



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS
POTOSÍ

FACULTAD DE CIENCIAS



CRECIMIENTO POR LPE DE CAPAS EPITAXIALES
DE GaAsSb CON BAJA CONCENTRACION DE Sb
SOBRE GaAs

TESIS

PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS APLICADAS

PRESENTA:

I.F. LUIS FRANCISCO AVENDAÑO ANASTASIO

DIRECTOR DE TESIS:

DR. ANDREI YU. GORBATCHEV

DR. VIATCHESLAV MICHOURNYI

SAN LUIS POTOSÍ, SLP

AGOSTO 2022

DECLARACIÓN DE AUTORÍA Y ORIGINALIDAD DE LA TESIS

Yo, Luis Francisco Avendaño Anastasio, estudiante del Posgrado en Ciencias Aplicadas de la Facultad de Ciencias de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, como autor de la tesis “CRECIMIENTO DE CAPAS EPITAXIALES DE GaAsSb/GaAs POR LPE, CON PEQUEÑAS PROPORCIONES DE Sb”, declaro que la tesis es una obra original, inédita, auténtica, personal, que se han citado las fuentes correspondientes y que en su ejecución se respetaron las disposiciones legales vigentes que protegen los derechos de autor y de propiedad intelectual e industrial. Las ideas, doctrinas, resultados y conclusiones a los que he llegado son de mi absoluta responsabilidad.

RESUMEN

En este trabajo presentamos el estudio de crecimiento de heteroestructuras, conformadas por GaAsSb (pequeñas proporciones de Sb) sobre sustratos GaAs (100), a través de LPE. Se realiza un modelado teórico de diagramas de fase por CALPHAD desde los componentes binarios de nuestro sistema. Además, analizamos la interacción de energía elástica en nuestro sistema, y como repercute en las bandas de energía de la capa epitaxial. Se utilizan técnicas de caracterización como espectroscopía de fotoluminiscencia, difracción por rayos X y Perfilometría.

ABSTRACT

In this work we present the study of growth of heterostructures, formed by GaAsSb (small proportions of Sb) on GaAs (100) substrates, through LPE. A theoretical modeling of phase diagrams is carried out by CALPHAD from the binary components of our system. In addition, we analyze the elastic energy interaction in our system, and how it affects the energy bands of the epitaxial layer. Characterization techniques such as photoluminescence spectroscopy, X-ray diffraction and Profilometry were used.

AGRADECIMIENTO:

A la Facultad de Ciencias de la UASLP, al Instituto de Investigación en Comunicación Óptica; a todos sus trabajadores, a los profesores que participaron en mi formación académica.

Al CONACYT por su apoyo económico.

A mis directores de tesis: Dr. Andrei Yu. Gorbachev y Dr. Viatcheslav Michournyi.

A la Dra. Amparo Rodríguez Cobos.

Al Dr. Raúl Eduardo Balderas Navarro.

A mis amigos: Josué, Daniel, Martín, David.

A mi gran amigo Arturo Franco.

Con mucho cariño a mi madre y a mi hermano.

Y especialmente con mucho amor a mi pareja y mejor amiga Ana.

Mucho que agradecer, mucho que seguir aprendiendo.

Entiendo que estamos condicionados por el inconsciente, por el lenguaje, por la cultura, por la condición socioeconómica, por la experiencia de vida.

Pero, sin embargo, cada hombre, cada mujer, cada individuo es lo que hace con lo que hicieron de él.

INDICE

Introducción-----	5
Capítulo 1. Materiales semiconductores III-V-----	6
1.1 Semiconductores III-V: Sistemas binarios y ternarios-----	6
1.2 Estructura de banda de energía GaAsSb-----	11
1.3 El cambio de Bandas energéticas de GaAsSb debido al esfuerzo-----	13
1.4 Diagramas de fases de GaAs, GaSb y GaAsSb-----	17
Capítulo 2.-Método CALPHAD en aplicación de cálculo de diagrama de fases L-S y caracterización de sistema GaAsSb-----	20
2.1 Descripción del método de CALPHAD-----	20
2.2 Cálculo de diagrama de fases para el sistema GaAsSb-----	24
2.3 Descomposición espinodal-----	27
2.4 El cambio de área de miscibilidad bajo el esfuerzo-----	28
Capítulo 3.- Descripción de sistema experimental-----	33
3.1 Equipo LPE-----	33
3.2 Espectroscopía de fotoluminiscencia-----	36
3.3 Difracción de Rayos X-----	37
Capítulo 4.-Procedimiento-----	40
4.1 Crecimiento de capas epitaxiales GaAsSb/GaAs-----	40
4.2 Regímenes de crecimiento -----	43
Capítulo 5.-Caracterización de las muestras GaAsSb/GaAs-----	45
5.1 Resultados de rayos X y composiciones a base de estas mediciones-----	45
5.2 Mediciones Fotoluminiscencia-----	48
5.3 Perfilometría-----	57
Conclusiones-----	60
Referencias-----	61

INTRODUCCIÓN

El crecimiento de los sistemas de aleaciones mixtas III-V se considera importante debido a las posibles ventajas que tienen sobre los compuestos binarios puros. Las aleaciones $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ con composiciones muy superiores en GaAs tienen recombinación directa en el espectro infrarrojo. Esto hace que el material sea tan atractivo en la fabricación de los dispositivos optoelectrónicos que funcionan en el área IR del espectro de ondas electromagnéticas.

En el presente trabajo se pretende hacer crecimientos de heteroestructuras, sistemas ternarios de GaAsSb con bajas concentraciones de Sb; dado con la técnica de epitaxia en fase líquida (Liquid Phase Epitaxy-LPE). A diferencia de otros modos de crecimiento, como, la epitaxia metalorgánica en fase de vapor (Metalorganic vapor phase epitaxy- MOVPE) que se caracteriza por formación de la capa epitaxial producida por una pirólisis de los productos químicos de la superficie del sustrato, así como el crecimiento epitaxial por haces moleculares (Molecular beam epitaxial-MBE), es una técnica física de síntesis en la que una lámina de un sólido crece, en una cámara de ultra-alto vacío, por la reacción de haces atómicos o moleculares de sus componentes elementales en fase vapor, al incidir éstos sobre un sustrato. [1]. Estas técnicas de crecimiento realizan con velocidades muy lentas y, por eso, permiten controlar los parámetros de las capas epitaxiales con más alta precisión. Sin embargo, los equipos necesarios para estos son muy costosos y los procesos se hacen fuera de equilibrio, por eso la calidad es baja. [2] A todo esto, se optó en utilizar el método por epitaxia en fase líquida (LPE), que se hace en las condiciones cercas al equilibrio termodinámico, tenemos formación de cristales de buena calidad con más baja concentración de defectos. Sin embargo, es importante mencionar que LPE ha sido desfavorecido especialmente en aplicaciones de dispositivos por no tener uniformidad de área, además, de poco control del espesor. Por otro lado, la cristalización a temperaturas más bajas facilita la controlabilidad de la composición de la capa y permite evitar la formación de defectos estructurales de alta densidad y estados localizados. Sin embargo, GaAsSb revela un fuerte comportamiento de inmiscibilidad cerca del límite rico en GaAs y es difícil obtener capas de GaAsSb con un contenido de Sb superior al 3 %. [3]

El objetivo del trabajo es el crecimiento por LPE de las capas GaAsSb con bajas concentraciones de Sb a bajas temperaturas e investigación de sus características.

En el capítulo 1 analizaremos los semiconductores III-V, compuestos binarios y ternarios, enfatizaremos compuestos como GaAs, GaSb y GaAsSb. El crecimiento de una heteroestructura, que está compuesta de capas desacopladas en parámetro de red, provoca un esfuerzo en la estructura atómica de la capa epitaxial, y altera las bandas de energía del sistema (GaAsSb/GaAs). Por eso hemos realizado análisis del cambio de banda prohibida en soluciones sólidas GaAsSb sin tomar en atención el esfuerzo y con esfuerzo.

En el capítulo 2 utilizaremos el método de CALPHAD en aplicación de cálculo de diagramas de fase, analizaremos la descomposición espinodal de nuestro sistema ternario, así como, el cambio de área de miscibilidad bajo esfuerzo.

El capítulo 3 contendrá una breve reseña del equipo de LPE, de igual manera para espectroscopia de fotoluminiscencia y difracción por rayos X.

En el capítulo 4 plantearemos los parámetros necesarios para el crecimiento de las capas epitaxiales y los regímenes de crecimiento.

Para terminar en el capítulo 5 se presentaran los resultados de la caracterización.

CAPITULO 1.-Materiales semiconductores III-V

1.1 Semiconductores III-V: Sistemas binarios y ternarios

En los semiconductores, la distribución de los electrones ubicados en los intervalos más altos de energía electrónica determina las propiedades del material. En estos materiales la banda de valencia (BV) es el rango más alto de energía en que los electrones están normalmente presentes a temperatura cero absolutas, mientras que la banda de conducción (BC) es el rango más bajo de estados electrónicos vacantes. Las bandas de energía permitidas están separadas unas de otras (BV-BC) por una región denominada brecha de energía prohibida (E_g). Los electrones se acomodan llenando primeramente la banda con menos energía y así de modo secuencial las siguientes bandas hasta gastar todos los electrones. Esta estructura de bandas es igual a la de un material aislante, solo difiere que la E_g es más grande que en la de

materiales semiconductores. Por lo tanto, en los aislantes es muy difícil tener un salto de electrones a la banda de conducción, mientras que en el semiconductor sí. En los metales la distinción de las bandas no tiene sentido, ya que la conducción se produce en una o más bandas parcialmente rellenas que adquieren las propiedades de banda de valencia y conducción.

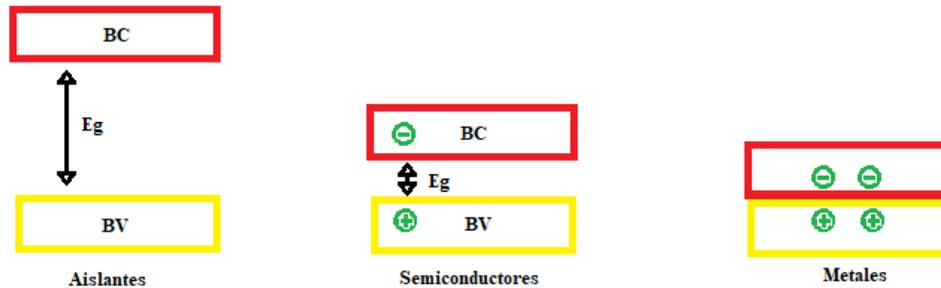


Figura 1.- Clasificación de los materiales según las bandas de energía (aislantes, semiconductores y metales), donde E_g es la energía de banda prohibida, BC banda de conducción y BV banda de valencia.

El desarrollo de materiales semiconductores conlleva trabajo en la optimización de los parámetros de crecimiento, del estudio de sus propiedades estructurales, ópticas, energéticas, etc. Partiendo de compuestos binarios del grupo III-V, ya sean por ejemplo GaAs, GaSb, AlAs, InSb, etc. Sus propiedades específicas están dadas por su estructura de banda y claro también para el crecimiento de estructuras el parámetro de red.

La dependencia de la energía del electrón E en función de su momentum P tiene gran importancia. Dicha relación es bastante complicada, ya que muestra máximos y mínimos para ciertos valores de P . Por otro lado, debido a que cualquier sistema tiende a un estado de equilibrio con la menor energía, los electrones de la banda de conducción estarán localizados en el nivel más bajo o mínimo absoluto de la dependencia $E=E(P)$, mientras que los huecos se encontrarán en el máximo de la valencia. De aquí que la localización relativa de estos puntos extremos de la relación $E(P)$ influyan de manera determinante en las propiedades electro-físicas y ópticas del material. [4]

Sí se da el caso que el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia estén localizados en el mismo valor de P , se dice que es una estructura de banda directa, en el caso contrario sí el mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia tienen valores distintos de P , entonces el semiconductor tiene una estructura de banda indirecta.

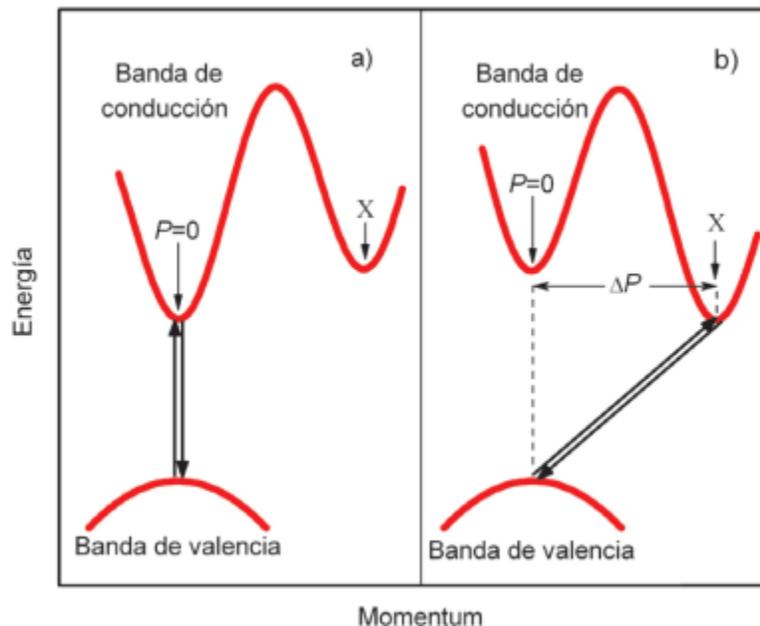


Figura 2.- Energía del electrón en función del momento P para semiconductores de estructura de banda directa a), donde el valor del momento del máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción es cero ($P=0$); para estructura de banda indirecta b), donde el mínimo de la banda de conducción es X ($P=X$) y el máximo de la banda de valencia es cero ($P=0$). [4]

Son dos procesos los cuales pueden ocurrir: la generación de un par electrón-hueco mediante la absorción de un fotón con energía mayor al ancho de la banda prohibida y el proceso de recombinación de un par electrón-hueco acompañado con un fotón una energía aproximadamente igual al ancho de la banda prohibida.

En banda indirecta los procesos de absorción y recombinación vienen acompañados con un cambio de momento del electrón. El cambio de momento ΔP debe ser recompensado con vibraciones de la red cristalina del material, estas vibraciones son conocidas como cuasipartículas y son llamadas fonones. Siempre los procesos donde participan 3 partículas son menos probables, por esto las aplicaciones de estos materiales es sumamente deficiente.

A continuación, se mostrará una tabla con compuestos binarios III-V con su brecha energética y sus parámetros de red.

Compuesto binario III-V	Brecha energética Eg, eV	Parámetro de red α , Å
AlP*	2.45	5.45
GaP*	2.26	5.45
InP	1.35	5.86
AlAs*	2.16	5.66
GaAs	1.42	5.65
InAs	0.36	6.06
AlSb*	1.68	6.14
GaSb	0.72	6.10
InSb	0.17	6.48

Tabla 1.- Banda prohibida a temperatura ambiente y parámetros de red para algunos compuestos binarios III-V (Los asteriscos indican una estructura de banda indirecta). [4]

Es importante señalar que la Ley de Vegard determina que el parámetro de red de una solución sólida varia linealmente con las composiciones de los dos constituyentes a la misma temperatura [5], ya sea:

$$\alpha_{ABxC(1-x)} = x\alpha_{AB} + (1-x)\alpha_{AC} \quad (1)$$

Combinando compuestos binarios III-V podemos obtener compuestos de mayores componentes, ya sean algunos de ellos GaAsSb, GaInAs, AlInAs, etc. En la Figura 3 podemos apreciar algunas aleaciones:

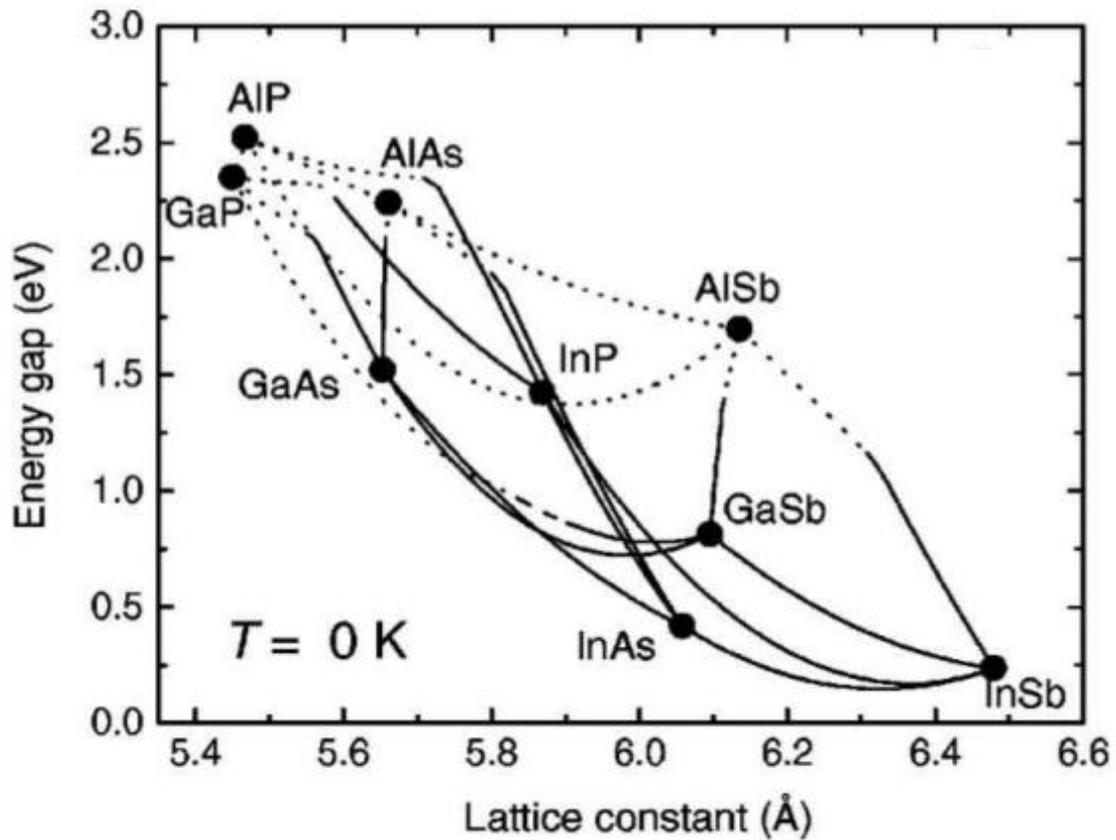


Figura 3.- Brecha energética E_g de 9 aleaciones binarias con semiconductores III-V en función de su constante de red a . Con las líneas punteadas se ilustran las transiciones indirectas y con las líneas finas, las directas. [4]

En la Figura 3 podemos observar que las aleaciones InAsP, InAsSb, GaInAs, GaInSb, GaAsSb tienen una estructura de banda directa. Mientras que las aleaciones AlGaP y AlAsSb presentan una estructura de banda indirecta. Para compuestos como GaAsP, GaInP, AlInP, AlGaAs y AlGaSb hay una transición de banda directa a indirecta.

1.2 Estructura de banda de energía GaAsSb

En primeros términos la ingeniería de banda es la capacidad del control de fabricación de dispositivos según su brecha energética. Eligiendo proporciones, en este caso de Galio, Arsénico y Antimonio se pueden generar aleaciones con la brecha deseada. El Arseniuro de Galio (GaAs) es un semiconductor con una brecha directa $E_g=1.5198$ a temperatura ambiente (Tabla 1). Por otro lado, el antimoniuro de galio (GaSb) tiene una brecha directa de $E_g=0.812$ a temperatura ambiente. En 1967 Varshni propuso un modelo empírico para describir la dependencia de la temperatura de la energía de gap. Este modelo está descrito por la siguiente ecuación:

$$E_g(T) = E_g(T = 0) - \frac{\alpha T^2}{\beta + T} \quad (2)$$

Donde $E_g(T)$ es la energía de transición a la temperatura T, y α representa el límite cuando $T \rightarrow \infty$ de $-dE_g(T)/dT$ y β es un parámetro de temperatura, cuya magnitud se supone comparable con la temperatura de Debye θ_D . [6]

Para GaAs:

$$E_{gGaAs}(T) = E_{GaAs}(0) - \frac{\alpha_{GaAs} \cdot (T^2)}{\beta_{GaAs} + T} \quad (3)$$

Para GaSb:

$$E_{gGaSb}(T) = E_{GaSb}(0) - \frac{\alpha_{GaSb} \cdot (T^2)}{\beta_{GaSb} + T} \quad (4)$$

Al producir una aleación en que la fracción molar x de los átomos de Arsénico es sustituida por Antimonio (indicamos el compuesto como $GaAs_xSb_{1-x}$) se tendrá un semiconductor con una brecha controlada, como:

$$E_{gGaAsSb}(x) = E_{gGaAs}(x) + E_{gGaSb}(1 - x) - C_{GaAsSb} x(1 - x) \quad (5)$$

Donde E_{gGaAs} y E_{gGaSb} son las energías de banda prohibida de GaAs y GaSb respectivamente, y C_{GaAsSb} es el parámetro de Bowing.

Parámetro	GaAs	GaSb	GaAsSb	Ref.
Energía de banda prohibida E_g (eV)	1.422 (300 K) 1.518 (15K)	0.727 (300K) 0.811 (15K)	$1.422(x)+0.727(1-x)-1.43x(1-x)$ (300 K) $1.518(x)+ 0.811(1-x)-1.43x(1-x)$ (15 K)	[7]
Parámetro de Bowing (eV)	-	-	1.43 eV	[7]
Constante de red (Å)	$5.65325+(3.88(10^{-5})) (T-300) = 5.642$	$6.09591+(4.723(10^{-5})) (T-300) = 6.082$	$5.642 (y) +6.082(1-y)$	[7]
Coeficientes de Varshni: $\alpha(\frac{eV}{K}), \beta(K)$	$\alpha = 0.0005405$ $\beta = 204$	$\alpha = 0.000417$ $\beta = 140$	-	[7]

A continuación, en la Tabla 2 se mostrarán algunos de sus parámetros de estructuras de banda.

Tabla 2.- Parámetros de estructuras de banda GaAs, GaSb, GaAsSb. [7]

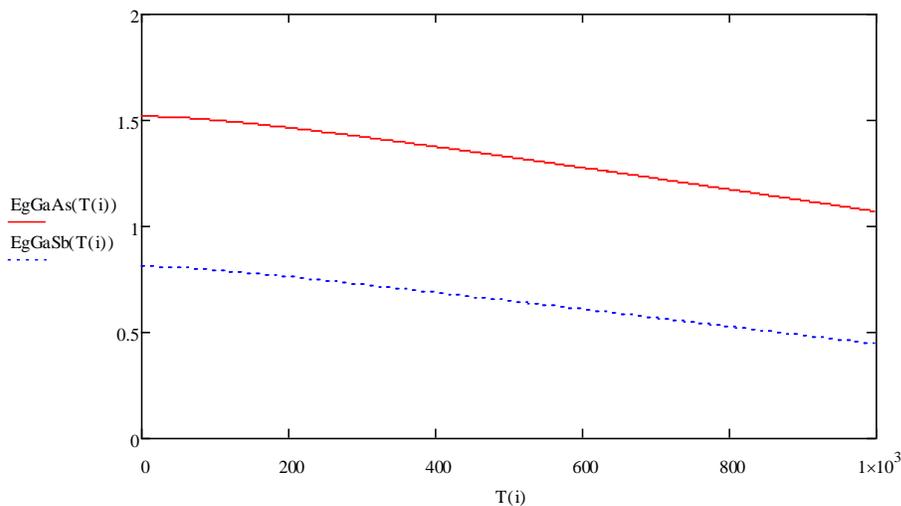


Figura 4.-Diagrama de banda de transición de compuestos binarios GaAs y GaSb en función a la temperatura.

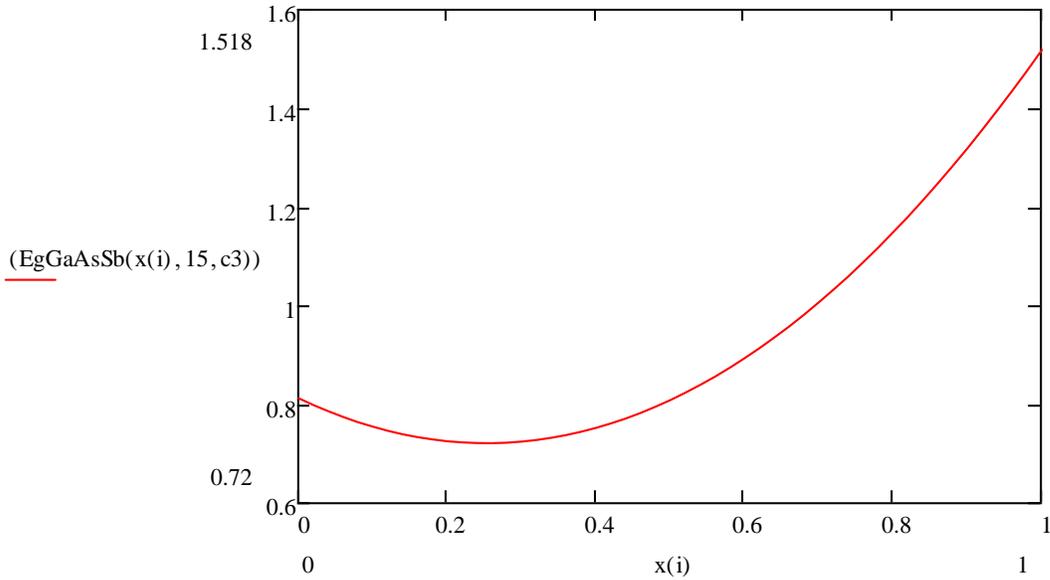


Figura 5.-Diagrama de banda de transición de compuestos ternario GaAs(x)Sb(1-x) en función de su composición.

1.3 El cambio de Bandas energéticas de GaAsSb debido al esfuerzo

Nos restringimos al caso especial de una deformación biaxial para capas epitaxiales crecidas sobre los substratos de orientación (001)

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} \neq \varepsilon_{zz} \qquad \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} \qquad (6)$$

Esto cubre esencialmente dos de los sistemas tensionados más importantes: (1) un semiconductor de capa comprimida crecido en un sustrato orientado (001) y (2) un semiconductor a granel bajo una tensión a lo largo de la dirección z. Para el caso de la deformación reticular desajustada, obtenemos:

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_0 - a(x)}{a(x)} \qquad \varepsilon_{zz} = -\frac{2 C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{xx} \qquad (7)$$

donde a_0 , y $a(x)$ son las constantes de red del sustrato y el parámetro de red de nuestra capa epitaxial respectivamente. C_{11} y C_{12} son las constantes de rigidez elástica. Esto utilizando el hecho de que, en el plano de la heterounión, el material estratificado se deforma de tal manera que la constante de red a lo largo del plano de la capa es igual a_0 . [8]

Por lo tanto, obtenemos las energías de borde de las bandas de huecos pesados y huecos ligeros:

$$E_{HH} = a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (8)$$

$$E_{LH} = a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (9)$$

Por otro lado, la energía del borde de la banda de conducción del electrón está dada por:

$$E_c = E_g + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (10)$$

Tenga en cuenta que tanto la energía de la banda de conducción como la de valencia se definen como "positivas para la dirección ascendente de la energía". Las transiciones netas de energía serán:

$$E_{C-HH} = E_g + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (11)$$

$$E_{C-LH} = E_g + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (12)$$

para la banda de conducción de agujeros pesados, y:

$$E_{C-LH} = E_g + a_c(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) - a_v(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (13)$$

$$E_{C-LH} = E_g + a(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz}) \quad (14)$$

Donde E_g es la banda prohibida del semiconductor no deformado, y

$$a = a_c - a_v \quad (15)$$

es el potencial de deformación hidrostática. A veces, las energías de deformación hidrostática y cortante, δE_{hy} y δE_{sh} se definen, respectivamente, como

$$\delta E_{hy} = -a(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (16)$$

$$\frac{\delta E_{sh}}{2} = -\frac{b(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} - 2\varepsilon_{zz})}{2} = Q_\varepsilon \quad (17)$$

Los intervalos de banda efectivos están dados por

$$E_{C-HH} = E_g - \delta E_{hy} - \frac{\delta E_{sh}}{2} \quad (18)$$

$$E_{C-LH} = E_g - \delta E_{hy} + \frac{\delta E_{sh}}{2} \quad (19)$$

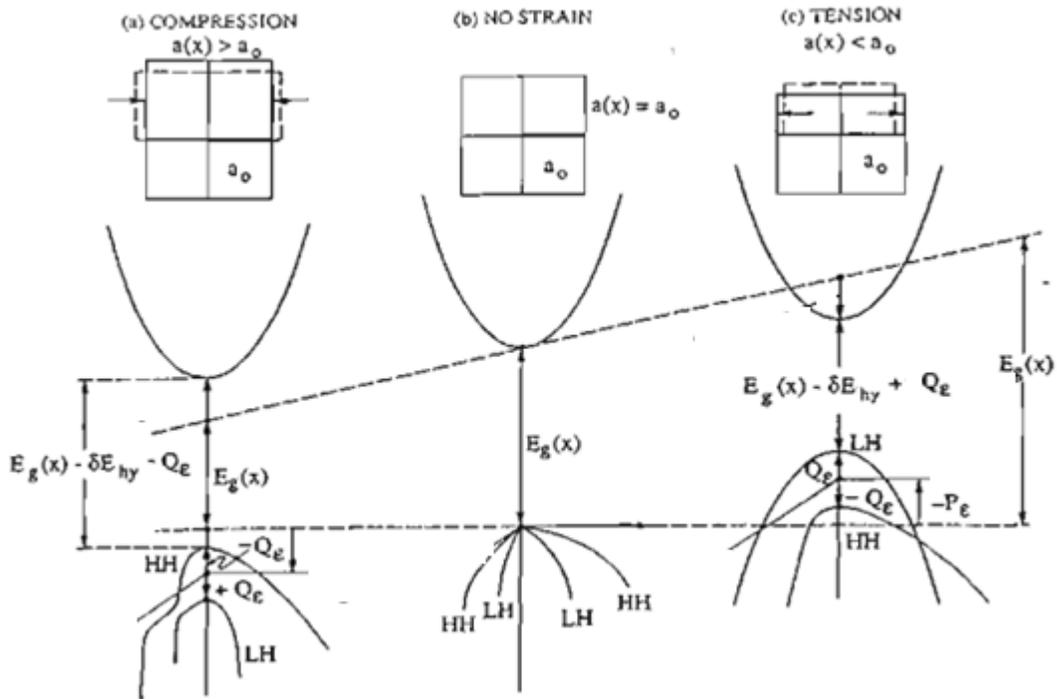


Figura 6.-La estructura de banda de energía para un material bajo (a) compresión biaxial. (b) condición de red emparejada, y (c) tensión biaxial para diferentes fracciones molares x. [8]

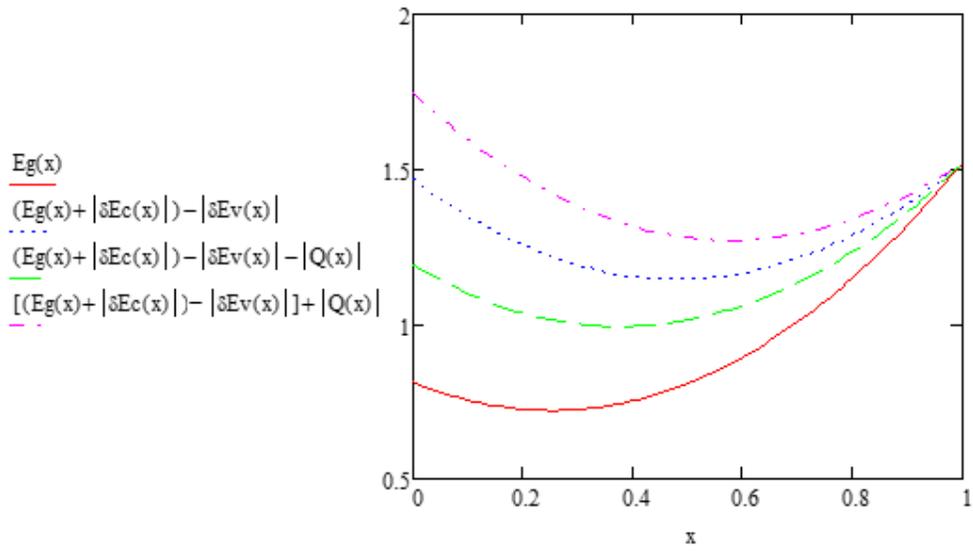


Figura7.- Diagrama de banda de transición de compuestos ternario $\text{GaAs}(x)\text{Sb}(1-x)$ en función de su composición. Línea roja representa banda transición en su estado ordinario, la línea punteada azul la banda de transición más las energías de deformación hidrostática, la línea verde banda de transición en compresión, y línea punteada rosa la banda de transición en tensión.

Es evidente en la Figura 7 que el compuesto ternario $\text{GaAs}(x)\text{Sb}(1-x)$ muestra un mínimo en su banda de transición, que, a diferencia a otros compuestos, tiene un desarrollo continuo, ya sea solo disminuir o aumentar.

1.4 Diagramas de fases de GaAs, GaSb y GaAsSb

Para hacer crecimiento de capas epitaxiales necesitamos el análisis de los diagramas de fase de los componentes que lo conforman, teniendo así tener las condiciones de crecimiento; como la composición de fases de la solución para crecimiento en equilibrio termodinámico, interpretación, línea de liquidus, solidos, y así la posterior interpretación para obtener temperaturas de homogenización, temperatura del líquido, sobreenfriamiento, etc.

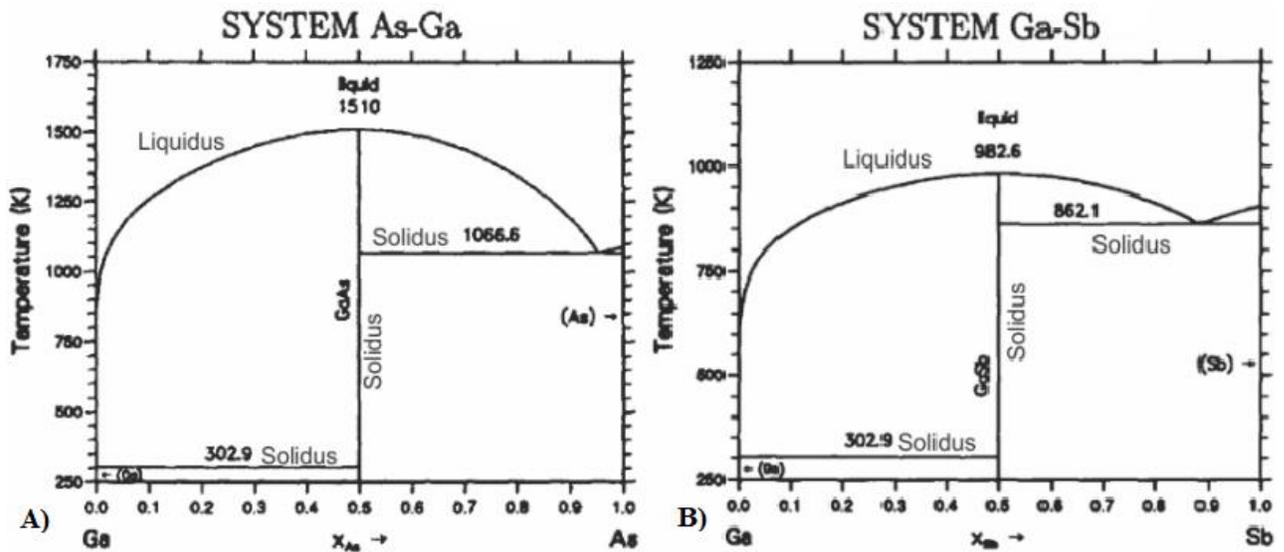


Figura 8.- Diagrama de fase de GaAs corresponde a la figura A) y de GaSb a la figura B). [9]

En la Figura 8 el eje horizontal denota la composición de cada elemento, teniendo Ga en la parte izquierda de la imagen A) y B) e indicando su máximo al inicio de éste (lado izquierdo). Además, los elementos As y Sb en la imagen A) y B) respectivamente, indicando su máximo en la parte derecha. En el eje vertical se indica la temperatura. En los extremos del eje de composición como anteriormente fue mencionando tenemos los componentes puros, por lo tanto, se encuentran nuestras temperaturas de fusión para Ga correspondiente $T_f = 302.9\text{K}$, para As $T_f = 1066.6\text{K}$ y para Sb $T_f = 862.1\text{K}$. Las rectas horizontales y verticales corresponden la línea de solidus, mientras que las curvas se denominan línea de liquidus; la temperatura de cristalización se ubica, naturalmente, en la línea del liquidus, donde a fase líquida está

saturada, mientras que la temperatura del final de la cristalización se localiza sobre la línea de solidus.

En la imagen A) entre la línea de liquidus y solidus en la parte izquierda tenemos GaAs en fase sólida, y Ga y As en fase líquida, claramente cada uno con su correspondiente composición, pero indicando una mayor proporción de Ga, mientras que del lado derecho hay una mayor proporción de As (siguiendo la misma lógica de fases).

Debajo en la línea de solidos de A), en la parte izquierda se halla GaAs y Ga sólidos, y en la parte derecha GaAs y As sólidos. Indicado en la parte superior de la línea vertical el punto de estequiometria de 1510 K. Siguiendo el mismo orden, en B) la parte derecha debajo de la línea de solidus se encuentra GaSb y Ga en fase sólida, mientras que en la parte izquierda está GaSb y Sb sólidos, con un punto estequiometria de 982. 6 K.

El diagrama de fase ternario III-V con el compuesto $GaAs_xSb_{1-x}$ consiste en dos diagramas de fase binarios Ga-As y Ga-Sb con compuestos GaAs y GaSb, respectivamente, y un diagrama de fase binario As-Sb con algunas zonas de miscibilidad. El diagrama de fase ternario se expresa simplemente usando las isoterma liquidus y solidus. [10]

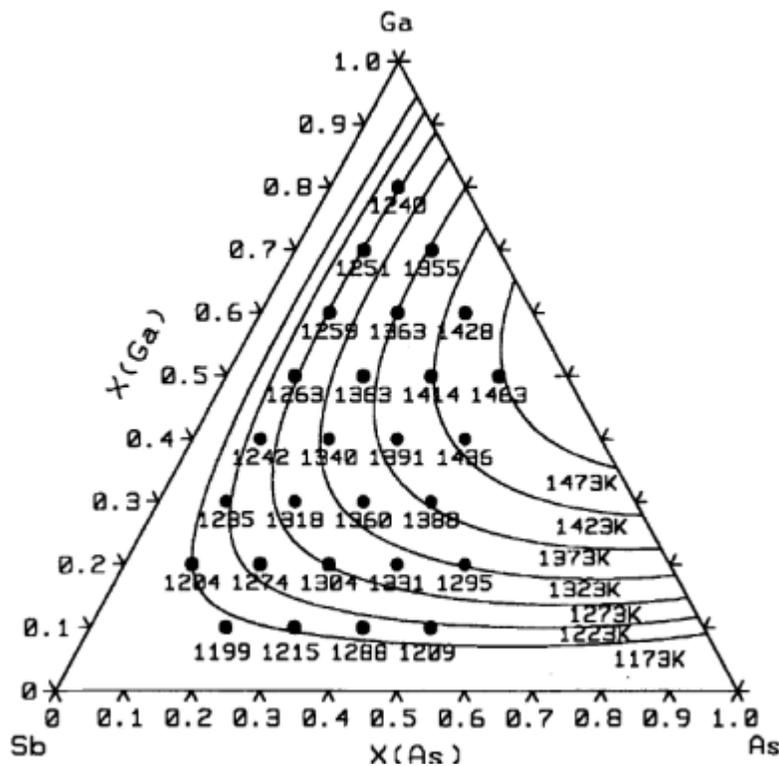


Figura 9. – Isotermas de fase líquida en el sistema ternario Ga-As-Sb. [11]

Los vértices de este triángulo corresponden a los componentes puros Ga, As, Sb, y los puntos en los lados a los sistemas de dos componentes Ga-As, Ga-Sb, As-Sb. Los puntos localizados dentro del triángulo de concentraciones determinan la composición del sistema de tres componentes

Para caracterizar cuantitativamente la composición de este sistema podemos aprovechar las propiedades geométricas del triángulo: si a través de cualquier punto del triángulo, se trazan tres rectas paralelas a sus lados, entonces la suma de los segmentos interceptados por estas rectas en cada uno de los lados no depende de la posición del punto y es igual al lado del triángulo.

Es decir, la unidad es el valor que adquiere un lado del triángulo, En este caso las concentraciones de Ga, As, y Sb representan su valor en relación con la longitud de los elementos interceptados en los lados del triángulo por rectas paralelas que pasan a través del punto que caracteriza la composición del sistema ternario.

El diagrama ternario puede obtenerse si los planos en los que se encuentran los diagramas binarios se giran 90 grados alrededor de los lados del triángulo de concentraciones, es decir en posición vertical. El diagrama volumétrico obtenido de esta manera, el liquidus ahora representa una superficie con curvatura convexa, limitada por los planos verticales laterales. La superficie de liquidus interceptada por los planos horizontales de temperatura constante, y estas son las isothermas.

CAPITULO 2.-Método CALPHAD en aplicación de cálculo de diagrama de fases L-S y caracterización de sistema GaAsSb

2.1 Descripción del método de CALPHAD

Energía de Gibbs del elemento puro

Energía de Gibbs para la presión constante

$$G_T = \Delta H_T - TS_T \quad (20)$$

Donde ΔH_T y S_T son la entalpía de formación y entropía absoluta a temperatura T

$$\Delta H_T = \Delta H_{298.15} + \int_{298.15}^T C_p dT \quad (21)$$

C_p es la capacidad térmica a presión constante y $\Delta H_{298.15}$ es la Entalpía de formación a 298.15 K

$$S_T = S_{298.15} + \int_{298.15}^T \frac{C_p}{T} dT \quad (22)$$

Por lo tanto

$$G_T = \Delta H_{298.15} - TS_{298.15} + \int_{298.15}^T C_p dT - T \int_{298.15}^T \frac{C_p}{T} dT \quad (23)$$

CALPHAD método presenta la energía de Gibbs de un elemento o de un compuesto estequiométrico como un polinomio al respecto de estados estandar de elementos (SER) [22]

$$G_i^0(T) - H_i^{SER} = a + bT + cT \ln T + \sum_2^n d_n T^n \quad (24)$$

Donde H_i^{SER} Es la entalpía de elemento determinado a 298.15 K y las propiedades termodinámicas son:

$$\begin{aligned}
S &= -b - c - c \ln T - \sum n d_n T^{n-1} \\
H &= a - cT - \sum (n-1) d_n T^n \\
C_p &= -c - \sum n(n-1) d_n T^{n-1}
\end{aligned}
\tag{25}$$

Energía de Gibbs de soluciones binarias

La energía de Gibbs se describe entonces mediante la fórmula general

$$G = G_{mix}^{ideal} + G_{ref} + G_{mix}^{xs} \tag{26}$$

Mezcla ideal

Se puede obtener una idea de la naturaleza física de la entropía a partir de la termodinámica estadística. Kelvin y Boltzmann reconocieron que había una relación entre la entropía y la probabilidad de un sistema con la entropía dada por

$$S = k \ln W \tag{27}$$

donde k es la constante de Boltzmann y W es una medida del desorden de un sistema.

Tomemos el ejemplo de un cristal con un total de N sitios disponibles para la ocupación de átomos o moléculas, n de los cuales están ocupados por A átomos/moléculas y (N- n) están ocupados por B átomos/moléculas. En este caso se puede demostrar que el número total de formas de distribuir las (W) viene dado por

$$W = \frac{N!}{n!(N-n)!} \tag{28}$$

Por lo tanto, podemos determinar

$$S = k \ln \left[\frac{N!}{n!(N-n)!} \right] \tag{29}$$

Usando la aproximación de Stiding, se convierte en

$$S = k[N \ln N - n \ln n - (N - n) \ln(N - n)] \quad (30)$$

Como las fracciones molares de A y B están dadas por $x_a = \frac{(N-n)}{N}$ y $x_b = \frac{n}{N}$ respectivamente, la ecuación se reduce a

$$S = -Nk(x_a \ln x_a + x_b \ln x_b) = -R(x_a \ln x_a + x_b \ln x_b) \quad (31)$$

Con $R = Nk$. Esto define entonces el cambio de entropía ideal en la mezcla. Si no hay interacciones repulsivas o atractivas entre los átomos A y B, la solución se llama ideal y la energía de mezcla de Gibbs está dada por

$$G_{mix}^{ideal} = RT(x_a \ln x_a + x_b \ln x_b) \quad (32)$$

En realidad, hay energías mixtas asociadas que deben considerarse, las interacciones atractivas y repulsivas entre los átomos A y B y un exceso adicional de energía de mezcla, G_{mix}^{xs} . La forma más sencilla de considerar estas interacciones es a través del modelo de solución regular. En este caso

$$G_{mix}^{xs} = x_a x_b \Omega \quad (33)$$

Además, las energías de Gibbs de los elementos puros están determinado por

$$G_{ref} = \sum_i x_i G_i^0 \quad (34)$$

donde x_i es la fracción molar del componente i y G_i^0 es la energía de Gibbs de la fase en cuestión en i puro.

Cálculos de energía de Gibbs y potenciales químicos para la fase líquida

La fase líquida con n elementos y concentraciones de cada elemento X_i^L

Combinación de las energías de Gibbs de los elementos puros

$$G_{ref}^L = \sum_{i=1}^n x_i^L G_i^{L0}, \quad G_i^{L0} = H_i^{SER} + GHSER_i^L \quad (35)$$

Energía de Gibbs para formar una solución ideal

$$G_{mix}^{L-id} = RT \sum_{i=1}^n X_i^L \ln X_i^L \quad (36)$$

Energía de exceso de Gibbs para formar una solución regular y no regular:

$$G_{mix}^{L-exc} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1+j}^{n+1} X_i^L X_j^L [\Omega_{ij}^0 + \Omega_{ij}^1 (X_i^L - X_j^L) + \dots] + \sum_{i,j,k=1}^n X_i^L X_j^L X_k^L \Omega_{ijk}^L \quad (37)$$

Total de energía de Gibbs de la solución líquida

$$G^L = G_{ref}^L + G_{mix}^{L-id} + G_{mix}^{L-exc} \quad (38)$$

Potencial químico de cada elemento en la fase líquida

$$\mu_i^L = G^L + \frac{\partial G^L}{\partial X_i^L} - \sum_j X_j^L \frac{\partial G^L}{\partial X_j^L} \quad (39)$$

Cálculos de energía de Gibbs y potenciales químicos para la fase sólida

La fase sólida ternaria AB_xC_{1-x}

Aceptamos $Y_A=Y$, $Y_B=x$, $Y_C=1-x$

Combinación de las energías de Gibbs de los elementos puros

$$G_{ref}^S = \sum_{i,j=1}^n Y_i^S Y_j^S G_{ij}^{S0}, \quad G_{ij}^{S0} = H_i^{SER} + H_j^{SER} + GH_{SER}_{ij}^S \quad (40)$$

Energía de Gibbs para formar una solución ideal

$$G_{mix}^{S-id} = RT \sum_{i=0}^n Y_i^S \ln Y_i^S \quad (41)$$

Energía de exceso de Gibbs para formar una solución regular

$$G_{mix}^{S-exc} = \sum_{i,j,k=1}^n Y_i^S Y_j^S Y_k^S L_{ijk}^S \quad (42)$$

Total, energía de Gibbs de la solución sólida

$$G^S = G_{ref}^S + G_{mix}^{S-id} + G_{mix}^{S-exc} \quad (43)$$

Potencial químico de cada elemento en la fase sólida

$$\mu_{ij}^S = G^S + \frac{\partial G^S}{\partial Y_i^S} + \frac{\partial G^S}{\partial Y_j^S} - \sum_{k=1}^n X_k^S \frac{\partial G^S}{\partial X_k^S} \quad (44)$$

2.2 Cálculo de diagrama de fases para el sistema GaAsSb

Igualdad de potenciales químicos de elementos en las fases sólida y líquida permite calcular el diagrama de fases. El equilibrio entre las fases líquida y sólida:

$$\begin{aligned} \mu_{GaAs}^S &= \mu_{Ga}^L + \mu_{As}^L \\ \mu_{GaSb}^S &= \mu_{Ga}^L + \mu_{Sb}^L \end{aligned} \quad (45)$$

Los potenciales químicos se calculan a partir de la energía e Gibbs, para fase líquida en base a las concentraciones de los elementos x^i y para fase sólida en base a la fracción molares de los compuestos binarios y_{ij} :

$$\mu_{Ga}^L = G^L + \frac{\partial}{\partial x_{Ga}^L} G^L - \left[x_{Ga}^L \frac{\partial}{\partial x_{Ga}^L} G^L + x_{As}^L \frac{\partial}{\partial x_{As}^L} G^L + x_{Sb}^L \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^L} G^L \right] \quad (46)$$

$$\mu_{Sb}^L = G^L + \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^L} G^L - \left[x_{Ga}^L \frac{\partial}{\partial x_{Ga}^L} G^L + x_{As}^L \frac{\partial}{\partial x_{As}^L} G^L + x_{Sb}^L \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^L} G^L \right] \quad (47)$$

$$\mu_{As}^L = G^L + \frac{\partial}{\partial x_{As}^L} G^L - \left[x_{Ga}^L \frac{\partial}{\partial x_{Ga}^L} G^L + x_{As}^L \frac{\partial}{\partial x_{As}^L} G^L + x_{Sb}^L \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^L} G^L \right] \quad (48)$$

$$\mu_{GaAs}^S = G^S + \frac{\partial}{\partial x_{As}^S} G^S - \left[x_{Sb}^S \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^S} G^S + x_{As}^S \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^S} G^S \right] \quad (49)$$

$$\mu_{GaSb}^S = G^S + \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^S} G^S - \left[x_{Sb}^S \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^S} G^S + x_{As}^S \frac{\partial}{\partial x_{Sb}^S} G^S \right] \quad (50)$$

La energía de Gibbs para fase líquida para elementos puros es:

$$G_{Ga}^{0L}(T) = GLHERGA + H_{Ga} \quad (51)$$

$$G_{As}^{0L}(T) = GLHERAS + H_{As} \quad (52)$$

$$G_{Sb}^{0L}(T) = GLHERSB + H_{Sb} \quad (53)$$

Por lo tanto, la energía de Gibbs para fase líquida es:

$$G_{GaAsSb}^L(x_{Ga}^L, x_{As}^L, x_{Sb}^L, T) = x_{Ga}^L \cdot G_{Ga}^{0L}(T) + x_{As}^L \cdot G_{As}^{0L}(T) + x_{Sb}^L \cdot G_{Sb}^{0L}(T) + RT[x_{Ga}^L \ln x_{Ga}^L + x_{As}^L \ln x_{As}^L + x_{Sb}^L \ln x_{Sb}^L] + x_{Ga}^L x_{As}^L L_{GaAs}^L(x_{Ga}^L, x_{As}^L, T) + x_{Ga}^L x_{Sb}^L L_{GaSb}^L(x_{Ga}^L, x_{Sb}^L, T) + x_{Sb}^L x_{As}^L L_{SbAs}^L(x_{As}^L, x_{Sb}^L, T) + x_{Ga}^L x_{As}^L x_{Sb}^L L_{GaAsSb}^L(x_{Ga}^L, x_{As}^L, x_{Sb}^L, T) \quad (54)$$

La energía de Gibbs para compuestos binarios:

$$G_{GaAs}^{0S} = H_{Ga}^{SER} + H_{As}^{SER} + GH_{SER}_{GaAs}^S G_{GaSb}^{0S} = H_{Ga}^{SER} + H_{Sb}^{SER} + GH_{SER}_{GaSb}^S \quad (55)$$

La energía de Gibbs para fase solida es:

$$G_{Ref}^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) = x_{As}^S \cdot G_{GaAs}^{0S} + x_{Sb}^S \cdot G_{GaSb}^{0S} \quad (56)$$

$$G_{Imix}^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) = R \cdot T \cdot x_{As}^S \ln x_{As}^S + R \cdot T \cdot x_{Sb}^S \ln x_{Sb}^S \quad (57)$$

$$G_{Emix}^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) = x_{Ga}^S \cdot x_{As}^S \cdot x_{Sb}^S \cdot L_{GaAsSb}^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) \quad (58)$$

Por lo tanto:

$$G^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) = G_{Ref}^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) + G_{Imix}^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) + G_{Emix}^S(x_{Ga}^S, x_{As}^S, x_{Sb}^S, T) \quad (59)$$

Parámetros	Valores	Ref.
<i>GLHERGA</i>	-1389.2+ 114.0490T- 26.0693Tln(T)+ 1.506 x 10 ⁻⁴ T ² - 4.0173 x 10 ⁻⁸ T ³ - 118332T ⁻¹	[12]
<i>GLHERAS</i>	17172.453+ 99.78639T- 23.3144Tln(T)- 2.71613 x 10 ⁻³ T ² + 11600T ⁻¹	[12]
<i>GLHERSB</i>	10579.47+ 134.231525T- 30.5130752Tln(T)+ 7.748768 x 10 ⁻³ T ² - 3.003415 x 10 ⁻⁶ T ³ + 100625T ⁻¹ - 1.7485 x 10 ⁻²⁰ T ⁷	[12]
<i>L_{GaAs}^L</i>	-25503.6-4.3109T-5174.7(XAs-XSb)	[12]
<i>L_{GaSb}^L</i>	-13953.8+71.07866T-9.6232Tln(T)+(1722.9-1.92588T)(XGa-XSb)+ 2128.3(XGa-XSb) ²	[12]
<i>L_{SbAs}^L</i>	-16197.1+8.9167T-5018.0(XAs-XSb)	[12]
<i>L_{GaAsSb}^L</i>	32000-25T	[12]
<i>H_{Ga}</i>	5572	[13]

H_{As}	5117.032	[13]
H_{Sb}	5870.152	[13]
H_{Ga}^{SER}	$-7055.643+132.73019T-26.0692906T\ln(T)+ 1.506 \times 10^{-4}T^2-4.0173 \times 10^{-8}T^3-118332T^{-1}+1.645 \times 10^{23}T^{-9}$	[13]
H_{As}^{SER}	$-7270.447+122.2111069T-23.3144T\ln(T)- 0.00271613T^2+11600T^{-1}$	[13]
H_{Sb}^{SER}	$-9242.858+156.154689T-30.5130752T\ln(T)+ 0.007748768T^2-3.003415 \times 10^{-6}T^3+100625T^{-1}$	[13]
$GHSE_{GaAs}^S$	$-104352+265.43256T-48.681258T\ln(T)- 1.1158 \times 10^{-3}T^2+127670T^{-1}-7.1378 \times 10^{-7}T^3$	[12]
$GHSE_{GaSb}^S$	$-59774.701+267.809609T-51.1966138T\ln(T)+ 5.14355 \times 10^{-3}T^2-17707T^{-1}-3.043588 \times 10^{-6}T^3+1.645 \times 10^{23}T^{-9}$	[12]
L_{GaAsSb}^S	$24824-7.74301T+4774(XsGaXsSb-XsGaXsAs)$	[12]

Tabla 3.- Los parámetros termodinámicos utilizados en los cálculos.

A continuación, en la Figura 10, se presentan los diagramas de fase binarios GaAs y GaSb; comprobados y calculados por método CALPHAD.

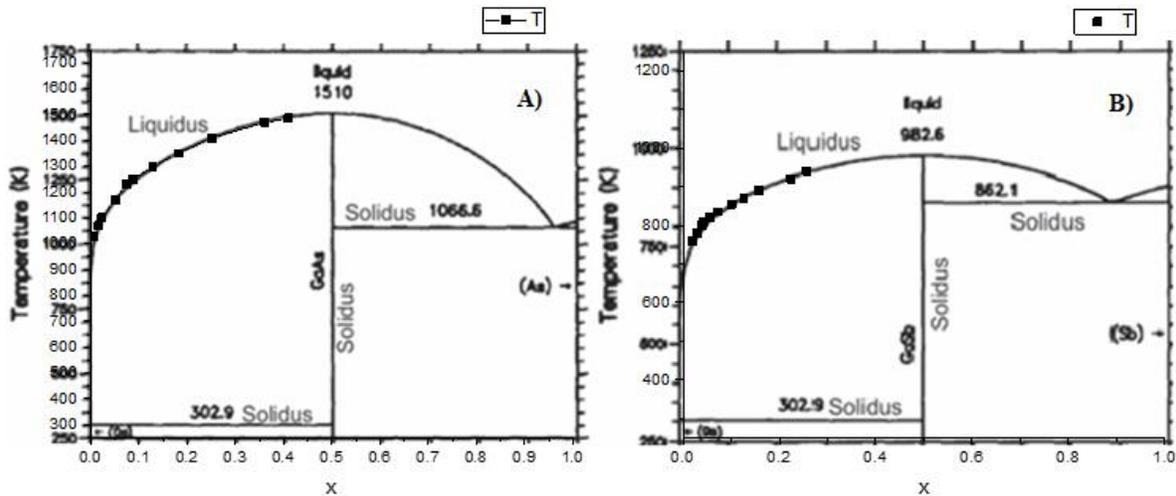


Figura 10.- A) Sistema de diagrama de fase binario Ga-As y B) Sistema de diagrama de fase Ga-Sb. Los puntos color negro representan los cálculos por CALLPHAD, sobrepuestos sobre diagramas teóricos.

2.3 Descomposición espinodal

Cálculo de área de miscibilidad sin esfuerzo

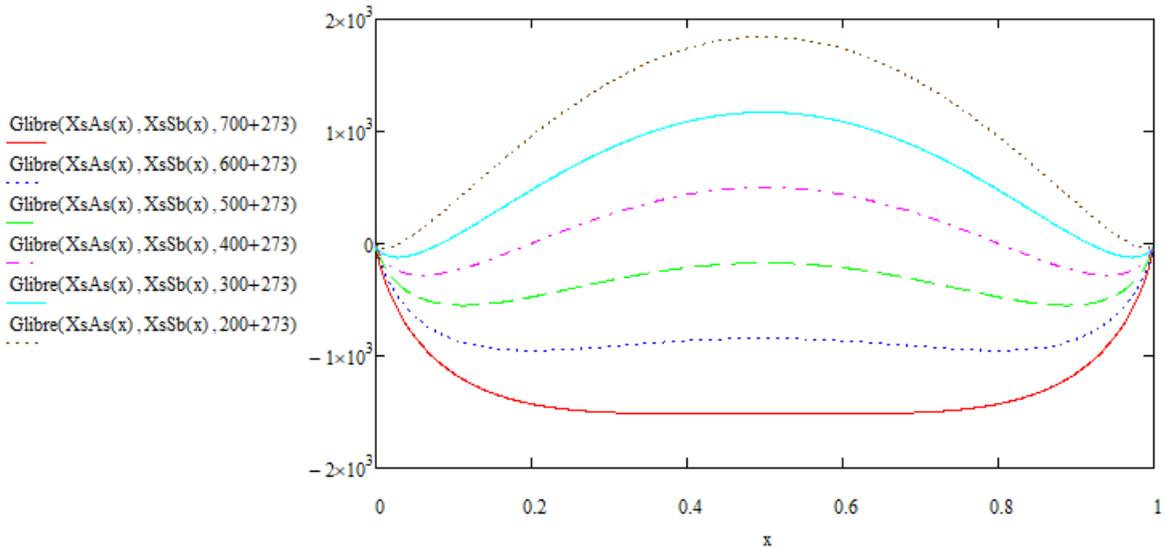


Figura 11.- Energía de Gibbs para fase sólida del sistema ternario GaAsSb en función de composición, con temperaturas de 200 a 700 °C.

Consideremos el comportamiento de la energía G_{libre} en función a la temperatura y a la composición para el sistema GaAs-GaSb de la Figura 11, en el cual la entalpía de la mezcla ΔH_T es positiva, y a temperaturas elevadas como 700 °C (línea color rojo) el término de la entropía $-TS_T$ supera a ΔH_T . Cuando esto sucede la curva de G_{libre} tiene una forma del tipo U. A medida que disminuye la temperatura T, como consecuencia de la reducción de la magnitud $-TS_T$, en algún momento la curvatura en forma de U cambiara a la forma W. Podemos observar que en las temperaturas como de 200°C a 600°C (línea negra y azul oscuro) es evidente este comportamiento. Entre los mínimos de la curva G_{libre} para estas temperaturas, se puede trazar una tangente. De esta forma se determinan las composiciones de las soluciones límite en las que se desintegra el sistema a medida que la temperatura disminuye.

La descomposición espinodal es un mecanismo por el cual una sola fase termodinámica se separa espontáneamente en dos fases. La descomposición ocurre cuando no existe una barrera termodinámica para la separación de fases. Como resultado, la separación de fases por descomposición no requiere los eventos de nucleación resultantes de las fluctuaciones termodinámicas que normalmente desencadenan la separación de fases.

Criterio de estabilidad para solución ternaria $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ [14]:

$$\left(\frac{\partial^2 G}{\partial x^2}\right) \geq 0 \quad (60)$$

donde G es la energía libre de Gibbs por mol de la solución, x es la fracción molar del constituyente binario.

2.4 El cambio de área de miscibilidad bajo el esfuerzo

La energía de Gibbs total G^{total} de la capa epitaxial se obtiene como la suma de la energía libre de tensión G^S de la fase sólida y la energía elástica G^{el} debido al desajuste de la red entre la capa epitaxial y el sustrato:

$$G^{\text{total}} = G^S + G^{\text{el}} \quad (61)$$

Se utilizo el procedimiento de Ohtani [15]:

$$G^{\text{el}} = \frac{\mu}{2} \frac{1+v}{1-v} N_A a^3 f^2 \quad (h < h_c) \quad (62)$$

$$G^{\text{el}} = \frac{N_A a^3}{4h} \Delta \left(1 + \ln \frac{h}{h_c}\right) \quad (h \geq h_c) \quad (63)$$

Donde h es el espesor, h_c el espesor critico, a el parámetro de red, μ el modulo de corte, v el coeficiente de Poisson, N_A el número de Avogadro. El espesor critico se calcula con la siguiente ecuación [15]:

$$h_c = \frac{\Delta}{2\mu f^2} \frac{1-v}{1+v} \quad (64)$$

Para la barrera de energía Δ utilizamos 0.8J/m^2 [16] corresponde al caso de crecimiento en sustratos con orientación (100). El parámetro de desajuste de red es [15]:

$$f = \frac{a-a_s}{a_s} \quad (65)$$

Donde a_s es el parámetro de red del sustrato.

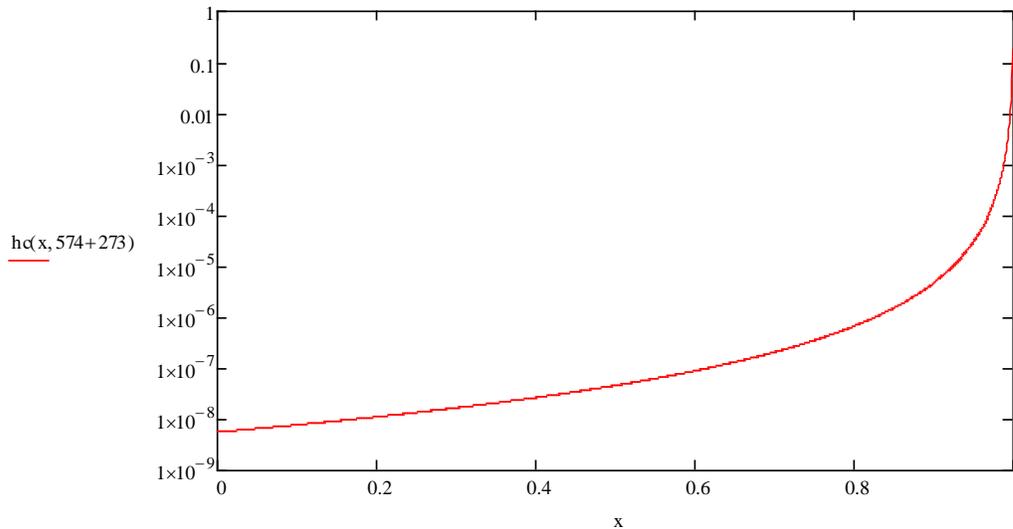


Figura 12. – Dependencia del espesor crítico h_c en función de la composición.

Se puede observar en la Figura 12 que al aumento del compuesto de GaAs el espesor crítico aumenta, esto debido a que el parámetro de desajuste de red es más pequeño a medida que se acerca al parámetro de red del sustrato GaAs (100) en el cual se creció la capa epitaxial.

Cuando el espesor h de la capa epitaxial es menor al espesor crítico h_c , la energía elástica G^{el} es el siguiente:

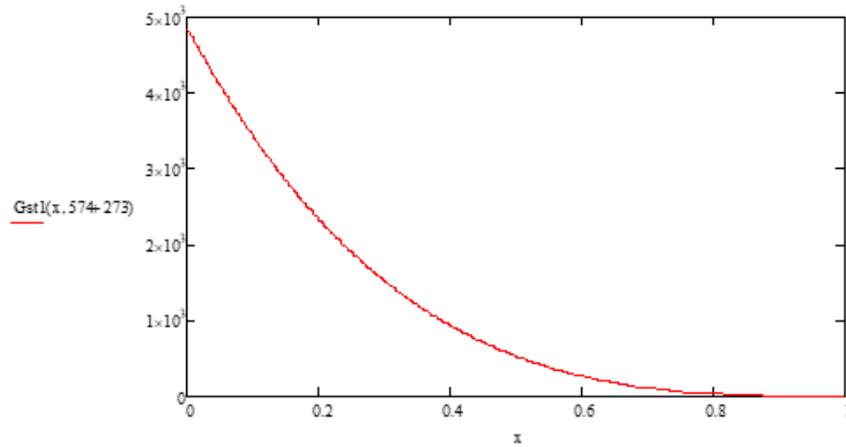


Figura 13.- Energía elástica en función de composición, donde Gst1 corresponde a G^{el} con $(h < h_c)$.

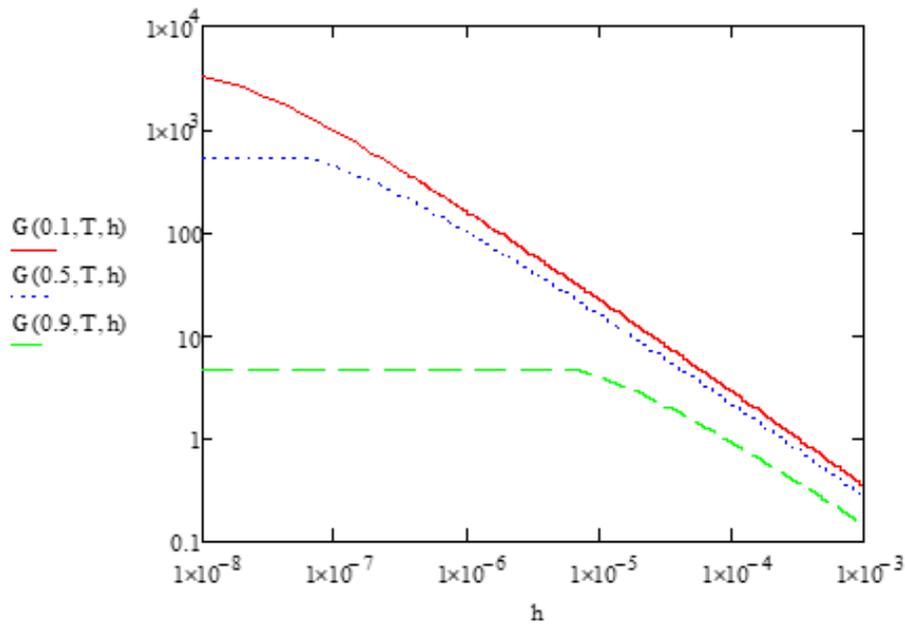


Figura 14.- Energía elástica para una composición de $\text{GaAs}_{0.1}\text{Sb}_{0.9}$ representada por la línea en color rojo, $\text{GaAs}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$ en color azul y $\text{GaAs}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ en color verde en función del espesor de la capa epitaxial, condicionado a la definición de G^{el} según a $(h < h_c)$ y $(h \geq h_c)$.

Se puede observar en la Figura 14, que el mayor estado de energía elástica es el dado con un espesor menor al espesor crítico, manteniéndose estático. También es perceptible que al aumento en la composición de GaAs e nuestra capa epitaxial del sistema ternario crecida sobre el sustrato GaAs (100) provoca una disminución de la energía elástica G^{el} ($h < h_c$).

Sin embargo, cuando el espesor de la película supera el valor crítico, se empiezan a formar dislocaciones en la capa epitaxial y relaja la tensión o compresión interna del cristal. Dando lugar a la disminución de la energía elástica $G^{el}(h \geq h_c)$ de manera más drástica.

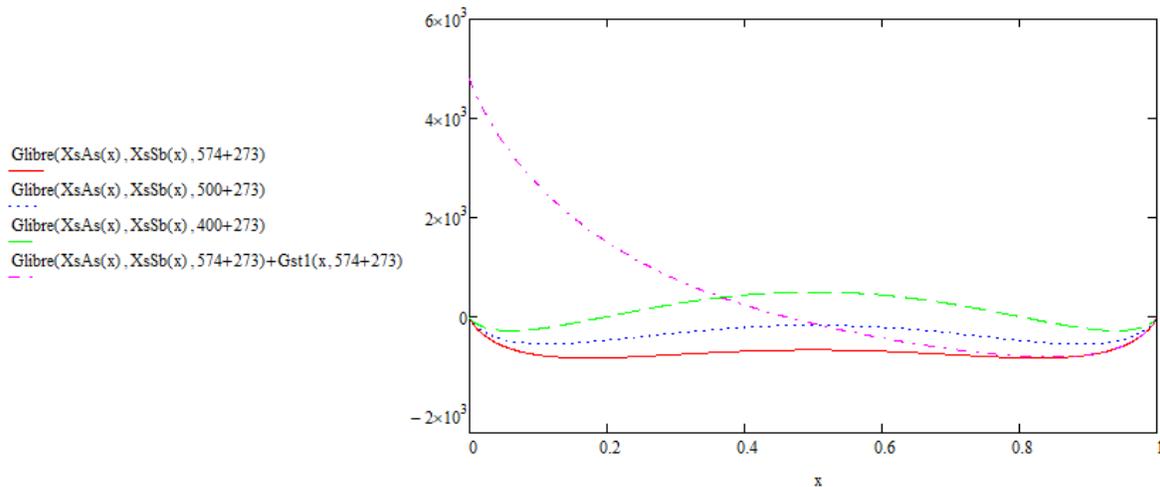


Figura 15.- Energía de Gibbs para fase sólida del sistema ternario $\text{GaAs}_x\text{Sb}_{1-x}$ en función de su composición, con temperaturas de 400 a 574°C. La línea roja, azul, y verde representan energía libre, y la línea rosa se presenta con energía elástica a 574 °C.

Se puede observar de la Figura 15, que tomando que la energía elástica por compresión aumenta rápidamente al aumentar la proporción GaSb, por lo tanto, solo tiene un mínimo donde la solución sólida es estable; mismo punto compartido con la línea roja con mayor proporción de GaAs.

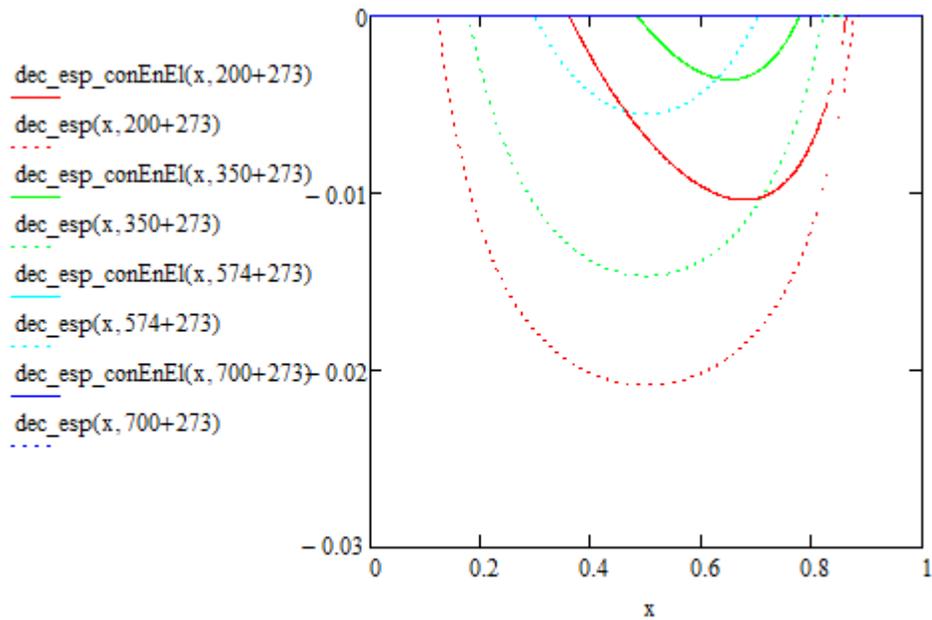


Figura 16.- Áreas de descomposición espinodal de temperaturas de 200 a 700°C, con energía libre para líneas punteadas, y líneas finas para energía elástica con espesor menor al crítico.

Es deducible de la Figura 16, que, al aumentar la temperatura, el área de descomposición espinodal disminuye. Siendo un poco menor para sistemas con energía elástica. Para temperaturas como 700°C desaparece completamente esta área para ambos casos. Mientras que para 574°C no hay área de descomposición espinodal para el modelo con energía elástica.

CAPITULO 3.- DESCRIPCIÓN DE SISTEMA EXPERIMENTAL

3.1 Equipo LPE

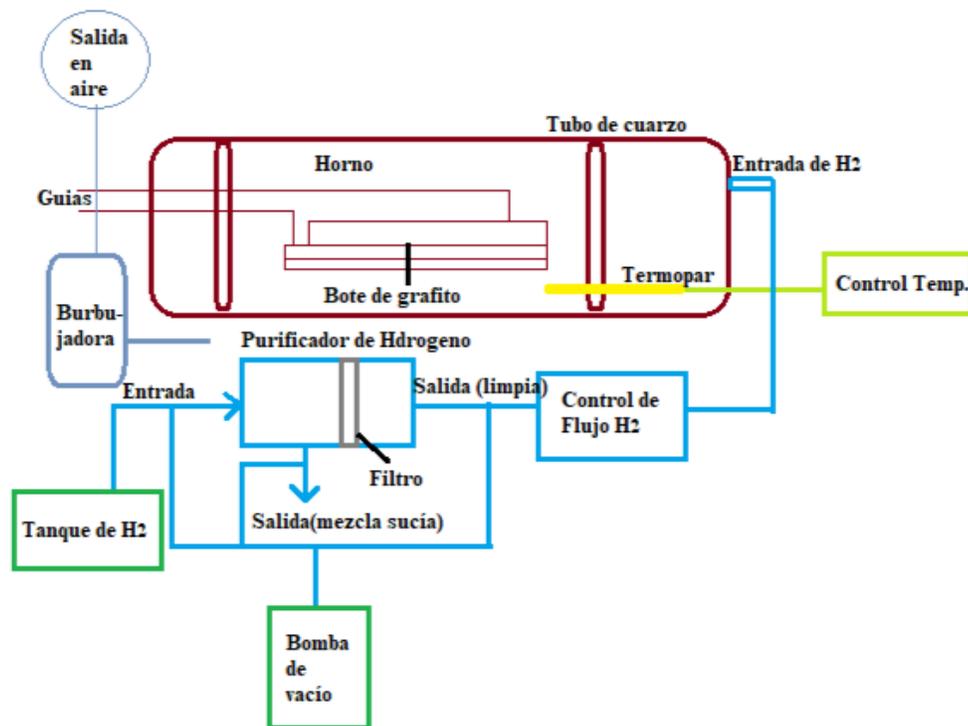


Figura 17.-Diagrama de equipo de epitaxia en fase líquida (por sus siglas en inglés- LPE).

- El ambiente de LPE de hidrógeno purificado a una presión cercana a la atmosférica. Los índices de flujo de hidrógeno más altos pueden ser útiles para mantener niveles bajos de oxígeno y vapor de agua en el sistema; sin embargo, el flujo de hidrógeno El hidrógeno evita la oxidación del bote deslizante de grafito, las masas fundidas y los sustratos.
- Los tubos de sílice fundida (a menudo denominados de manera un tanto imprecisa como "cuarzo") ofrecen un entorno limpio para el procesamiento a alta temperatura.

- El tubo de sílice fundido exterior está recubierto con una película de oro reflectante que refleja la radiación infrarroja generada por los elementos de calefacción entre el tubo exterior y el tubo interior que contiene el bote deslizante. Se debe utilizar un controlador con un tiempo de muestreo rápido para regular la temperatura. Una ventaja de un horno transparente es que el bote deslizante (y los fundidos) se pueden ver durante el funcionamiento del horno, lo que puede ser utilizado para comprobar la posición del barco y la barra deslizante, y observar el punto de fusión de las cargas de metal de los fundidos [10].
- Purificador por difusión a treves de membrana de paladio; el hidrogeno se absorbe en está esponja de paladio y se expulsa posteriormente en vacío.
- Los controladores programables basados en microprocesadores comerciales utilizados para controlar las temperaturas del horno y flujo de gases.
- El sistema LPE utiliza un horno tubular con un orificio cilíndrico en el que se inserta el tubo de sílice, en el que se sitúa el bote deslizante. Se puede lograr un enfriamiento más rápido para apagar los fundidos haciendo rodar el horno con ruedas alejándolo del bote deslizante y dirigiendo un enfriamiento ventilador en la sección expuesta del tubo del horno que contiene el bote deslizante
- Bote de grafito de tipo deslizante: Los dos componentes básicos del bote deslizante son un cuerpo del bote deslizante en el que se forman pozos para contener los fundidos y un deslizador (o barra deslizante) en el que uno o más huecos se muelen de modo que el sustrato quede al ras y se pueda mover debajo del fundido y fuera del fundido con la ayuda de una varilla de empuje de sílice fundida que se dobla en el extremo para formar un gancho que se inserta en un orificio perforado en el extremo del barra deslizante
- Para poder elevar la temperatura en el interior del sistema se utiliza una resistencia de Kanthal (la resistencia de Kanthal tiene forma de espira y alrededor de la espira circula una corriente que provoca el calentamiento de la resistencia) [17].
- Termopares tipo K es el método para medir la temperatura y proporcionan una precisión de $\pm 0,1$ °C en el rango de temperatura de 500–1100 °C. El cual se encuentra dentro del tubo de cuarzo en la zona de fundido, abajo donde se localiza el bote de grafito. Se considera que este termopar refleja la temperatura de fusión [10].

- El crecimiento de material semiconductor se debe realizar bajo una atmosfera de hidrógeno evitando que las soluciones utilizadas se oxiden, obteniendo Vacío Bomba Jet [17] .

El primer paso para realizar el crecimiento es preparar una solución saturada que será depositada en alguna de las celdas del bote de grafito. En seguida se coloca el sustrato en un pequeño nicho que se localiza sobre la regleta del bote de grafito. Una vez terminado este proceso se introduce el bote de grafito en el tubo de cuarzo y se cierra el reactor del sistema. Debido a que el reactor fue expuesto al ambiente es necesario realizar un vacío al sistema con el propósito de extraer todo el aire que se introdujo mientras estuvo abierto, para esto se realiza un primer vacío con una bomba de vacío de tipo Jet que funciona bajo el efecto de Venturi. Al realizar este proceso obtenemos vacíos por debajo de un PSI [10].

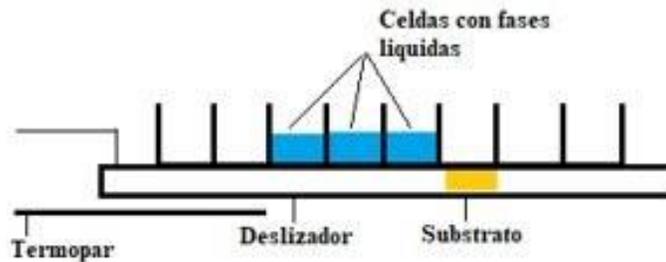


Figura 18.-Modelo de Bote de grafito.

3.2 Espectroscopía de fotoluminiscencia

La espectroscopia de fotoluminiscencia Se obtiene cuando al medio material estudiado se hace incidir luz a una longitud de onda que absorbe (excitación) y se mide la relajación por emisión de fotones de diferente energía.

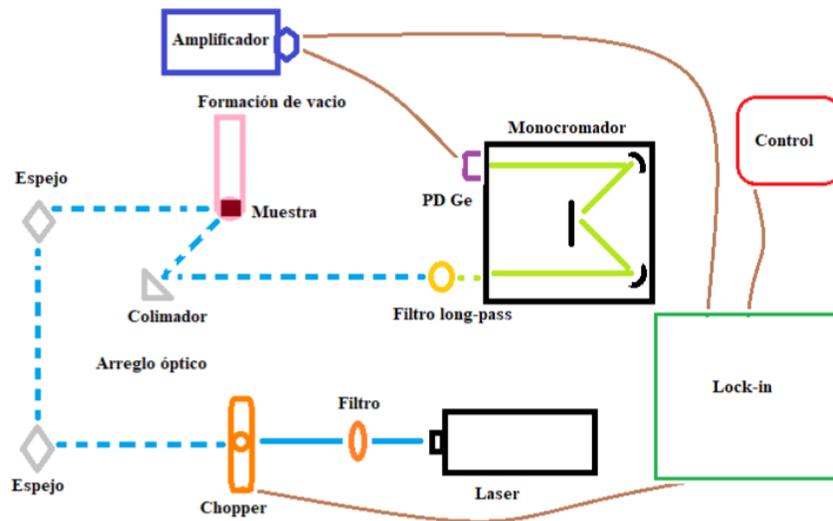


Figura 19.- Equipo de espectroscopia de fotoluminiscencia.

- **Láser:** En el laboratorio dispone de un láser de onda continua que emite luz monocromática. Se dispone de un láser azul de Gas Argón con longitud de onda de 488 nm.
- **Óptica chopper:** Un Chopper óptico es un dispositivo que interrumpe periódicamente un haz de luz, está controlado por el Lock-in, y está a una frecuencia de 44Hz.
- **Colimador:** Un colimador es un sistema que a partir de un haz (de luz, de electrones, etc.) divergente obtiene un "haz" paralelo. Sirve para homogeneizar las trayectorias o rayos que, emitidos por una fuente, salen en todas direcciones y obtiene un chorro de partículas o conjunto de rayos con las mismas propiedades. [18]

- Filtro Long pass: Los filtros de paso largo transmiten radiación electromagnética con longitudes de onda largas mientras bloquean longitudes de onda más cortas. Solo deja pasar longitudes superiores a 540nm.
- Monocromador: Un monocromador puede utilizar cualquiera de los fenómenos de refracción, por ejemplo, utilizando un prisma; o de difracción, utilizando una red de difracción; para separar espacialmente los diferentes colores de la luz. Usualmente el monocromador cuenta con un mecanismo que permite dirigir el color seleccionado hacia una ranura de salida, por donde el rayo de luz monocromático puede abandonar el dispositivo.
- Lock-in: El amplificador de bloqueo se utiliza para detectar una señal modulada (es decir, una señal que oscila a una frecuencia y fase bien definidas) que normalmente está enterrada en un gran ruido de fondo.
- Control: El sistema informático tiene como misión controlar análisis.

3.3 Difracción de Rayos X

La difracción de rayos X es una técnica muy utilizada para el análisis de la estructura cristalina de los sólidos; ya sea su geometría y constantes de red, así de esta manera la composición de dichos materiales. El intervalo de longitudes de onda de los rayos X va desde aproximadamente 10-5 Å hasta alrededor de 100 Å; sin embargo, la espectroscopía de rayos X convencional abarca la región de aproximadamente 0.1 Å a 25 Å. [19]

La interacción entre el vector eléctrico de la radiación X y los electrones de la materia por la que pasa da lugar a una dispersión de los rayos. Cuando los rayos X son dispersados por el entorno ordenado de un cristal, tienen lugar interferencias (tanto constructivas como destructivas) entre los rayos dispersados, ya que las distancias entre los centros de dispersión son del mismo orden de magnitud que la longitud de onda de la radiación. El resultado es la difracción. [19]

El equipo utilizado fue el difractómetro de rayos X marca Philips mostrado en la Figura 20.



Figura 20.- Difractómetro de rayos X marca Philips.

Determinación de parámetro de red y composición por difracción de rayos X

Cuando un rayo X alcanza la superficie de un cristal a cualquier ángulo θ , una porción es dispersada por la capa de átomos de la superficie. La porción no dispersada penetra en la segunda capa de átomos donde otra vez una fracción es dispersada y la que queda pasa a la tercera capa (Figura 21). El efecto acumulativo de esta dispersión desde los centros regularmente espaciados del cristal es la difracción del haz. [20]

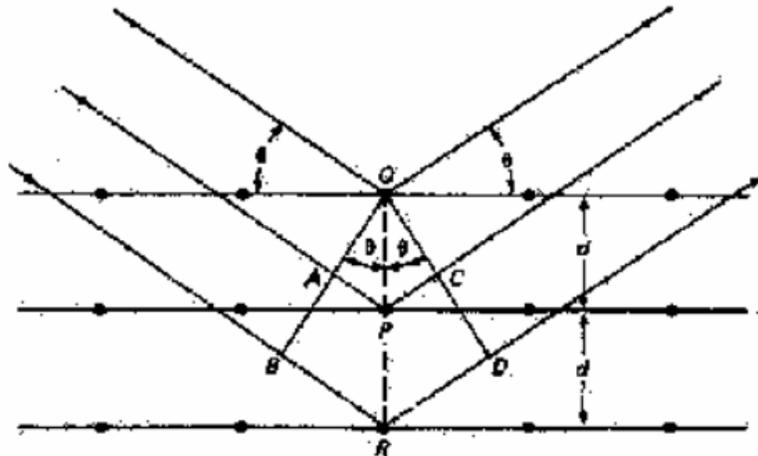


Figura 21.- Difracción de rayos X por un cristal. [20]

La Figura 21 ilustra la ley de Bragg, deducida por W.L. Bragg en 1912 cuando estudiaba la difracción de rayos X por cristales. Un haz estrecho de radiación choca con la superficie del cristal con un ángulo de incidencia θ , y la dispersión tiene lugar como consecuencia de la

interacción de la radiación con los átomos localizados en O, P y R. Si se cumple que la distancia $AP + PC = n\lambda$, donde n es un entero, la radiación dispersada estará en fase en OCD y el cristal parecerá reflejar la radiación X. [20]

Se puede observar también que $AP = PC = d \sin\theta$, donde d es la distancia interplanar del cristal. Así pues, las condiciones para una interferencia constructiva del haz con ángulo θ son las que cumplen la ecuación de Bragg:

$$n\lambda = 2d \text{ Sen}\theta \quad (66)$$

Es necesaria una relación general que prediga el ángulo de difracción para cualquier conjunto de planos; esta relación se obtiene combinando la Ley de Bragg y la ecuación para el espaciado aplicable al cristal particular de que se trate. [20]. Por ejemplo, para el sistema cúbico:

$$1/\lambda^2 = (h^2 + k^2 + l^2)/a^2 \quad (67)$$

Para un cristal cubico, sabemos que el espaciado interplanar está dado por:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}} \quad (68)$$

Las mediciones se realizaron en los planos (004) con el fin de medir el desacople de red perpendicular a la superficie. El cálculo del parámetro de red para el caso sin estrés y con estrés. Así como de la composición de las capas epitaxiales se calculó con las siguientes fórmulas [21]:

$$\alpha_{ce} = \alpha_{GaAs}(1 + \Delta) \quad \alpha_{ce} = \alpha_{GaAs} - \frac{c_{11}}{c_{11}+c_{12}}(\alpha_{GaAs} - \alpha_{\perp}) \quad (69)$$

$$x_{cc} = \frac{\alpha_{ce} - \alpha_{GaSb}}{\alpha_{GaAs} - \alpha_{GaSb}} \quad (70)$$

CAPITULO 4.-PROCEDIMIENTO

4.1 Crecimiento de capas epitaxiales GaAsSb/GaAs

Estimar concentraciones de fase líquida Ga-As-Sb con los cálculos utilizando el método CALPHAD

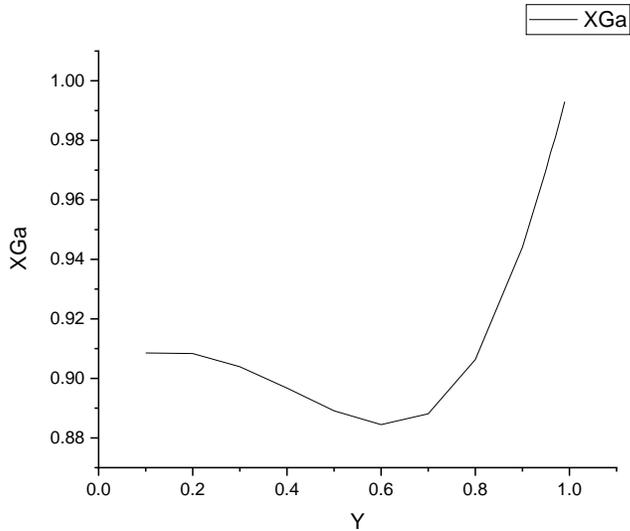


Figura 22.-Fracción molar de fase solida en función de concentración de fase líquida de Ga.

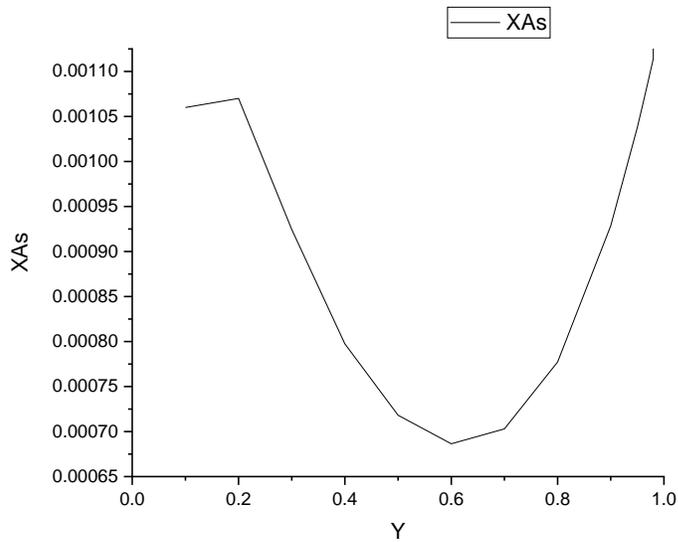


Figura 23.- Fracción molar de fase solida en función de concentración de fase líquida de As.

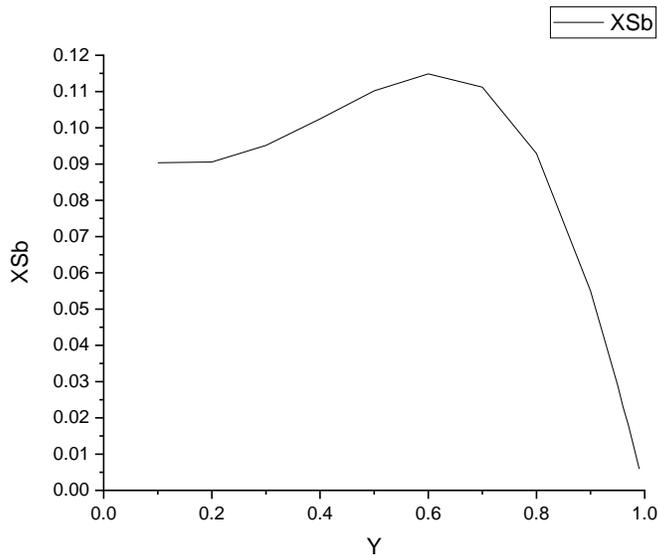


Figura 24.-Fracción molar de fase solida en función de concentración de fase líquida de Sb.

A continuación, se muestran las composiciones de la fase líquida para crecer la capa epitaxial GaAs_xSb_{1-x} con composiciones definidas x=0.95, 0.96... 0.99.

x, fracción molar de GaAs en la fase sólida	Concentración Fase líquida, Ga	Concentración Fase líquida, As	Concentración Fase líquida, Sb
0.95	0.97	1.038*10 ⁻³	2.9*10 ⁻²
0.96	0.976	1.063*10 ⁻³	2.3*10 ⁻²
0.97	0.981	1.088*10 ⁻³	1.8*10 ⁻²
0.98	0.987	1.114*10 ⁻³	1.2*10 ⁻²
0.99	0.993	1.14*10 ⁻³	0.5911*10 ⁻²

Tabla 4. – concentraciones estimadas de fase líquida y fase sólida

Utilizando las fórmulas de concentración:

$$X_{Ga} = \frac{\left(\frac{m_{Ga}}{M_{Ga}}\right) + \left(\frac{m_{GaAs}}{M_{GaAs}}\right)}{2 \cdot \left(\frac{m_{GaAs}}{M_{GaAs}}\right) + \left(\frac{m_{Ga}}{M_{Ga}}\right) + \left(\frac{m_{Sb}}{M_{Sb}}\right)} \quad (71)$$

$$XSb = \frac{\left(\frac{mSb}{MSb}\right)}{2 \cdot \left(\frac{mGaAs}{MGaAs}\right) + \left(\frac{mGa}{MGa}\right) + \left(\frac{mSb}{MSb}\right)} \quad (72)$$

$$XAs = \frac{\left(\frac{mGaAs}{MGaAs}\right)}{2 \cdot \left(\frac{mGaAs}{MGaAs}\right) + \left(\frac{mGa}{MGa}\right) + \left(\frac{mSb}{MSb}\right)} \quad (73)$$

Calculamos cantidades de materiales para formar fase líquida. Tomando valores de masas atómicas de elementos $MGa=69.72$ g/mol, $MGaAs=144.64$ g/mol, $MA=74.92$ g/mol, $MSb=121.76$ g/mol, encontramos las masas de los componentes de la fase líquida mAs , mSb , mGa .

x, fracción molar de GaAs en la fase sólida	mGa (mg)	mSb (mg)	mGaAs (mg)
0.95	2500	130.67	5.556
0.96	2500	103.003	5.655
0.97	2500	80.203	5.759
0.98	2500	53.146	5.861
0.99	2500	26.02	5.961

Tabla 5.- Masas estimadas para crecimiento.

En la Tabla 6 podemos observar las masas de nuestras componentes utilizadas para los crecimientos.

Muestra	mGa (mg)	mSb (mg)	mGaAs(mg)
	Experimental	Experimental	Experimental
FR-3	2584	48	4.1
FR-4	2515	86.1	9.4
FR-5	2575.8	134.1	2
FR-6	2589.1	203.5	5

Tabla 6.- Masas de elementos utilizados en crecimientos GaAsSb/GaAs.

Es evidente poder observar que la masa de GaAs y Sb no es precisa. No pudimos medir correctamente el cambio de masa del sustrato de saturación por punto de fusión de estos compuestos (parte de la fase líquida quedaba pegada al sustrato de saturación).

4.2 REGIMENES DE CRECIMIENTO

Se utiliza una fuente de GaAs (100) (sin dopar) para incorporar el arsénico, ya que esta es la forma más segura, debido que es venenoso y de carácter volátil. Por lo tanto, se introduce esté sustrato de GaAs para que sature la fase líquida a la temperatura de equilibrio programada.

Este mismo se limpió con acetona caliente, se enjuago con agua desionizada y posteriormente se secó con nitrógeno. Por consiguiente, para conocer la cantidad de As en nuestra solución se pesa el sustrato antes y después de saturar.

La Figura 25 muestra el proceso saturación de fase líquida:

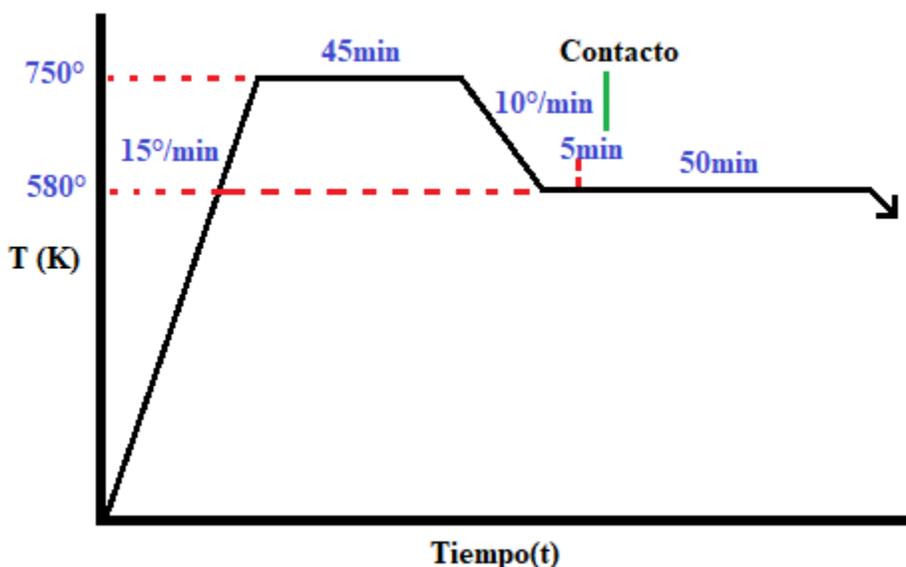


Figura 25.- Diagrama de saturación de fase líquida.

Para esto se colocó la fase líquida y el sustrato en el equipo LPE, esperamos 25 min con un flujo de 15 para la homogenización del hidrogeno purificado.

En 350 ° se cambió el flujo 8. Subimos a 750° para eliminar el óxido de la fase líquida e impurezas. Y en 580° esperamos 5 min para estabilizar la temperatura y hacer contacto posteriormente. Al finalizar separamos la fase líquida del sustrato y esperamos el enfriamiento del equipo.

- Se empleó un sustrato GaAs (100) (sin dopar) para el crecimiento, y su preparación consistió en un desengrasado:
 1. En tricloroetileno en ebullición por 10 min.
 2. En metanol en baño ultrasónico por 5 min.
 3. Secado con nitrógeno.
 4. En metanol en baño ultrasónico por 5 min.
 5. Enjuagar con agua desionizada.
 6. Secado con nitrógeno.

- Después se realizó un pulido por ataque químico:
 1. Calentar solución $\text{H}_2\text{SO}_4:\text{H}_2\text{O}_2:\text{H}_2\text{O}$ (3:1:1) alrededor del punto de ebullición.
 2. Someter sustrato a ataque químico por 3 min.
 3. Secar con nitrógeno.

Finalmente se colocó el sustrato y la fase líquida en el equipo LPE. A continuación en la Figura 26 se muestra el proceso de crecimiento:

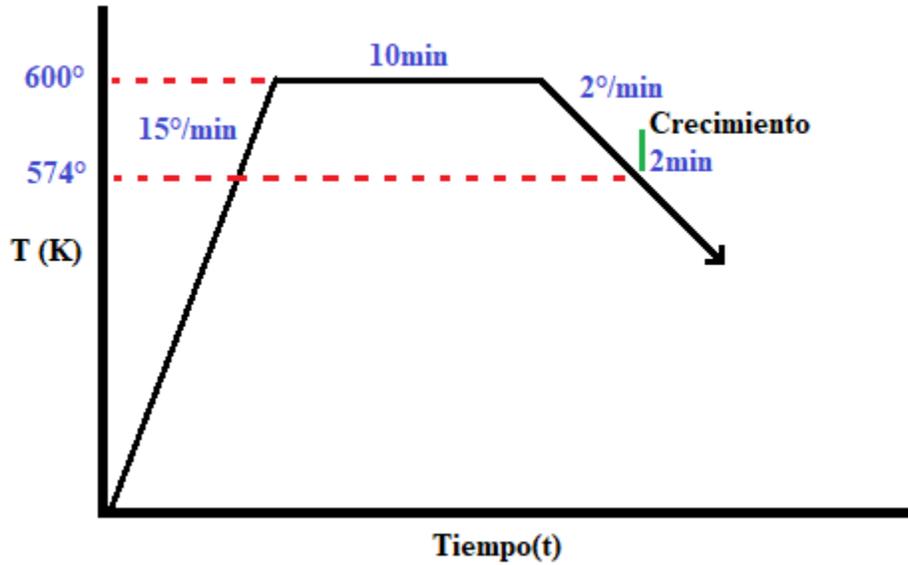


Figura 26.-Diagrama de crecimiento epitaxial GaAsSb.

Este proceso se repitió de la misma manera en las cuatro muestras presentadas, claramente con diferentes composiciones como fue planteado en la Tabla 6.

CAPITULO 5.-Caracterización de las muestras GaAsSb/GaAs

5.1 Resultados de rayos X y composiciones a base de estas mediciones

La medición por difracción de rayos X se llevó a cabo con una longitud de onda de 1.5405\AA . El equipo nos muestra el ángulo de difracción θ como 2θ debido a la simetría del sistema.

FR-3



Figura 27.- Espectro de difracción de rayos X de la muestra FR-3.

En la Figura 27 podemos observar que para la muestra FR-3, un desacople de 3.148×10^{-3} . Utilizando las ecs. 69 y 70. Parámetro de red sin estrés de $a=5.671 \text{ \AA}$, para con estrés de $a=5.665 \text{ \AA}$. Fracción molar GaAs sin compresión 0.96 y con compresión 0.973.

FR-4

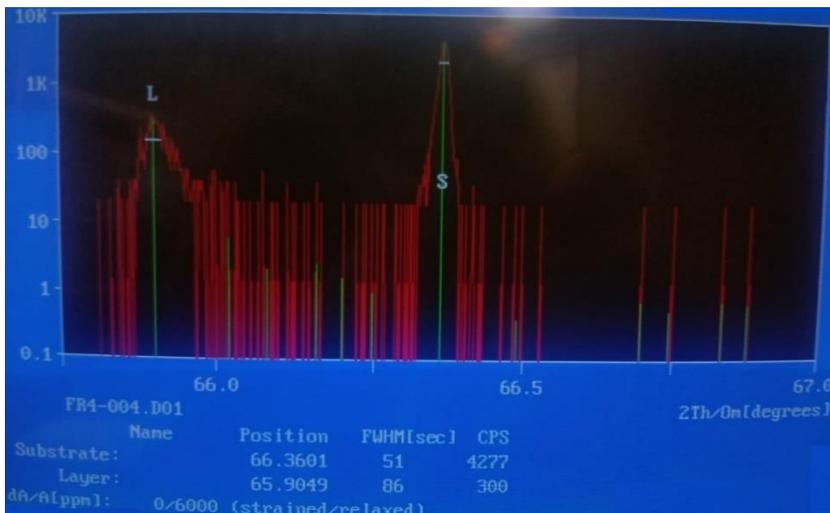


Figura 28.- Espectro de difracción de rayos X de la muestra FR-4.

De la misma manera en la Figura 28, la muestra FR-4; tenemos un desacople de 6×10^{-3} . Parámetro de red sin estrés de $a=5.687 \text{ \AA}$, y para con estrés $a=5.676 \text{ \AA}$. Fracción molar GaAs sin compresión 0.923 y con compresión 0.948.

FR-5

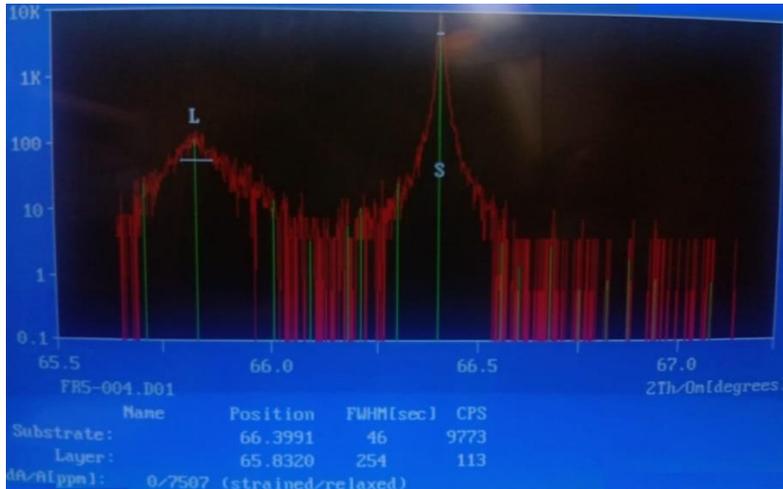


Figura 29.- Espectro de difracción de rayos X de la muestra FR-5.

Para la Figura 29, la muestra FR-5; el desacople es de 7.507×10^{-3} . Parámetro de red sin estrés de $a=5.696 \text{ \AA}$, y con estrés de $a=5.682 \text{ \AA}$. Fracción molar de GaAs sin compresión 0.904 y con compresión 0.934.

FR-6

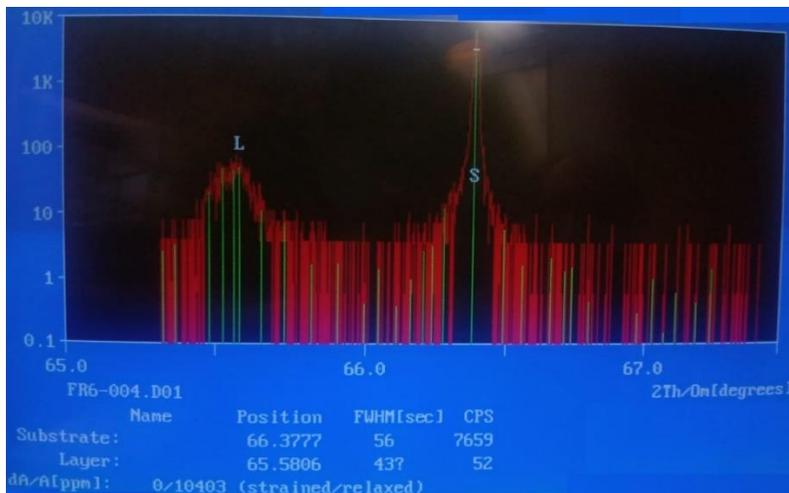


Figura 30.- Espectro de difracción de rayos X de la muestra FR-6.

Para la Figura 30, la muestra FR-6 tiene un desacople de 1.0403×10^{-2} . Parámetro de red sin estrés de 5.712 \AA , y para con estrés $a = 5.693 \text{ \AA}$. Fracción molar de GaAs sin compresión 0.867 y con compresión 0.909.

Muestra	x, fracción molar de GaAs en la fase sólida (sin compresión)	x, fracción molar de GaAs en la fase sólida (con compresión)
FR-3	0.960	0.973
FR-4	0.923	0.948
FR-5	0.904	0.934
FR-6	0.867	0.909

Tabla 7.- Fracción molar fase solida GaAs sin y con compresión.

5.2 Mediciones Fotoluminiscencia

La medición de los espectros de fotoluminiscencia se llevó a cabo a baja temperaturas (15 K), ya sea con potencias de 10 mW, 30 mW y 50mW; cada muestra comparada con el espectro de una muestra crecida de GaAs/GaAs.

FR-3

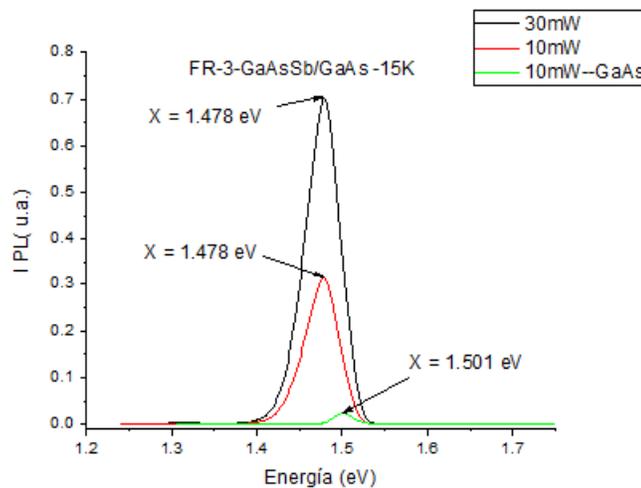


Figura 31.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-3-GaAsSb/GaAs con potencias de 30 mW, 10 mW representados con color negro y rojo respectivamente, y un buffer de GaAs/GaAs de color verde a 10 mW.

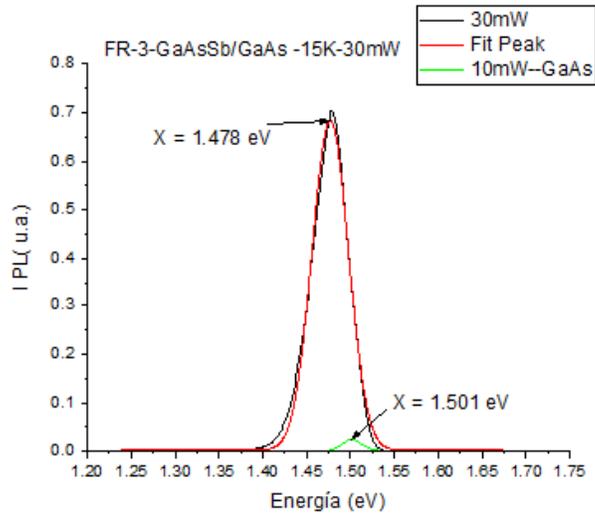


Figura 32.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-3-GaAsSb/GaAs con potencias de 30 mW representado con color negro con un ajuste de gaussianas de color rojo, y un buffer de GaAs/GaAs de color verde a 10 mW.

El pico del espectro correspondiente de FR-3 a 30 mW y 10 mW se ubica según el ajuste de la gaussiana en 1.478 eV (rojo) como correspondiente de GaAsSb/GaAs, mientras que el pico de la muestra de GaAs/GaAs a 10 mW en 1.501 eV (Verde).

FR-4

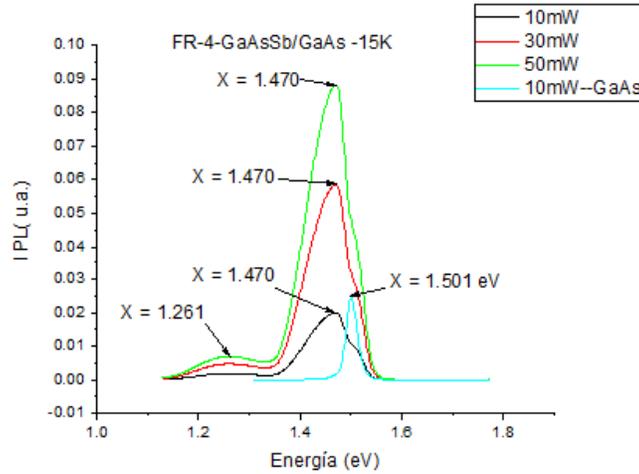


Figura 33.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-4-GaAsSb/GaAs con potencias de 50mW, 30 mW, 10 mW representados con color verde, rojo y negro respectivamente, y una muestra de GaAs/GaAs de color azul a 10 mW.

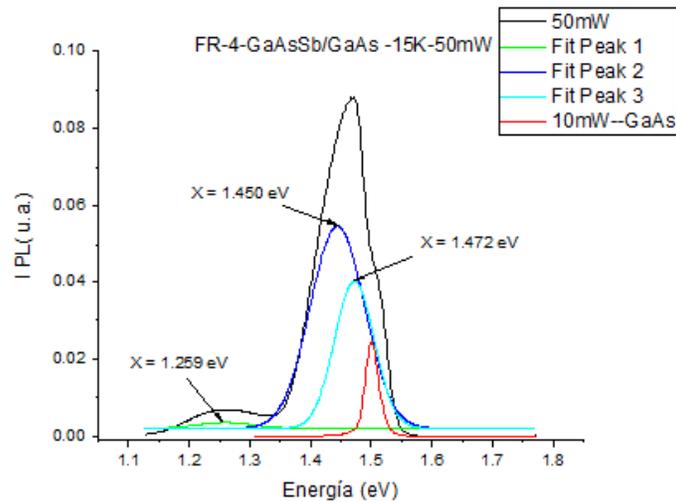


Figura 34.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-4-GaAsSb/GaAs con potencias de 50 mW representado con color negro con un ajuste de gaussianas de color verde, azul oscuro y azul claro, además un buffer de GaAs/GaAs de color rojo a 10 mW.

Para la muestra FR-4 presenta 3 picos superpuestos ubicados dada la gaussiana; el primero en 1.259 eV(verde), segundo en 1.450 eV (correspondiente a GaAsSb-Azul oscuro), y el tercero 1.472 eV (referente a emisión de GaAs-Azul claro), además el pico de la muestra de GaAs/GaAs a 10 mW en 1.501 eV (Rojo).

FR-5

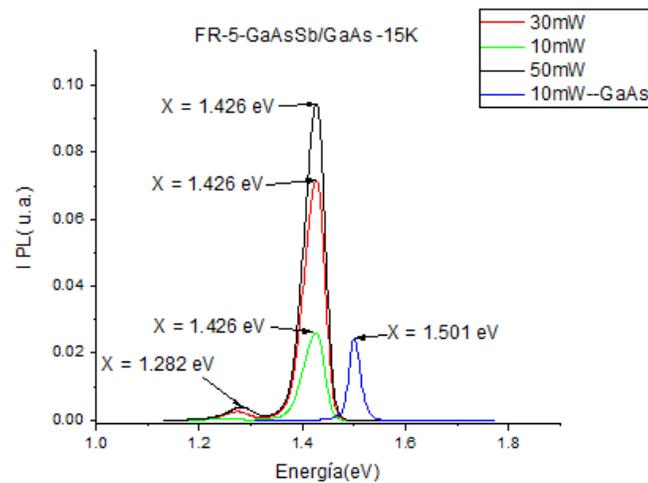


Figura 35.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-5-GaAsSb/GaAs con potencias de 50mW, 30 mW, 10 mW representados con color negro, rojo y verde respectivamente, y un buffer de GaAs/GaAs de color azul a 10 mW.

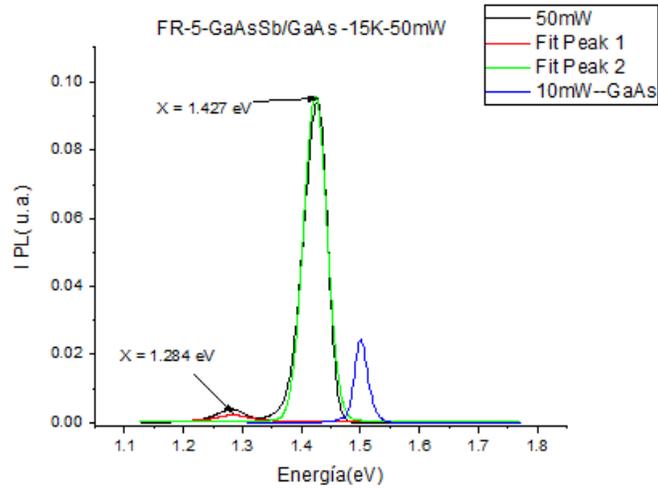


Figura 36.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-5-GaAsSb/GaAs con potencias de 50 mW representado con color negro con un ajuste de gaussianas de color rojo y verde, además un buffer de GaAs/GaAs de color azul a 10 mW.

Para la muestra FR-5 se presentan 2 picos, ubicados dada la gaussiana; el primero en 1.284 eV (rojo), segundo en 1.427 eV (correspondiente a GaAsSb-Verde), además el pico de la muestra de GaAs/GaAs a 10 mW en 1.501 eV (azul oscuro).

FR-6

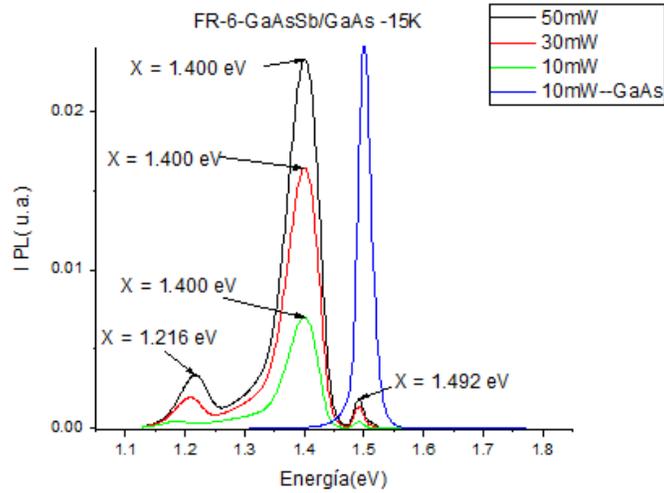


Figura 37.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-6-GaAsSb/GaAs con potencias de 50mW, 30 mW, 10 mW representados con color negro, rojo y verde respectivamente, y un buffer de GaAs/GaAs de color azul a 10 mW.

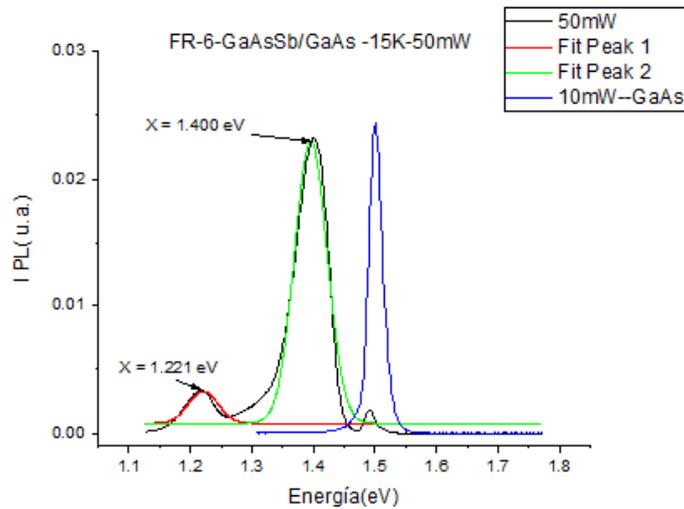


Figura 38.- Medición de espectro de fotoluminiscencia a 15 K de FR-6-GaAsSb/GaAs con potencias de 50 mW representado con color negro con un ajuste de gaussianas de color rojo y verde, además un buffer de GaAs/GaAs de color azul a 10 mW.

Para la muestra FR-6 presenta 3 picos superpuestos ubicados dada la gaussiana; el primero en 1.221 eV (rojo), segundo en 1.400 eV (correspondiente a GaAsSb-Verde), y el tercero 1.47216±0.00294 eV (referente a emisión de GaAs), además el pico de la muestra de GaAs/GaAs a 10 mW en 1.501 eV (azul oscuro)

Aunado a lo dicho anteriormente, de la muestra FR-3 nos enfocamos en el pico de mayor intensidad, 1.476 eV, para FR-4 tenemos 1.450 eV, en FR-5 es 1.427 eV, y finalmente para FR-6, 1.400 eV. Calculamos las energías de transición correspondientes a estos picos, y obtenemos los siguientes datos.

	FR-3	FR-4	FR-5	FR-6
E _{max} (eV)	1.476	1.450	1.427	1.400
B _{an} Gap(eV)	1.463	1.449	1.426	1.399

Tabla 8.- Energías máximas de picos de fotoluminiscencia (E_{max}) GaAsSb y sus bandas de transición.

Dado a la banda de transición del compuesto ternario presentada en la Figura 7, podemos determinar la composición correspondiente a los picos máximos medidos por PL.

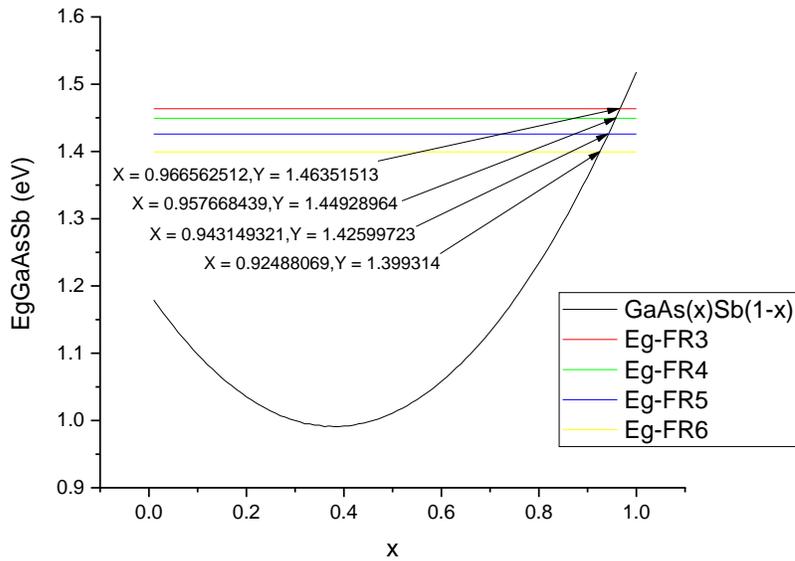


Figura 39.- Bandas de energía de compuesto ternario $\text{GaAs}_{(x)}\text{Sb}_{(1-x)}$ con compresión en función de la composición (línea negra), energía de transición de pico energía máxima de FR-3 (línea roja), FR-4 (línea verde), FR- 5 (línea azul), FR-6 (línea amarilla).

Se puede observar de la Figura 39 que, para los picos analizados anteriormente, tenemos para FR-3 una composición de $\text{GaAs}_{(0.966)}\text{Sb}_{(0.03)}$, para FR-4 $\text{GaAs}_{(0.958)}\text{Sb}_{(0.04)}$, para FR- 5 $\text{GaAs}_{(0.943)}\text{Sb}_{(0.06)}$, para FR-6 $\text{GaAs}_{(0.925)}\text{Sb}_{(0.08)}$.

La Figura 40, para un modelo sin compresión.

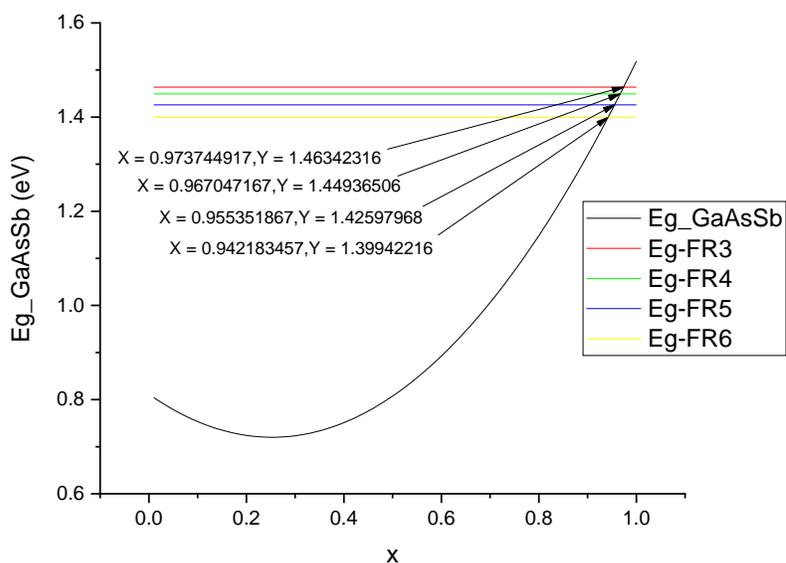


Figura 40.- Bandas de energía de compuesto ternario $\text{GaAs}_{(x)}\text{Sb}_{(1-x)}$ sin compresión en función de la composición (línea negra), energía de transición de pico energía máxima de FR-3 (línea roja), FR-4 (línea verde), FR-5 (línea azul), FR-6 (línea amarilla).

Dado la Figura 40, tenemos para la muestra FR-3 una composición de $\text{GaAs}_{(0.974)}\text{Sb}_{(0.03)}$, para FR-4 $\text{GaAs}_{(0.967)}\text{Sb}_{(0.04)}$, para FR-5 $\text{GaAs}_{(0.955)}\text{Sb}_{(0.05)}$, para FR-6 $\text{GaAs}_{(0.942)}\text{Sb}_{(0.06)}$.

Comparación de composiciones obtenidas con Rayos-X y Fotoluminiscencia

Muestra	Rayos x (sin compresión)	Rayos x (con compresión)	Fotoluminiscencia (modelo con compresión)	Fotoluminiscencia (modelo sin compresión)
FR-3	0.960	0.973	0.966	0.974
FR-4	0.923	0.948	0.958	0.967
FR-5	0.904	0.934	0.943	0.955
FR-6	0.867	0.909	0.925	0.942

Tabla 9.-Comparación de valores obtenidos Fracción molar de GaAs en fase solida por rayos X, fotoluminiscencia con y sin compresión.

5.3 Perfilometría

FR-3

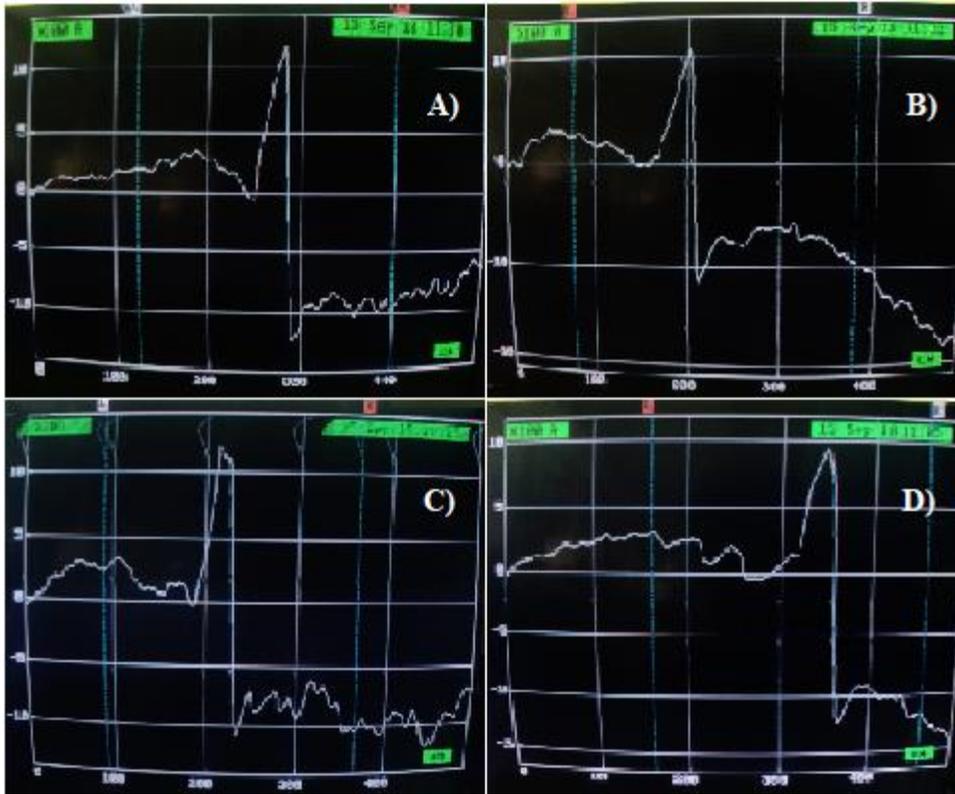


Figura 41.-Medición por perfilómetro de muestra FR-3 de GaAsSb/GaAs en zonas distintas representadas de A)-D).

En la Figura 41 para A) hay una altura de la capa epitaxial de 117.4 nm, para zona B) 121.2 nm, para C) 128.3nm y finalmente para D) 144.9 nm. Esto nos da una media de 127.9 nm.

FR-4

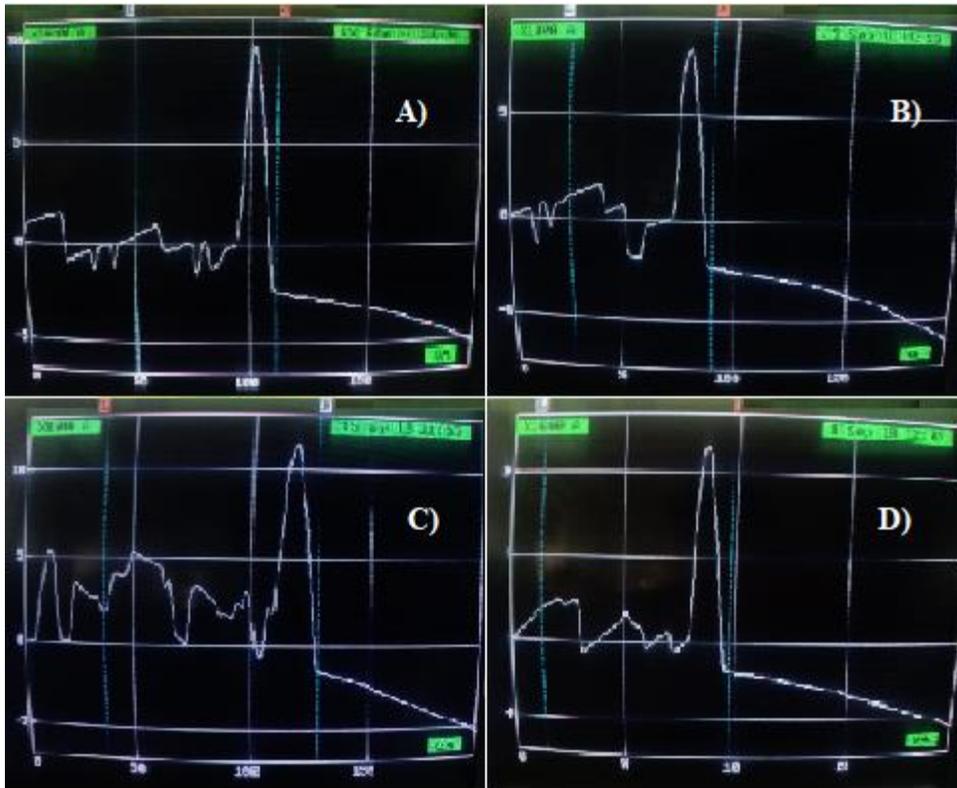


Figura 42.-Medición por perfilómetro de muestra FR-4 de GaAsSb/GaAs en zonas distintas representadas de A)-D).

En la Figura 42 para A) hay una altura de la capa epitaxial de 278.6 nm, para zona B) 330.2 nm, para C) 331.8 nm y finalmente para D) 356.9 nm. Esto nos da una media de 324.4 nm.

FR-5

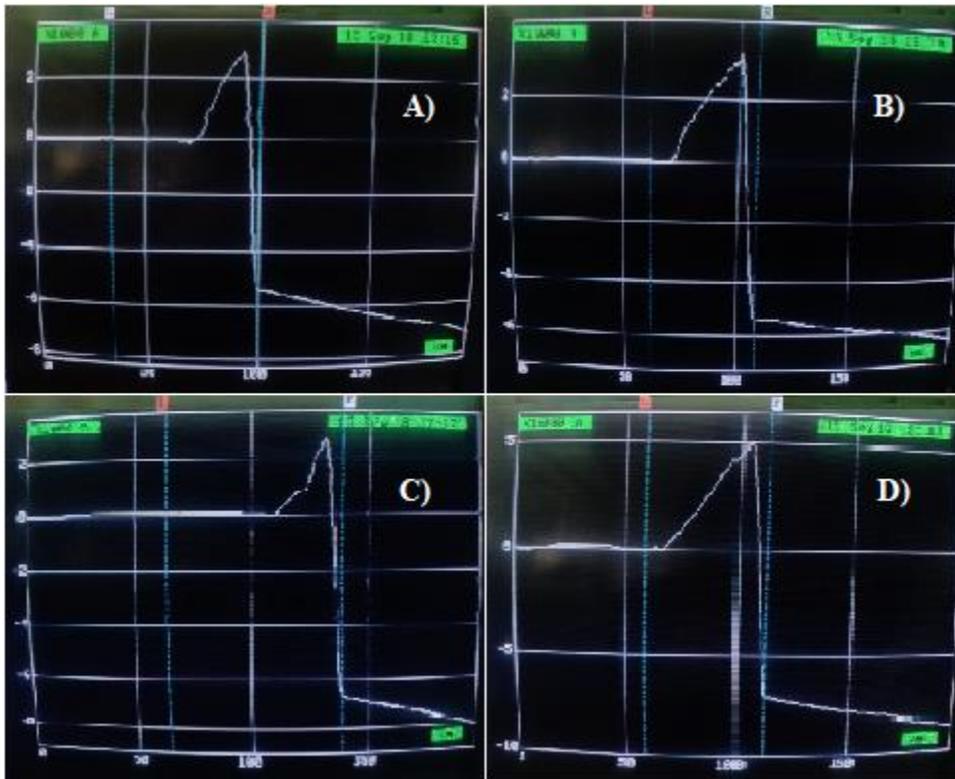


Figura 43.-Medición por perfilómetro de muestra FR- 5 de GaAsSb/GaAs en zonas distintas representadas de A)-D).

En la Figura 43 para A) hay una altura de la capa epitaxial de 540.2 nm, para zona B) 543 nm, para C) 658.6 nm y finalmente para D) 691.1 nm. Esto nos da una media de 608.2 nm.

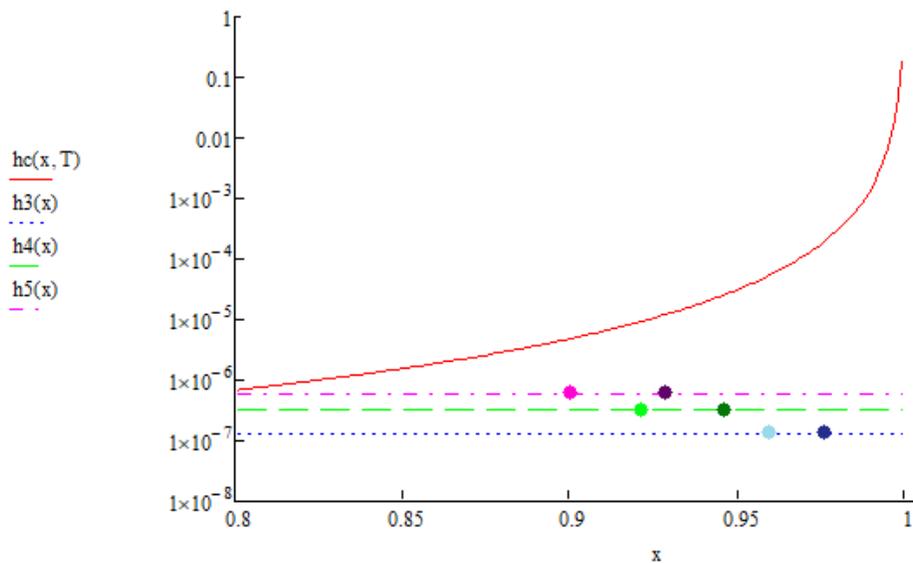


Figura 44.- Grafica de espesor crítico en función de composición (línea roja), los puntos representan el espesor obtenido de perfilometría para las muestras FR-3, FR-4 Y FR-5 con color azul oscuro, verde oscuro y rosa oscuro, respectivamente para composición de rayos x sin compresión, Y colores claros del mismo orden para composición de rayos x con compresión.

Es claro que, sin importar las diferentes composiciones obtenidas por los métodos utilizados de caracterización, de ninguna manera nuestras muestras van a superar el espesor crítico determinado.

Conclusiones

Crecimos capas epitaxiales de GaAsSb con bajas concentraciones de Sb por LPE, con temperatura de líquidos $T_L=580\text{ }^\circ\text{C}$, con $6\text{ }^\circ\text{C}$ de sobresaturación.

Las muestras obtenidas fueron caracterizadas con Rayos X; para FR-3 obtuvimos una composición de GaAs de 0.96, para FR-4 fue de 0.923, para FR-5 de 0.904 y para FR-6 de 0.867 sin compresión, para Rayos X con compresión obtuvimos para FR-3 una fracción molar de GaAs de 0.973, para FR-4 de 0.948. FR-5 de 0.934, y para FR-6 de 0.909. Para PL con compresión FR-3 de 0.966, FR-4 de 0.958, FR-5 de 0.943 y FR-6 de 0.925. Para PL sin compresión FR-3 de 0.974, FR-4 de 0.967, FR-5 de 0.955 y para FR-6 de 0.942

La más grande concentración de GaSb fue de 13.3%.

Los espesores obtenidos por el perfilómetro fueron para FR-3 de 127.9 nm, para FR-4 de 324.4 nm, y para FR-5 de 608.2 nm. Por lo tanto, a más altas concentraciones de Sb más grande el espesor de nuestra capa epitaxial. Sin embargo, ninguna muestra supero el espesor crítico, y claramente utilizamos la definición de energía elástica para espesores menores al espesor crítico.

Hicimos análisis de área de descomposición espinodal en capas epitaxiales de GaAsSb sin tomar en cuenta la energía elástica y también considerándola. Según este análisis, área de descomposición espinodal desaparece para soluciones de GaAsSb con energía elástica a la temperatura de liquidus, pero para energía libre permanece.

Principal límite para alcanzar capas epitaxiales con más altas concentraciones de Sb es la miscibilidad de la fase líquida.

Referencias

- [1] R. Ana y G. d. Ruiz, «Revista Española de Física,» 2010. [En línea]. Available: <http://revistadefisica.es/index.php/ref/article/view/1016>.
- [2] Z. W. X. F. J. T. D. F. D. W. X. C. J. L. X. M. X. W. a. R. C. X. Gao, «Effect of rapid thermal annealing on the optical properties of GaAsSb alloys,» *Opt. Mater. Express*, vol. 7, pp. 1971-1979, 2017.
- [3] M. M. K. K. S. G. K. K. ., P. G. A. V. Donchev, «Low-temperature LPE growth and characterization of GaAsSb layers for photovoltaic applications,» *Journal of Crystal Growth*, vol. 574, nº 126335, 2021.
- [4] A.V.Mishurnyi y L.M.Alfonso, «LÁSERES SEMICONDUCTORES,» San Luis Potosí, Universitaria Potosina, 2009, pp. 50-51.
- [5] L.A.Quetzalcoatl, «Biblioteca virtual,» Octubre 2006. [En línea]. Available: http://bibliotecavirtual.dgb.umich.mx:8083/xmlui/bitstream/handle/DGB_UMICH/5072/IIMM-M-2006-0023.pdf?sequence=1&isAllowed=y.
- [6] C.R.Adriana, «En 1967 Varshni propuso un modelo empírico para describir la dependencia de la temperatura de la energía de gap,» Ciudad de México, 2007.
- [7] I. Vurgaftman, R. Meyer y R. Ram-Mohan, «Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys,» *AIP-JOURNAL OF APPLIED PHYSICS*, p. 5823;5829;5843, 2001.
- [8] S. L. CHUANG, «physics of Optoelectronic Devices,» Wiley-Interscience, 1995.

- [9] C.A.K.Axxel, «Estudio de crecimiento de capas epitaxiales de baja dimensión por LPE en el Sistema GaAsSb/GaAs,» San Luis Potosí, 2016.
- [10] C.Peter y M.Michael, Liquid Phase Epitaxy of Electronic, Optical and Optoelectronic Materials, WILEY, 2007.
- [11] W. Z. C. L. & Z. D. J. -B. Li, «Springer Link,» Octubre 1998. [En línea]. Available: <https://link.springer.com/article/10.1361/105497198770341950?noAccess=true>.
- [12] W. Z. C. L. a. Z. D. J.-B. Li, «A Thermodynamic Assessment of the Ga-As-Sb System,» Beijing , 1997.
- [13] A. T. Dinsdale, «SGTE DATA FOR PURE ELEMENTS,» Division of Materials Metrology, National Physical Laboratory.Teddington, Middlesex, 1991.
- [14] C. J. W, «Acta Metall,» vol. 10, nº 179, 1962.
- [15] K. K. a. K. I. H. Ohtani, «Thermodynamic Study of Phase Equilibria in Strained III-V Alloy Semiconductors,» 2000.
- [16] Y. T. S. H. a. O. M, «Appl. Phys.,» vol. 52 , nº 1678, 1988.
- [17] F. S. Niño, «Automatización de Experimentos Relacionados con la Epitaxia en,» 2016.
- [18] C. d. Wikipedia, «Wikipedia,» 2019 Agosto 31. [En línea]. Available: <https://es.wikipedia.org/w/index.php?title=Colimador&oldid=118787280>. [Último acceso: 15 Agosto 2022].
- [19] B. D. Cullity, de *Elements of X-ray Diffraction*, Pearson, 1978.
- [20] V. G. Yagües, «RUA,» Repositorio Institucional de la Universidad de Alicante, 2008. [En línea]. Available: <https://rua.ua.es/dspace/bitstream/10045/8250/4/T6rayosX.pdf>. [Último acceso: 2022].
- [21] M. D. P. R. Torres, «INVESTIGACIÓN DEL EFECTO DE COMPOSITION PULLING EN EL SISTEMA InGaP/GaAs(100) CRECIDO POR LPE.,» vol. 1, nº 8, p. 39, 2007.
- [22] C. A. K. M. V. A. D. A. F. a. Y. G. A. Castillo E G, «IOPscience,» 2017. [En línea]. Available: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/792/1/012011>. [Último acceso: 14 03 2022].
- [23] A. I. C. C. L. H. L. N. T. O. H. I. K. H. M. S. B. Argent, «CALPHAD,» vol. 18 , nº 177, 1994.