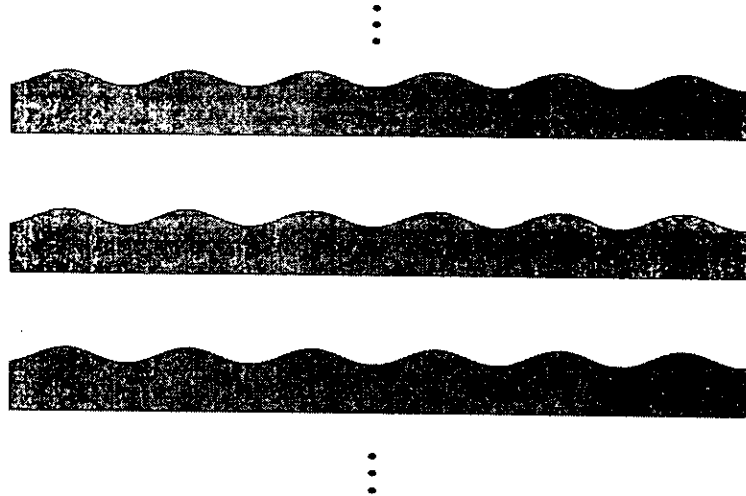


Figura 4.15: Perturbación idéntica en todos los frentes de crecimiento.

sus puntos debido a la distribución de fuerzas sobre otro borde ondulado. Como supuestamente todos los frentes cubren la misma porción de las terrazas, la separación entre dos bordes ondulados es, cuando menos, $b \approx W$ (para los bordes de terrazas contiguas). Se realizaron cálculos numéricos que demuestran que para $\delta \ll b$, la contribución de un borde ondulado al desplazamiento en un punto sobre otro borde ondulado es aproximadamente igual a la contribución de un borde recto. En la figura 4.16 se muestra este resultado, comparando para ambos casos la componente u_y del desplazamiento como función de $\frac{\delta}{b}$. De dicha gráfica podemos observar que nuestra aproximación es aceptable para valores pequeños de $\frac{\delta}{b}$.

Existe otro problema interesante relacionado con lo anterior. La perturbación que arbitrariamente se propone para un frente de crecimiento no necesariamente tendría que ser la misma para todos los frentes. Por ejemplo, podría existir un desfaseamiento entre las perturbaciones de los frentes de terrazas distintas (figura 4.17). En un estudio más general, esta posibilidad debe ser tomada en cuenta.

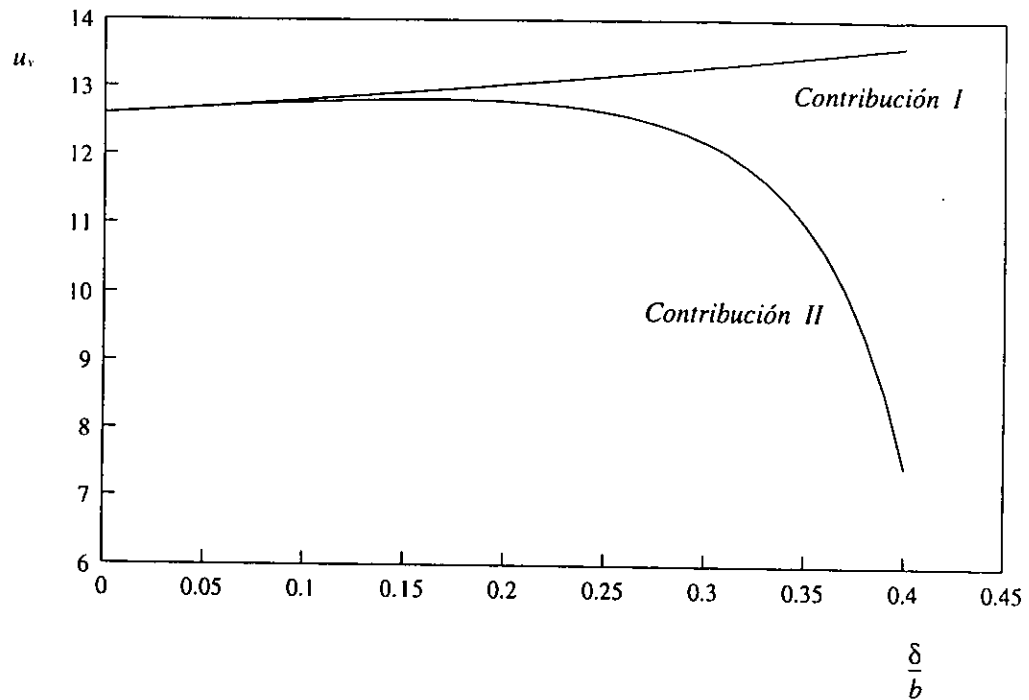


Figura 4.16: Contribución al desplazamiento (componente u_y) sobre un borde ondulado debida a dos tipos de bordes: recto (I) y ondulado (II; cálculo numérico). Dependencia de la relación $\frac{\delta}{b}$.

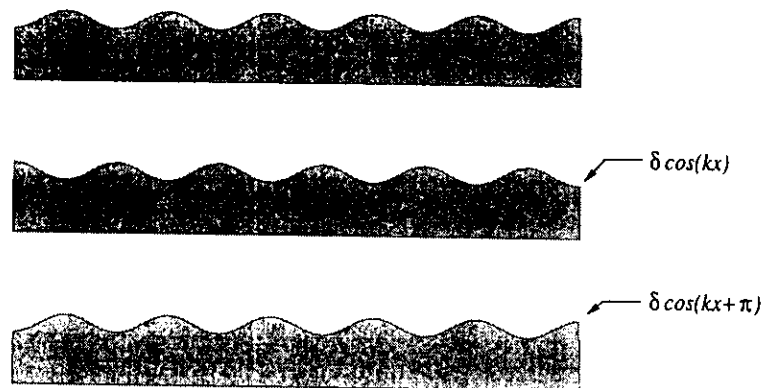


Figura 4.17: Desfasamiento entre perturbaciones de los frentes de terrazas distintas.

4.8.2 *Influencia de Otros Factores en la Estabilidad del Frente*

Para el presente trabajo analizamos tanto el efecto de la elasticidad como el de la energía de escalón sobre la estabilidad del frente de crecimiento. Sin embargo se puede estudiar la influencia de otros factores. El más importante es el flujo externo de átomos que hace avanzar al frente. Para estudiar su efecto sería necesario admitir un mecanismo adicional de transporte de materia para considerar la incorporación de átomos libres a este frente. Consideraciones similares serían necesarias para estudiar la estabilidad del sistema en un régimen de evaporación.

Por último, vale la pena mencionar otro efecto que puede ser importante: la anisotropía en la energía de escalón, o dicho de otra manera, la dependencia de la energía de escalón con la orientación del mismo. Tomar en cuenta este efecto implicaría introducir una dependencia espacial adicional a la energía libre local de la ecuación (4.25).

La discusión presentada dentro de esta sección ha tenido como fin mostrar las limitaciones del estudio realizado en este trabajo y al mismo tiempo proponer que se lleven a cabo trabajos a futuro en donde se aborden variantes más complicadas de este tema.

CONCLUSIONES

A continuación presentamos las conclusiones mas importantes que se derivan del estudio realizado en este trabajo:

- Durante las primeras etapas del crecimiento en un sistema heteroepitaxial, en el que un material es depositado sobre la superficie escalonada de un sustrato, el frente plano de crecimiento es inestable cuando la fracción cubierta por la película es menor a $\frac{1}{2}$ del área de las terrazas del sustrato. Por el contrario, el frente estable cuando esta fracción es mayor a $\frac{1}{2}$. Este resultado se obtuvo tomando en cuenta únicamente el efecto de la elasticidad.
- El efecto de la energía libre de escalón es siempre estabilizante. En la región de inestabilidad, los efectos de la elasticidad y de la energía libre de escalón compiten. Esta competencia da lugar a la selección de modos, es decir, hay un modo que crece más rápido que los demás y por lo tanto determina la longitud de onda de la inestabilidad.
- Dado que hemos propuesto una dinámica de relajación al equilibrio, el análisis de estabilidad nos permite determinar la longitud de onda que caracteriza la evolución del frente, a tiempos cortos, hacia el estado de equilibrio.
- Bajo la suposición de que a cubrimientos pequeños, el frente inestable de crecimiento se rompa dando lugar a un arreglo regular de islas, predecimos algunas de las propiedades de este arreglo a partir de la longitud de onda característica del patrón antes de la ruptura. Encontramos expresiones analíticas para el tamaño, la separación y la relación de aspecto de las islas. Estas propiedades

dependen del cubrimiento y del ancho de las terrazas del sustrato, parámetros que en principio pueden controlarse experimentalmente.

- Para trabajos futuros y estudios más detallados deberían ser tomados en cuenta algunos factores que aquí no se consideran, como el efecto del flujo externo de partículas y la anisotropía en la energía libre de escalón. En un análisis más riguroso sería necesario estudiar la estabilidad de todos los frentes de crecimiento simultáneamente y determinar si están en fase o fuera de fase.

APÉNDICE

A.1 *Fundamentos de Elasticidad*

En las siguientes secciones nos ocuparemos de introducir algunos de los fundamentos de la teoría de la elasticidad de medios continuos. Esta revisión es necesaria por que muchos de los conceptos y ecuaciones que se derivan de esta teoría son aplicados al cálculo de propiedades de estructuras que en este trabajo son muy importantes. En concreto, la aplicación de la teoría de elasticidad de medios continuos, nos permite estudiar algunos de los fenómenos más importantes en el crecimiento de películas sobre cristales, como la formación espontánea de nanoestructuras. El resultado más importante que se presenta es la expresión para obtener el desplazamiento en cualquier punto de un medio semiinfinito debido a una fuerza aplicada en un punto de su superficie. Además de lo anterior, en este apéndice se introduce parte de la notación y el lenguaje que se emplean en esta tesis.

A.1.1 *Conceptos Básicos y Definiciones*

Desplazamiento

Consideremos un cuerpo en equilibrio, y para ese estado, definamos la posición de cualquiera de sus puntos como \mathbf{x} . Si ahora este medio es sometido a una deformación, en general cada punto en el cuerpo estará desplazado con respecto a su posición de equilibrio. Denotando como \mathbf{x}' la posición del punto después de la deformación, definimos el vector desplazamiento como

$$\mathbf{u} = \mathbf{x}' - \mathbf{x} \tag{A.1}$$

Deformación

Otro concepto, particularmente útil en la descripción del estado de un cuerpo es la deformación. Esta propiedad se describe matemáticamente con un tensor

de segundo orden y esta definida como¹

$$u_{ik} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_i} + \frac{\partial u_l}{\partial x_i} \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \quad (\text{A.2})$$

Algunas de las propiedades importantes de un cuerpo sometido a una deformación pueden expresarse muy sencillamente en términos del tensor de deformación. Una de ellas es el cambio de un elemento diferencial de volumen para deformaciones pequeñas. Este cambio está dado por

$$dV' = dV (1 + u_{ii}) \quad (\text{A.3})$$

donde dV y dV' son, respectivamente, elementos diferenciales de volumen antes y después de una deformación.

Tensor de esfuerzos

Cuando ocurre una deformación en un cuerpo, el arreglo de moléculas o átomos que lo constituyen es alterado, y cada elemento del cuerpo es desviado de su posición de equilibrio. Esto origina fuerzas en el interior del cuerpo deformado que tienden a restablecer su estado de equilibrio. A estas fuerzas se les llama esfuerzos internos. Cuando la deformación de un cuerpo es pequeña, este tiende a adoptar nuevamente su estado no deformado una vez que dejan de actuar las fuerzas que causaron la deformación. Cuando esto ocurre se dice que la deformación es elástica. Por el contrario cuando una deformación es de tal magnitud que un cuerpo no recupera su estado no deformado, la deformación se conoce como plástica. El esfuerzo en cada punto de un cuerpo deformado puede expresarse utilizando otra cantidad tensorial denominada tensor de esfuerzos. Esta cantidad está relacionada con la fuerza por unidad de volumen F en cada punto por medio de la siguiente expresión

$$F_i = \frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} \quad (\text{A.4})$$

¹De aquí en adelante utilizaremos, cuando sea aplicable, la convención de suma de índices repetidos.

Físicamente, τ_{ik} corresponde al i -ésimo componente de la fuerza por unidad de área perpendicular al eje coordenado k .

A.1.2 Condiciones de Equilibrio

Cuando un cuerpo deformado se encuentra en equilibrio, la fuerza neta que actúa sobre cada elemento de volumen del cuerpo debe ser cero, por lo que, para todo el cuerpo deformado en equilibrio debe cumplirse la siguiente condición.

$$\frac{\partial \tau_{ik}}{\partial x_k} = F_i = 0 \quad (\text{A.5})$$

Por otro lado, la deformación de un cuerpo se debe (en la mayoría de los casos) a una fuerza externa aplicada sobre su superficie. El tensor de deformación en la superficie de un cuerpo estará dado entonces por

$$\tau_{ik} n_k = P_i \quad (\text{A.6})$$

donde \mathbf{P} es la fuerza por unidad de área de la superficie del cuerpo, y $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector unitario normal a esta superficie. La ecuación (A.6) es una condición de frontera para resolver la ecuación de equilibrio (A.5). Al resolverla se encuentra el valor de τ_{ik} para todos los puntos del cuerpo.

A.1.3 Termodinámica de las Deformaciones Elásticas

Supongamos que un cuerpo deformado, modifica su estado de deformación de modo que cada punto en su interior se desplaza una cantidad δu_i . El trabajo local (por unidad de volumen) hecho por los esfuerzos internos del cuerpo estara dado por

$$\delta W = F_i \delta u_i = -\tau_{ik} \delta u_{ik} \quad (\text{A.7})$$

Con este resultado se obtiene la forma diferencial de la relación fundamental termodinámica para cuerpos deformados:

$$dU = TdS + \tau_{ik} du_{ik} \quad (\text{A.8})$$

donde U es la energía interna local. La energía libre de Helmholtz F está dada por

$$dF = -SdT + \tau_{ik} du_{ik} \quad (\text{A.9})$$

A.1.4 Ley de Hooke

Dado que F es una función de u_{ik} podemos desarrollar F alrededor de $u_{ik} = 0$. Tomando los términos del desarrollo hasta segundo orden, obtenemos

$$F = F_0 + \frac{1}{2}\lambda u_{ii}^2 + \mu u_{ik}^2 \quad (\text{A.10})$$

Las cantidades λ y μ se conocen como coeficientes de Lamé y dependen de la naturaleza del material. El primer término de (A.10) corresponde a la contribución a la energía por un cambio en el volumen y el segundo a la contribución por un cambio en la forma. Al primer caso se le llama compresión (o expansión) hidrostática.

La Ley de Hooke dice que la deformación que sufre un cuerpo es proporcional a las fuerzas aplicadas sobre este. Cuando esto se cumple la energía libre se puede expresar como

$$F = \frac{1}{2}\tau_{ik}u_{ik} \quad (\text{A.11})$$

A.1.5 Propiedades Elásticas de Materiales

Consideremos un cuerpo isotrópico sometido a una deformación homogénea¹. Como se indica en la figura A.1, el cuerpo se somete a una extensión en la dirección z . La componente u_{zz} del tensor de deformación corresponde a la elongación relativa del cuerpo en la dirección z y para este caso está dada por

$$u_{zz} = \frac{P}{E} \quad (\text{A.12})$$

donde P es la magnitud de la fuerza por unidad de área aplicada en los extremos del cuerpo y E es una propiedad del material del que está constituido el cuerpo y se conoce como módulo de Young.

Las componentes u_{xx} y u_{yy} determinan la compresión relativa en la dirección transversal. Esta compresión está relacionada con la extensión longitudinal. Dicha relación está dada por la expresión

$$u_{xx} = -\sigma u_{zz} \quad (\text{A.13})$$

¹En una deformación homogénea, el tensor de deformación es uniforme, es decir, constante para todos los puntos del cuerpo.

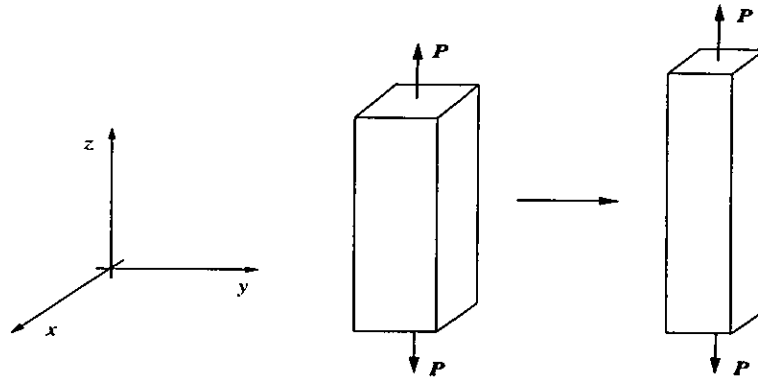


Figura A.1: Extensión de una columna en la dirección z . La extensión longitudinal en z está relacionada con el módulo de Young. La relación entre la compresión transversal y la extensión longitudinal está dada por la relación de Poisson.

donde σ es una constante que como E , depende de la naturaleza del material y se conoce como la relación de Poisson.

Tanto el módulo de Young como la relación de Poisson están relacionados con los coeficientes de Lamé por las siguientes expresiones

$$E = \frac{\mu(3\lambda + 2\mu)}{\lambda + \mu} \quad (\text{A.14})$$

$$\sigma = \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{\lambda + \mu} \right) \quad (\text{A.15})$$

Por lo general se acostumbra expresar las ecuaciones en términos de E y σ en lugar de λ y μ .

A.1.6 Equilibrio de un Medio Semiinfinito

Consideremos un medio isotropico limitado únicamente por un plano infinito de modo que el medio ocupe la mitad del espacio. Supongamos ahora que se tiene una fuerza aplicada sobre un punto (x_0, y_0) o sobre una región muy pequeña del plano que define la superficie del medio (figura A.2). Podemos entonces considerar a la fuerza como una distribución \mathbf{P} dada por $P_i(x, y) = F_i \delta(x - x_0) \delta(y - y_0)$. Nuestro objetivo es conocer el desplazamiento en un punto cualquiera del medio debido a la fuerza que hemos definido, ya que a partir de este resultado podemos integrar para obtener el desplazamiento debido a cualquier distribución de fuerzas sobre la superficie.

Para este estudio solo nos interesará el valor del desplazamiento sobre la superficie del plano debido a una fuerza cuya componente en la dirección perpendicular al plano

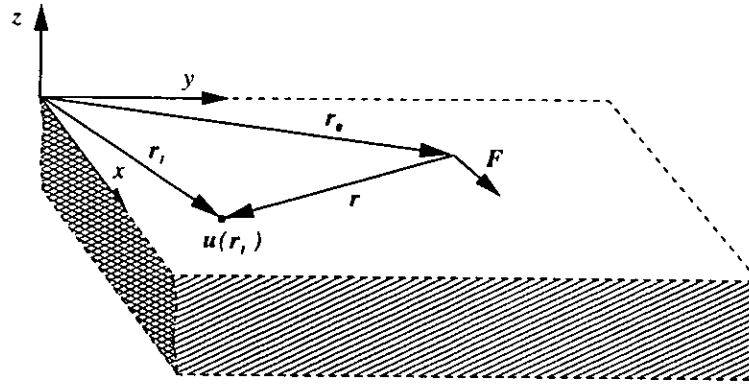


Figura A.2: Fuerza puntual aplicada sobre la superficie de un medio semiinfinito.

sea cero. Para este caso, las componentes del desplazamiento están dadas por (Landau y Lifshitz [59])

$$u_x = \frac{1 + \sigma}{2\pi E} \cdot \frac{1}{r} \left(2(1 - \sigma) F_x + \frac{2\sigma x}{r^2} (xF_x + yF_y) \right) \quad (\text{A.16})$$

$$u_y = \frac{1 + \sigma}{2\pi E} \cdot \frac{1}{r} \left(2(1 - \sigma) F_y + \frac{2\sigma y}{r^2} (xF_x + yF_y) \right) \quad (\text{A.17})$$

$$u_z = \frac{1 + \sigma}{2\pi E} \cdot \frac{1}{r} \left(\frac{1 - 2\sigma}{r} (xF_x + yF_y) \right) \quad (\text{A.18})$$

en donde $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1$, \mathbf{r}_0 es el punto donde se aplica la fuerza y \mathbf{r}_1 es el punto donde se evalúa el desplazamiento. La única condición que es necesario imponer para que las ecuaciones (A.16), (A.17) y (A.18) sean válidas es que no existan fuerzas al infinito. A partir de este último resultado podemos obtener la contribución a la energía libre local dado un desplazamiento \mathbf{u} y una fuerza \mathbf{F} en el mismo punto. Esta contribución está dada por

$$F(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} F_i u_i \quad (\text{A.19})$$

En la tesis, se emplean algunos de los resultados presentados en este apéndice, principalmente las ecuaciones (A.16), (A.17), (A.18) y (A.19).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BALES, G. S. Y ZANGWILL, A. [90]. *Phys. Rev. B*, **41**, 5500 (1990).
- BALIBAR, S. Y CASTAING, B. [85]. *Surface Sci. Reports*, **5**, 87 (1985).
- BALL, E. [58]. *Z Kristallogr.*, **110**, 372 (1958).
- BIMBERG, D., IPATOVA, I. P., KOP'EV, P. S., LEDENTSOV, N. N., MALYSHKIN, V. G., Y SHCHUKIN, V. A. [97]. *Uspekhi Fiz. Nauk*, **167**, 552 (1997).
- BINNIG, G. Y ROHRER, H. [87]. *Rev. of Mod. Phys.*, **59**, 615 (1987).
- CORVERA POIRÉ, E. Y MÜLLER, J. [01]. *El modelo del que se habla fué desarrollado para un sistema de islas. Este trabajo no ha sido publicado.*, 2001.
- EAGLESHAM, D. J. Y CERULLO, M. [90]. *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 1943 (1990).
- EHRlich, G. [77]. *Surface Sci.*, **63**, 422 (1977).
- EHRlich, G. Y HUDDA, F. [66]. *J. Chem. Phys.*, **44**, 1039 (1966).
- FRANK, F. C. Y VAN DER MERWE, J. H. [49]. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, **198**, 205 (1949).
- GOLDSTEIN, L. F., GLAS, F., MARZIN, J. Y., CHARASSE, M. N., Y G. LE ROUX [85]. *Appl. Phys. Lett.*, **47**, 1099 (1985).
- GRADSHTEYN, I. S. Y RYZHIK, I. M. [80]. *Table of integrals series and products*. Academic Press, 1980.
- HERRING, C. [51]. *Phys. Rev.*, **82**, 87 (1951).
- HERRING, C. [53]. en *Structure and properties of solid surfaces*. University of Chicago Press, Chicago, 1953.
- LAGALLY, M., MO, Y.-W., KARIOTIS, R., SWARTZENTRUBER, B. S., Y WEBB, M. B. [90]. en *Kinetics of Ordering and Growth at Surfaces*. Plenum, New York, 1990.
- LANDAU, L. D. Y LIFSHITZ, E. M. [59]. *Theory of Elasticity*. Pergamon Press, London, 1959.
- LANGER, J. S. [80]. *Rev. Mod. Phys.*, **52**, 1 (1980).
- LAPUJOLADE, J. [94]. *Surf. Sci. Rep.*, **20**, 191 (1994).
- LI, A., LIU, F., Y LAGALLY, M. G. [00]. *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 1922 (2000).
- LI, A., LIU, F., PETROVYKH, D. Y., LIN, J.-L., VIERNOW, J., HIMPSEL, F. J., Y LAGALLY, M. G. [00]. *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 5380 (2000).
- MARCHENKO, V. I. [81]. *Sov. Phys. JETP*, **54**, 605 (1981).
- MARCHENKO, V. I. Y PARSHIN, A. Y. [80]. *Sov. Phys. JETP*, **52**, 129 (1980).
- MEAKIN, P. [83]. *Phys. Rev. A*, **27**, 1495 (1983).

- MO, Y.-W., KLEINER, J., WEBB, M. B., Y LAGALLY, M. [91]. *Phys. Rev. Lett.*, **66**, 1998 (1991).
- MO, Y.-W., SAVAGE, D. E., SWARTZENTRUBER, B. S., Y LAGALLY, M. G. [90]. *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 1020 (1990).
- MONTIEL, D., MÜLLER, J., Y CORVERA POIRÉ, E. [01]. *Self organized array of quantum nanostructures via a strain induced morphological instability*. Enviado a Physical Review., 2001.
- MÜLLER, J. Y GRANT, M. [99]. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 1736 (1999).
- MULLINS, W. W. [63]. en *Metal Surfaces: Structure, Energetics and Kinetics*. Am. Soc. Metals, Metals Park, Ohio, 1963.
- NG, K. O. Y VANDERBILT, D. [95]. *Phys. Rev. B*, **52**, 2177 (1995).
- NOZIÈRES, P. [91]. en *Solids far from equilibrium*. Cambridge University Press, 1991.
- OSTWALD, W. [1900]. *Z. Phys. Chem. (Liepzig)*, **34**, 495 (1900).
- PELCÉ, P. [88]. *Dynamics of Curved Fronts*. Academic Press, Inc., San Diego, CA, 1988.
- PIMPINELLI, A. Y VILLAIN, J. [98]. *Physics of Crystal Growth*. Cambridge University Press, Cambridge, 1st ed. edition, 1998.
- PIMPINELLI, A., VILLAIN, J., Y WOLF, D. E. [92]. *Phys. Rev. Lett.*, **69**, 985 (1992).
- QUESENBERRY, P. E. Y FIRST, P. N. [96]. *Phys. Rev. B*, **54**, 8218 (1996).
- ROTTMAN, C. Y WORTIS, M. [84]. *Phys. Rep.*, **103**, 59 (1984).
- SCHWOEBEL, R. L. [68]. *J. Appl. Phys.*, **40**, 614 (1968).
- SHCHUKIN, V. A. [96]. en *Proceedings of the 23rd International Conference on Physics of Semiconductors Berlin, Germany*. World Scientific, Singapore, 1996.
- STRANSKI, I. N. Y KRASTANOW, L. [37]. *Sitzungsber. Akad. Wiss. Wien, Math.-Naturwiss. Klasse*, **146**, 797 (1937).
- TERSOFF, J. [95]. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 2730 (1995).
- TERSOFF, J., TEICHERT, C., Y LAGALLY, M. G. [96]. *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 1675 (1996).
- VAN BEIJEREN, H. Y NOLDEN, I. [87]. en *Structure and Dynamics of Surfaces II*. Springer, Berlin, 1987.
- VAN DER EERDEN, J. P. Y MÜLLER-KRUMBHAAR, H. [86]. *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 2431 (1986).
- VASEK, J. E., ZHANG, Z. Y., SALLING, C. T., Y LAGALLY, M. G. [95]. *Phys. Rev. B*, **51**, 17207 (1995).
- VILLAIN, J. [91]. *J. Phys. I*, **1**, 19 (1991).
- VOLMER, M. Y WEBER, A. [26]. *Z. Phys. Chem. (Munich)*, **119**, 227 (1926).
- WANG, S. C. Y EHRlich, G. [91]. *Phys. Rev. Lett.*, **67**, 2059 (1991).
- WEEKS, J. D. [80]. en *Ordering in Strongly Fluctuating Condensed Matter Systems*. Plenum, New York, 1980.

- WITTEN, T. A. Y SANDER, L. M. [81]. *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 1400 (1981).
- ZHANG, Z. Y., CHEN, X., Y LAGALLY, M. G. [94]. *Phys. Rev. Lett.*, **73**, 1829 (1994).
- ZHANG, Z. Y. Y LAGALLY, M. G. [97]. *Science*, **276**, 377 (1997).