

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SINALOA
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO-MATEMÁTICAS
MAESTRIA EN FISICA



**CARACTERIZACIÓN ÓPTICA DE GaN/Si (111) EN FASE
HEXAGONAL POR MEDIO DE FOTORREFLECTANCIA**

TESIS

QUE COMO REQUISITO PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN FÍSICA

PRESENTA:

JESÚS ADRIAN CANO SALAZAR

DIRECTORES DE TESIS

DR. MÁXIMO LÓPEZ LÓPEZ

DR. CRISTO MANUEL YEE RENDÓN

Culiacán de Rosales, Sinaloa, Enero 2022



Dirección General de Bibliotecas
Ciudad Universitaria
Av. de las Américas y Blvd. Universitarios
C. P. 80010 Culiacán, Sinaloa, México.
Tel. (667) 713 78 32 y 712 50 57
dgbuas@uas.edu.mx

UAS-Dirección General de Bibliotecas

Repositorio Institucional Buelna

Restricciones de uso

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

Queda prohibido la reproducción parcial o total de esta tesis. El uso de imágenes, tablas, gráficas, texto y demás material que sea objeto de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente correctamente mencionando al o los autores del presente estudio empírico. Cualquier uso distinto, como el lucro, reproducción, edición o modificación sin autorización expresa de quienes gozan de la propiedad intelectual, será perseguido y sancionado por el Instituto Nacional de Derechos de Autor.

Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución-No Comercial
Compartir Igual, 4.0 Internacional



Resumen

El desarrollo y control de estructuras semiconductoras ha sido la piedra angular sobre la cual se ha construido la tecnología actual. Estos avances tecnológicos solo son posibles mediante el estudio de nuevos materiales semiconductores, su importancia es tal que siguen siendo y serán los constituyentes esenciales de prácticamente cualquier dispositivo tecnológico con el que tengamos contacto.

En este trabajo se reporta el estudio de materiales en bulto de GaN y GaN/Si dopado, crecidos mediante epitaxia de haces moleculares sobre sustratos de silicio, empleando las técnicas de fotoluminiscencia, reflectancia y fotorreflectancia. Se estudia el efecto de la temperatura del sustrato, así como de la celda de galio (Ga) en la emisión óptica de estas las muestras, también se correlaciona la emisión cercana al gap y la emisión de defectos en función del dopaje con Si que está en el GaN. la emisión amarilla presente en fotoluminiscencia se correlaciona con los efectos de interferencia que aparecen tanto en los espectros de reflectancia como en los de fotorreflectancia, en particular encontramos que la señal de fotorreflectancia de películas de GaN/Si es producto de una tercera derivada, línea de Aspnes, y una primera derivada del espectro de reflectancia.

Abstract

The development and control of semiconductor structures has been the cornerstone on which current technology has been built. These technological advances are only possible through the study of new semiconductor materials, their importance is such that they continue to be and will be the essential constituents of practically any technological device with which we have contact.

In this work we report the study of GaN and doped GaN/Si bulk material, grown by molecular beam epitaxy on silicon substrate, using photoluminescence, reflectance and photoreflectance techniques. The effect of the substrate temperature as well as of the Gallium cell on the optical emission of these samples is studied, also the near-gap emission and the defect emission are correlated as a function of the doping of this one. The correlation between the yellow emission present in photoluminescence and the interference effects appearing in both reflectance and photoreflectance spectra is addressed, finding that the photoreflectance signal of GaN/Si films is the product of a third derivative, Aspnes line, and a first derivative of the reflectance spectrum.

Dedicatoria

Dedicado a toda mi familia

En especial a mi madre

Carmen Salazar

Y mis abuelos

Agradecimientos

Le agradezco infinitamente a toda mi familia, por su apoyo incondicional.

También agradezco a todos mis compañeros y profesores, en especial al Dr. Cristo Manuel Yee Rendón por el tiempo dedicado en el desarrollo de este trabajo.

Agradecimientos al CONACYT por la beca (No. 998744) en el marco de la convocatoria de becas nacional 2019 segundo periodo que se me otorgo durante este tiempo y la Facultad de Ciencias Físicos-Matemáticas de la Universidad Autónoma de Sinaloa, la cual me ha formado académicamente durante los últimos años.

CONTENIDO

Resumen.....	I
Abstract	II
Dedicatoria	III
Agradecimientos	IV
Contenido.....	V
Índice de figuras.....	VII
Índice de Tablas	XII
I Introducción	1
1.1 Hipótesis.....	5
1.2 Objetivos	5
1.2.1 Objetivo General	5
1.2.2 Objetivos particulares	5
1.3 Estructura de la tesis	6
II Marco teórico	7
II.1 Teoría de los semiconductores:.....	7
II.1.1 Introducción	7
II.1.2 Estructura cristalina	8
II.1.3 Bandas de energía	12
II.1.4 Semiconductores	14
II.1.5 Absorciones ópticas para transiciones no excitónicas	15
III Métodos síntesis y caracterización	17
III.1 Método de síntesis	17
III.2 Caracterización.....	23
III.2.1 Fotoluminiscencia.....	24
III.2.2 Fotorreflectancia.....	28
III.2.3 Modelo simple parabólico de la densidad de estados.....	42
IV Arreglo experimental.....	48
IV.1 Fotorreflectancia.....	48
IV.1.1 Descripción de la técnica de fotorreflectancia	48
IV.1.2 Procedimiento de normalización.....	50
IV.1.3 Configuración experimental	51
IV.2 Fotoluminiscencia	53
IV.2.1 Descripción de la técnica de fotoluminiscencia	53

V	Resultados	55
V.1	Destalles de las muestras	55
V.2	Espectros de Reflectancia y Fotorreflectancia	57
V.2.1	Reflectancia	57
V.2.2	Fotorreflectancia	68
V.3	Fotoluminiscencia	79
V.3.1	Fotoluminiscencia en muestras intrínsecas	79
V.3.2	Fotoluminiscencia de muestras dopadas	93
V.4	Origen de las oscilaciones debajo del gap	103
V.4.1	Modulación directa de la interfaz entre capas	114
V.4.2	Llenado de defecto en la interfaz	116
V.4.3	Efecto Termo-óptico	118
V.4.4	Modulación del índice de refracción por migración de portadores a la interfaz del GaN	119
V.4.5	Efecto electro-óptico lineal	120
V.5	Luminiscencia amarilla, oscilaciones debajo del gap y dopaje	124
VI	Conclusiones	126
VII	Apéndices	127
VII.1	Ajuste de línea de Aspnes utilizando MATLAB	127
VII.2	Oscilaciones por debajo del band gap	131
VII.2.1	Problema de doble interfaz solucionado mediante los coeficientes de Fresnel	131
VII.2.2	Problema de multicapas	138
VII.3	Fotorreflectancia (Desarrollo alternativo)	145
VII.4	Acrónimos y abreviaturas usados	151
VIII	Referencias	153

Índice de figuras

FIGURA 1-1 PRIMER DIODO ELECTROLUMINISCENTE DE GAN DOPADO CON MG EMITIENDO EN LA REGIÓN DEL VIOLETA [8].....	3
FIGURA 2-1 ESTRUCTURA FCC DONDE LAS ESFERAS ROJAS SERIAN ÁTOMOS EN CADA ARISTA, LAS ESFERAS AZULES SE REFIEREN A LOS ÁTOMOS CENTRADOS EN CADA CARA DEL CUBO.	8
FIGURA 2-2 TABLA PERIÓDICA DONDE SE SEÑALAN LOS GRUPOS III-V, GRUPOS LOS CUALES SON DE NUESTRO INTERÉS [17].....	10
FIGURA 2-3 ESTRUCTURAS CRISTALINAS. A) ESTRUCTURA ZINC BLENDA. B) ESTRUCTURA DEL DIAMANTE. ...	10
FIGURA 2-4 ESTRUCTURA CRISTALINA HEXAGONAL WURTZITA, ESTA ESTRUCTURA ES LA FASE ESTABLE PARA EL SEMICONDUCTOR GAN [18].....	11
FIGURA 3-1 DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DE UNA MÁQUINA TÍPICA DE MBE. EL SISTEMA DE CÁMARA DE ACERO INOXIDABLE TIENE AL MENOS UN VACÍO DE 10 – 11 TORR, LAS CÁMARAS DE EFUSIÓN LANZAN HACES COLIMADOS HACIA LA MONTURA ROTANTE DONDE ESTÁ EL SUSTRATO, EL HAZ ESTÁ SIENDO CALIBRADO CONSTANTEMENTE CON UN INDICADOR DE IONES, EL RHEDD Y LA PANTALLA FLUORESCENTE MONITOREAN CUANDO SE PUEDE SEGUIR A LA SIGUIENTE CAPA DE LA MUESTRA, YA QUE NO SE DEBE PERDER LA PRESIÓN EN NINGÚN PUNTO DEL PROCESO DE SÍNTESIS TODOS LOS ELEMENTOS DE MBE ESTÁN DENTRO DE LA CÁMARA DE VACÍO [22]	20
FIGURA 3-2 FOTOGRAFÍA DEL SISTEMA MBE DEL LABORATORIO DEL CINVESTAV	20
FIGURA 3-3 REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DE LOS PRINCIPALES PROCESOS QUE OCURREN EN LA SUPERFICIE DURANTE EL CRECIMIENTO MEDIANTE EPITAXIA DE HACES MOLECULARES: (L) LLEGADA DE ÁTOMOS, (2) INCORPORACIÓN AL CRISTAL, (3) DIFUSIÓN, (4) DESCOMPOSICIÓN Y (5) DESORCIÓN [26]	21
FIGURA 3-4 DIAGRAMA QUE MUESTRA LOS PRINCIPALES PROCESOS ÓPTICOS EN UNA TRANSICIÓN DE UN MEDIO A OTRO, EN ESTE CASO SE ASUME QUE EL HAZ INCIDENTE LLEGA LA SUPERFICIE DESDE EL VACÍO.	23
FIGURA 3-5 PROCESO ESQUEMÁTICO DE FOTOLUMINISCENCIA EN UN SEMICONDUCTOR [28].	24
FIGURA 3-6 ESQUEMA DE PROCESOS DE RECOMBINACIÓN RADIATIVA EN SEMICONDUCTORES. (A) RECOMBINACIÓN DE E-H DE BANDA A BANDA; (B) TRANSICIÓN DE DONANTE NEUTRO ($D0$) A BANDA DE VALENCIA (VB); (C) TRANSICIÓN DE BANDA DE CONDUCCIÓN (CB) A ACEPTOR NEUTRO ($A0$); (D) RECOMBINACIÓN RADIATIVA DE EXCITÓN LIBRE (FE); (E) RECOMBINACIÓN RADIATIVA DE EXCITÓN UNIDO (BE), QUE ESTÁ UNIDO A $D0$; TAMBIÉN ES POSIBLE LA RECOMBINACIÓN DE UN (BE) UNIDO A UN DONANTE IONIZADO $D +$; (F) RECOMBINACIÓN DEL PAR DONANTE-ACEPTOR (DAP) CON SEPARACIÓN r ; (G) LUMINISCENCIA DE DEFECTO DE NIVEL PROFUNDO; CUALQUIERA DE LAS DOS TRANSICIONES 1 Y 2 ES RADIATIVA. [32]	26
FIGURA 3-7 DIAGRAMA DEL CAMBIO EN LA PARTE IMAGINARIA DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA POR MODULACIÓN DE LA PRIMERA [38].....	38
FIGURA 3-8 ESQUEMA DEL CAMBIO EN LA PARTE IMAGINARIA DE LA FUNCIÓN DIELECTRICA PARA UNA MODULACIÓN DE TERCERA DERIVADA Y DONDE LA PERIODICIDAD DE RED NO SE CONSERVA.	41
FIGURA 3-9 FUNCIÓN $f(\rho)$ EN TÉRMINOS DEL PARÁMETRO ρ , DONDE SE MUESTRA EL PARÁMETRO DE ESCALA PARA TRES DIFERENTES VALORES DE n [35].....	44
FIGURA 3-10 REPRESENTACIÓN ESQUEMÁTICA DE LOS EFECTOS DE PR EN UNA MUESTRA TIPO N [35].....	46
FIGURA 3-11 CURVAMIENTO DE LAS BANDAS POR EL EFECTO DEL HAZ MODULADOR PARA EL SEMICONDUCTOR TIPO N [35]	47
FIGURA 4-1 DIAGRAMA DEL EXPERIMENTO DE FOTORREFLECTANCIA, DONDE SE MUESTRA EL CAMINO QUE LLEVAN LOS HACES DE LUZ, Y EL ORDEN EN QUE SE MANDA Y RECIBE LA SEÑAL EL EQUIPO DE CÓMPUTO.	49
FIGURA 4-2 FOTOGRAFÍA DEL ARREGLO EXPERIMENTAL UTILIZADO PARA LA TÉCNICA DE FOTORREFLECTANCIA.	52
FIGURA 4-3 DIAGRAMA DEL EXPERIMENTO DE FOTOLUMINISCENCIA.	53
FIGURA 4-4 FOTOGRAFÍA DONDE SE MUESTRA EL ARREGLO EXPERIMENTAL PARA LA TÉCNICA DE FOTOLUMINISCENCIA, DONDE SE OBSERVA LA TRAYECTORIA DE LA LUZ.	54

FIGURA 5-1 DIAGRAMA DE LAS MUESTRAS EN ESTUDIO, DONDE SE OBSERVA QUE ES UNA ESTRUCTURA DE MULTICAPAS.....	55
FIGURA 5-2 ESPECTRO DE REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 226, GAN/SI(111) INTRÍNSECO, 540 NM DE ESPESOR.	58
FIGURA 5-3 ESPECTRO DE REFLECTANCIA EXPERIMENTAL (CÍRCULOS) DE LA CAPA DE GAN EN LA MUESTRA 226 Y CURVAS DE REFLECTANCIA TEÓRICAS DE UNA CAPA DE GAN CON ESPESOR DE 540NM (CURVA ROJA), ESPESOR DE 600 NM (CURVA VERDE) Y ESPESOR DE 610 NM (CURVA AZUL).	59
FIGURA 5-4 REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 227, Y CURVAS TEÓRICAS DE REFLECTANCIA CON ESPESORES DE LA CAPA DE GAN DE 580 NM (CURVA ROJA) Y 590 NM (CURVA VERDE).....	60
FIGURA 5-5 REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 228, Y CURVAS TEÓRICAS DE REFLECTANCIA CON ESPESORES DE LA CAPA DE GAN DE 660 NM (CURVA ROJA) Y 670 NM (CURVA VERDE).....	60
FIGURA 5-6 REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 229, Y CURVAS TEÓRICAS DE REFLECTANCIA CON ESPESORES DE LA CAPA DE GAN DE 560 NM (CURVA ROJA) Y 570 NM (CURVA VERDE).....	61
FIGURA 5-7 REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 230, Y CURVAS TEÓRICAS DE REFLECTANCIA CON ESPESORES DE LA CAPA DE GAN DE 610 NM (CURVA ROJA) Y 630 NM (CURVA VERDE).....	61
FIGURA 5-8 CURVAS DE REFLECTANCIAS PARA CADA UNA DE LAS MUESTRAS DE GAN DE LA SERIE SIN DOPAR CON UN ESPESOR NOMINAL DE 540 NM.	63
FIGURA 5-9 CURVAS DE REFLECTANCIA DE LA SERIE DE MUESTRAS DE GAN CON DOPAJE DE SILICIO. DONDE SE PUEDE OBSERVAR AL SER ESTA MÁS ANCHAS TIENEN MÁS DOPAJE Y COMO ACTUÓ EL DOPAJE EN ESTAS SEÑALES.....	64
FIGURA 5-10 REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 359, EN LA CUAL SE OBSERVA QUE TIENE UN ESPECTRO CORRESPONDIENTE DE UN GROSOR DE 1440 NANÓMETROS.	65
FIGURA 5-11 REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 360, EN LA CUAL PARECER SER UNA SEÑAL PARECIDA A LA DE GROSOR 1000 NANÓMETROS.	66
FIGURA 5-12 REFLECTANCIA DE LA MUESTRA 465, EN LA CUAL SE OBSERVA QUE LA SEÑAL ES COMPARABLE CON UNA MUESTRA DE 970NM.....	66
FIGURA 5-13 SEÑAL PR DE LA MUESTRA 226 DE GAN SIN DOPAR, SE MUESTRA LA REGIÓN DEL ESPECTRO DENOMINADA OAG (OSCILACIONES ABAJO DEL GAP) Y SCG (SEÑAL CERCANA AL GAP)	68
FIGURA 5-14 COMPARACIÓN DE LA SEÑAL ΔR CON LA PRIMERA DERIVADA DE LA SEÑAL DE REFLECTANCIA (CURVA ROJA), SE NOTA UNA CORRESPONDENCIA EN EL PERIODO DE OSCILACIÓN, LA AMPLITUD DECAE A MEDIDA QUE SE ALEJA DEL GAP DEL GAN. SE TIENE UNA DISCREPANCIA EN LA FORMA DE LA SEÑAL EN LA VICINIDAD DEL GAP DEL GAN. ESTA DIFERENCIA SE ASOCIA A LA SEÑAL TÍPICA DEL BAND GAP ÓPTICO (TERCERA DERIVADA).	69
FIGURA 5-15 AJUSTE CON DATOS EXPERIMENTALES MUESTRA M226 EMPLEANDO LA LÍNEA DE ASPNES EN LA VICINIDAD DEL GAP DEL GAN.	70
FIGURA 5-16 SEÑAL DE PR DE LA MUESTRA 227, SE APRECIA DE NUEVO OSCILACIONES POR DEBAJO DEL GAP; ADEMÁS, DE LA SEÑAL CERCANA AL GAP, EN EL RECUADRO SE PRESENTA EL AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA REGIÓN DEL BAND GAP DEL GAN.	71
FIGURA 5-17 SEÑAL DE PR DE LA MUESTRA 228, SE APRECIA DE NUEVO OSCILACIONES POR DEBAJO DEL GAP ADEMÁS DE LA SEÑAL CERCANA AL GAP, EN EL RECUADRO SE PRESENTA EL AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA REGIÓN DEL BAND GAP DEL GAN.	71
FIGURA 5-18 SEÑAL DE PR DE LA MUESTRA 229, SE APRECIA DE NUEVO OSCILACIONES POR DEBAJO DEL GAP ADEMÁS DE LA SEÑAL CERCANA AL GAP, EN EL RECUADRO SE PRESENTA EL AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA REGIÓN DEL BAND GAP DEL GAN.	72
FIGURA 5-19 SEÑAL DE PR DE LA MUESTRA 230, SE APRECIA DE NUEVO OSCILACIONES POR DEBAJO DEL GAP ADEMÁS DE LA SEÑAL CERCANA AL GAP, EN EL RECUADRO SE PRESENTA EL AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA REGIÓN DEL BAND GAP DEL GAN.	72
FIGURA 5-20 AJUSTES DE LÍNEA PARA CADA MUESTRA COMO FUNCIÓN DE LOS PARÁMETROS DE CRECIMIENTO PARA MUESTRAS DE GAN/SI INTRINSECAS.....	74
FIGURA 5-21 SEÑAL DE PR DE LA MUESTRA 359, SE APRECIA DE NUEVO OSCILACIONES POR DEBAJO DEL GAP ADEMÁS DE LA SEÑAL CERCANA AL GAP, EN EL RECUADRO SE PRESENTA EL AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA REGIÓN DEL BAND GAP DEL GAN.	75

FIGURA 5-22 SEÑAL DE PR DE LA MUESTRA 465, SE APRECIA DE NUEVO OSCILACIONES POR DEBAJO DEL GAP ADEMÁS DE LA SEÑAL CERCANA AL GAP, EN EL RECUADRO SE PRESENTA EL AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA REGIÓN DEL BAND GAP DEL GAN.	76
FIGURA 5-23 SEÑAL DE PR DE LA MUESTRA 360, SE APRECIA DE NUEVO OSCILACIONES POR DEBAJO DEL GAP ADEMÁS DE LA SEÑAL CERCANA AL GAP, EN EL RECUADRO SE PRESENTA EL AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA REGIÓN DEL BAND GAP DEL GAN.	76
FIGURA 5-24 AJUSTES DE LÍNEA PARA CADA MUESTRA COMO FUNCIÓN DE LOS PARÁMETROS DE CRECIMIENTO PARA MUESTRAS DE GAN/SI CON DOPAJE INTENCIONAL.	78
FIGURA 5-25 ESPECTRO DE FOTOLUMINISCENCIA PARA LA MUESTRA 226, DONDE SE OBSERVA UNA SEÑAL AMARILLA ANCHA.	79
FIGURA 5-26 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 226 CON MEF, DONDE SE PUEDE APRECIAR QUE TENEMOS UNA SEÑAL AMARILLA MUY ANCHA.	81
FIGURA 5-27 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 226 CON PMT, DONDE SE OBSERVA LA SEÑAL AMARILLA INTENSA EN COMPARACIÓN DE LA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP.	81
FIGURA 5-28 FOTOGRAFÍA DE LA MUESTRA 226, DONDE SE OBSERVA LA LUMINISCENCIA AMARILLA A SIMPLE VISTA.	82
FIGURA 5-29 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 227 CON MEF, DONDE SE PUEDE APRECIAR QUE TENEMOS UNA SEÑAL AMARILLA MUY ANCHA.	83
FIGURA 5-30 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 227 CON PMT, DONDE SE OBSERVA LA SEÑAL AMARILLA INTENSA EN COMPARACIÓN DE LA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP ADEMÁS DE SER ESTA MÁS DÉBIL QUE EN LA MUESTRA 226.....	84
FIGURA 5-31 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 228 CON MEF, DONDE SE PUEDE APRECIAR QUE TENEMOS UNA SEÑAL AMARILLA ANCHA, Y UNA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP CON MUCHO MAS CUERPO.	84
FIGURA 5-32 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 228 CON PMT, DONDE SE OBSERVA LA SEÑAL AMARILLA ES COMPARABLE CON LA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP.	85
FIGURA 5-33 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 229 CON MEF, DONDE SE PUEDE APRECIAR QUE TENEMOS UNA SEÑAL AMARILLA ANCHA DONDE CLARAMENTE CONTRIBUYE A ELLA LUMINISCENCIA TANTO ROJAS COMO AZUL.....	85
FIGURA 5-34 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 229 CON PMT, DONDE PODEMOS VER QUE COMO EL PMT TIENE MENOR RESOLUCIÓN CERCA DE LA SEÑAL AMARILLA EN ESTE CASO PUEDE PERCIBIR UNA LUMINISCENCIA VERDE.	86
FIGURA 5-35 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 230 CON MEF, DONDE SE PUEDE APRECIAR QUE TENEMOS UNA SEÑAL AMARILLA ANCHA, Y UNA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP CON MUCHO MAS CUERPO.	86
FIGURA 5-36 AJUSTE GAUSSIANO PARA LA SEÑAL DE FOTOLUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 230 CON PMT, DONDE PODEMOS VER QUE COMO EL PMT TIENE MENOR RESOLUCIÓN CERCA DE LA SEÑAL AMARILLA EN ESTE CASO PUEDE PERCIBIR UNA LUMINISCENCIA VERDE CONTRIBUYE MÁS VISTO POR EL PMT.	87
FIGURA 5-37 FOTOGRAFÍA DE LA MUESTRA 227, DONDE SE OBSERVA LA LUMINISCENCIA AMARILLA.	87
FIGURA 5-38 FOTOGRAFÍA DE LA MUESTRA 228, DONDE SE OBSERVA LA LUMINISCENCIA AMARILLA EN UNA ZONA MUY CONCENTRADA.....	88
FIGURA 5-39 FOTOGRAFÍA DE LA MUESTRA 229, DONDE SE OBSERVA LUMINISCENCIA AMARILLA, PERO MUCHO MÁS TENUE EN COMPARACIÓN DE LAS DE MUESTRAS ANTERIORES.	88
FIGURA 5-40 FOTOGRAFÍA DE LA MUESTRA 230, DONDE SE OBSERVA LA LUMINISCENCIA AMARILLA ADEMÁS SE PUEDE VER CLARAMENTE QUE ESTA POR SECCIONES DE LA MUESTRA.....	89
FIGURA 5-41 FOTOLUMINISCENCIA PARA CADA UNA DE LAS MUESTRAS DE LA SERIE SIN DOPAR MEDIDAS CON EL MEF.	90
FIGURA 5-42 FOTOLUMINISCENCIA PARA CADA UNA DE LAS MUESTRAS DE LA SERIE SIN DOPAR MEDIDAS CON EL PMT.	91
FIGURA 5-43 ESPECTRO PL MEDIDO CON EL MEF PARA LA MUESTRA 359, DONDE AL SER UNA MUESTRA SIN DOPAJE MUESTRA UN ESPECTRO SIMILAR A LA SERIE ANTERIOR.	94

FIGURA 5-44 ESPECTRO PL MEDIDO CON EL PMT PARA LA MUESTRA 359, DONDE AL SER UNA MUESTRA SIN DOPAJE MUESTRA UN ESPECTRO SIMILAR A LA SERIE ANTERIOR	94
FIGURA 5-45 ESPECTRO PL MEDIDO CON EL MEF PARA LA MUESTRA 360, DONDE NOS SORPRENDE NO VER LA SEÑAL AMARILLA, PERO AL TENER DOPAJE INTENCIONAL SE ESPERABA QUE CAMBIASE.....	95
FIGURA 5-46 ESPECTRO PL MEDIDO CON EL PMT PARA LA MUESTRA 360, DONDE NOS SORPRENDE NO VER LA SEÑAL AMARILLA, EN SU LUGAR LO QUE TENEMOS ES EL ARMÓNICO DE LA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP.	95
FIGURA 5-47 COMPARACIÓN DEL ESPECTRO DE PL MEDIDO CON MEF, PARA LA MUESTRA 360 CON FILTRO Y SIN FILTRO, LA CUAL AUN CON FILTRO LA SEÑAL AMARILLA ES MUY POBRE A UN LADO DE LA CERCANA AL BAND GAP.....	96
FIGURA 5-48 ESPECTRO DE PL CON AJUSTE GAUSSIANO PARA LA MUESTRA 465 HECHO CON EL MINI ESPECTROFOTÓMETRO, DONDE SE OBSERVAN LA SEÑAL CERCANA AL GAP, LA AMARILLA Y AZUL.	97
FIGURA 5-49 ESPECTRO DE PL CON AJUSTE GAUSSIANO PARA LA MUESTRA 465 HECHO CON EL PMT DONDE SE OBSERVAN LA SEÑAL CERCANA AL GAP Y LA SEÑAL AMARILLA.	97
FIGURA 5-50 FOTOGRAFÍA DE LA LUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 359.	98
FIGURA 5-51 FOTOGRAFÍA DE LA LUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 465.	98
FIGURA 5-52 FOTOGRAFÍA DE LA LUMINISCENCIA DE LA MUESTRA 360.	98
FIGURA 5-53 FOTOLUMINISCENCIA PARA CADA UNA DE LAS MUESTRAS DE LA SERIE DOPADA MEDIDAS CON EL MEF.....	99
FIGURA 5-54 FOTOLUMINISCENCIA PARA CADA UNA DE LAS MUESTRAS DE LA SERIE DOPADA MEDIDAS CON EL PMT.....	100
FIGURA 5-55 SEÑAL PR PARA LA MUESTRA 359, DONDE SE OBSERVAR LA CURVA DE LA ENVOLVENTE DONDE DELIMITA EL AJUSTE.	105
FIGURA 5-56 SEÑAL PR PARA LA MUESTRA 359, DONDE SE OBSERVA LA CURVA DE LA ENVOLVENTE EN LA ZONA DONDE SE ENCUENTRA ÚNICAMENTE LA SEÑAL DE LAS OSCILACIONES CORRESPONDIENTE A LA SEÑAL DE LA PRIMERA DERIVADA.	105
FIGURA 5-57 SEÑAL PR PARA LA MUESTRA 465, DONDE SE OBSERVAR LA CURVA DE LA ENVOLVENTE DONDE DELIMITA EL AJUSTE.	106
FIGURA 5-58 SEÑAL PR PARA LA MUESTRA 465, DONDE SE OBSERVA LA CURVA DE LA ENVOLVENTE EN LA ZONA DONDE SE ENCUENTRA ÚNICAMENTE LA SEÑAL DE LAS OSCILACIONES CORRESPONDIENTE A LA SEÑAL DE LA PRIMERA DERIVADA.	106
FIGURA 5-59 COMPARACIÓN DE LA PRIMERA DERIVADA DE REFLECTANCIA A LA SEÑAL PR EN LA MUESTRA 230	107
FIGURA 5-60 PRIMERA DERIVADA CON SUS FACTORES CORRESPONDIENTES A LA ATENUACIÓN DE SEÑAL PR PARA LA MUESTRA 230.	108
FIGURA 5-61 AJUSTE CONSIDERANDO LA PARTE DE LA DERIVADA DE LA REFLECTANCIA JUNTO AL DE ASPNES PARA LA MUESTRA 230.	109
FIGURA 5-62 AJUSTE CONSIDERANDO LA PRIMERA DERIVADA DE LA CURVA DE REFLECTANCIA JUNTO AL AJUSTE ASPNES PARA LA MUESTRA 359.....	109
FIGURA 5-63 AJUSTE CONSIDERANDO LA PRIMERA DERIVADA DE LA CURVA DE REFLECTANCIA JUNTO AL AJUSTE DE ASPNES PARA LA MUESTRA 465.....	110
FIGURA 5-64 AJUSTE CONSIDERANDO LA PRIMERA DERIVADA DE LA CURVA DE REFLECTANCIA JUNTO AL AJUSTE DE ASPNES PARA LA MUESTRA 226.....	110
FIGURA 5-65 AJUSTE CONSIDERANDO LA PRIMERA DERIVADA DE LA CURVA DE REFLECTANCIA JUNTO AL AJUSTE DE ASPNES PARA LA MUESTRA 227.....	111
FIGURA 5-66 AJUSTE CONSIDERANDO LA PRIMERA DERIVADA DE LA CURVA DE REFLECTANCIA JUNTO AL AJUSTE DE ASPNES PARA LA MUESTRA 228.....	111
FIGURA 5-67 AJUSTE CONSIDERANDO LA PRIMERA DERIVADA DE LA CURVA DE REFLECTANCIA JUNTO AL AJUSTE DE ASPNES PARA LA MUESTRA 229.....	112
FIGURA 5-68 COMPARACIÓN DE SEÑALES ΔR Y LA DERIVADA DE LA REFLECTANCIA, DONDE PODEMOS VER EN QUE RANGO TENEMOS LAS OSCILACIONES PARA LA MUESTRA 359.....	115

FIGURA 5-69 SEÑAL PR DE LA MUESTRA 359 VARIANDO LA FRECUENCIA DE MODULACIÓN EN LA CUAL SE OBSERVA QUE UNA MAYOR FRECUENCIA DESCRIBE MEJOR LA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP.	116
FIGURA 5-70 COMPARACIÓN DE LA SEÑAL PR DE LA MUESTRA 465 VARIANDO LAS FRECUENCIAS DE MODULACIÓN	117
FIGURA 5-71 COMPARACIÓN DE LA SEÑAL PR DE LA MUESTRA 359 VARIANDO LA POTENCIA DE EXCITACIÓN DONDE NO SE OBSERVA UN CAMBIO EN LAS OSCILACIONES.	118
FIGURA 5-72 COMPARACIÓN DE CÓMO LA POTENCIA AFECTA LA POTENCIA A LAS OSCILACIONES EN LA MUESTRA 359.	120
FIGURA 5-73 AJUSTE DE LA EXPRESIÓN DE CAUCHY EMPLEANDO LOS DATOS REPORTADOS EN LA LITERATURA [63].....	123
FIGURA 7-1 INTERFAZ GRÁFICA DE LA FUNCIÓN AJUSTE DE MATLAB.	127
FIGURA 7-2 INTERFAZ PARA LA VARIACIÓN DE LOS PARÁMETROS DE AJUSTE DE LA FUNCIÓN.	128
FIGURA 7-3 PROGRAMA PARA COMPARAR LOS DATOS DE AJUSTE CON RESULTADOS EXPERIMENTALES.	128
FIGURA 7-4 GRÁFICA DE LOS AJUSTES OBTENIDOS MEDIANTE MATLAB COMPARADOS A LOS VALORES EXPERIMENTALES.	129
FIGURA 7-5 PROGRAMA PARA NORMALIZAR DATOS EN MATLAB.	130
FIGURA 7-6 RESULTADOS DEL PROCESO DE AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES PARA LA MUESTRA 226.	130
FIGURA 7-7 ONDAS PROPAGADAS A TRAVÉS DE LA INTERFAZ DEL SEMICONDUCTOR DEL PROBLEMA.....	131
FIGURA 7-8 INSTRUMENTO FABRY-PEROT	136
FIGURA 7-9 PROPAGACIÓN DE LA LUZ A TRAVÉS DE MÚLTIPLES CAPAS CRISTALINAS.	138
FIGURA 7-10 DEPENDENCIA ESPECTRAL DE LOS COEFICIENTES DE SERAPHINE PARA GE A TEMPERATURA AMBIENTE. [B. O. SERAPHIN, N. BOTTKA: BAND STRUCTURE ANALYSIS FROM ELECTROREFLECTANCE STUDIES. PHYS. REV. 145, 628–636 (1966)]	146

Índice de Tablas

TABLA 5-1 DETALLES EXPERIMENTALES DE LA SERIE DE MUESTRAS EMPLEADAS EN EL PRESENTE ESTUDIO, LAS MUESTRAS SON INTRÍNSECAS A EXCEPCIÓN DE LA 360 Y LA 465 QUE FUERON DOPADAS CON SILICIO.....	56
TABLA 5-2 DONDE SE COMPARAN LOS PARÁMETROS DE CRECIMIENTO CON EL GROSOR OBTENIDO EXPERIMENTALMENTE PARA LA SERIE QUE SE SABE TUVIERON EL MISMO TIEMPO DE SÍNTESIS.....	62
TABLA 5-3 COMPARACIÓN DE LOS GROSORES OBTENIDOS EXPERIMENTALMENTE DE LAS MUESTRAS.....	67
TABLA 5-4 VALORES DEL GAP Y ANCHO DE LOS AJUSTES DEL GAN EN FASE HEXAGONAL PARA MUESTRAS INTRÍNSECAS DONDE SE INDICA EL ANCHO DE LA TRANSICIÓN DEL BAND GAP MEDIANTE Γ	73
TABLA 5-5 VALORES DEL BAND GAP Y ANCHO DE LOS AJUSTES DEL GAN EN FASE HEXAGONAL PARA LA SERIE DE MUESTRA CON DOPAJE DE SILICIO.....	77
TABLA 5-6 SE PUEDE VER EL ANCHO DEL PICO DE LA SEÑAL CERCANA AL BAND GAP DE CADA MUESTRA EXPONENDO QUE PARA EL CASO SIN DOPAJE INTENCIONAL TENEMOS UN ANCHO SIMILAR.....	91
TABLA 5-7 COMPARACIÓN ENTRE LOS ANCHOS DE PICOS DE LA SEÑAL CERCANA BAND GAP PARA LA SERIE DOPADA.....	101

I INTRODUCCIÓN

El progreso de los nuevos dispositivos electrónicos requiere el estudio de nuevos materiales para satisfacer las necesidades actuales, en particular aquellos que basan su funcionamiento en las propiedades optoelectrónicas como los semiconductores, han recibido un gran interés debido a aplicaciones tecnológicas y siguen siendo bastante estudiados. Los materiales semiconductores han hecho posible la aparición de los primeros circuitos integrados (los cuales aparecieron a partir de 1958) y dieron comienzo a una revolución tecnológica sin precedentes que ha transformado profundamente a nuestra sociedad.

Desde entonces, se ha producido una aceleración del desarrollo de las tecnologías relacionadas con dichos materiales, tanto a las referentes de obtención y síntesis del propio material semiconductor, como la fabricación de los dispositivos sobre dicho material. En la actualidad existen una gran variedad de semiconductores que se pueden emplear para la fabricación de dispositivos optoelectrónicos con un amplio espectro de características y aplicaciones.

Entre materiales semiconductores con mayor potencial futuro destacan los de banda prohibida ancha (llamados WBG por sus siglas en inglés). Especialmente el nitruro de galio (GaN) ha sido una pieza clave para la fabricación de dispositivos de emisión de colores azules, verdes y algunos amarillos, se ha hecho hincapié en los LEDs porque ahora tenemos potencias de 171 lm/W en un LED blanco demostrado en laboratorio [1] cuando una lámpara incandescente convencional oscila entre $7 - 20 \text{ lm/W}$ y aun los están mejorando, se tiene la expectativa de llegar a los 300 lm/W , esto es algo que ya estamos viviendo día a día en nuestra sociedad. El GaN se emplea en los dispositivos electrónicos por sus propiedades como su alta temperatura de fusión y su alto voltaje de ruptura, lo que los hacen ideales para dispositivos de alta frecuencia y potencia. Además, dado que los nitruros III, tienen propiedades mecánicas que pueden soportar entornos hostiles como en medio ambiente, medios cáusticos y el espacio exterior.

Se tienen que para aumentar la eficiencia en dispositivos optoelectrónicos en basados en GaN se requiere controlar la respuesta óptica del GaN, por lo que es deseable tener una muy buena

calidad cristalina, esto requiere el empleo de sustratos para llevar a cabo la síntesis. En específico la fase hexagonal, que es la fase estable para este semiconductor, normalmente emplea como sustrato el óxido de aluminio con cromo y titanio mejor conocido como zafiro. Con el empleo de zafiro como sustrato se han logrado obtener GaN de alta calidad [2] requerido para la creación de los dispositivos que demanda la industria [3]. En la investigación se explora el de hacer la síntesis empleando sustratos más económicos como el Silicio. Así de manera natural el empleo de sustratos de silicio es muy atractivo ya que no solo se reducen los costos de sustratos costosos de zafiro, sino que también incorpora de manera natural los avances del GaN en fase hexagonal la tecnología del Silicio. El silicio en GaN además de emplearse como sustrato, también se puede emplear como dopante, siendo esta igualmente importante ya que el dopaje se usa para controlar las propiedades optoelectrónicas del GaN.

Conocer los antecedentes históricos de los nitruros es de suma importancia para poder explicar cuáles han sido las claves del éxito de esta tecnología, sus limitaciones presentes y futuras, los avances producidos y las razones que justifican algunas de las soluciones adoptadas en el diseño y fabricación de dispositivos para aplicaciones en específico. La pauta que puede tomar la investigación en los próximos años es, en buena medida, una respuesta a los problemas encontrados en el pasado y presente.

Los primeros pasos para obtener GaN fueron hechos por Johnson, que obtuvo polvo de GaN en el año 1932 [4] a través de la reacción de Ga metálico y NH_3 (Amoniaco), a los pocos años Juza y Hahn en 1938 [5], hicieron el intento de sintetizar GaN (y también InN) que hicieron la misma reacción que Johnson, pero además de eso lo alentaron el galio, lo cual produjo pequeñas agujas y plaquetas de GaN, en si, estos trabajos no fueron relevantes desde el punto de vista prácticos, pero ya guiaban a la existencia de un interés de producción de este material, posteriormente hubo uno que otros intentos para fabricar este material en Alemania sin mucha repercusión, hasta que en 1969 [6], H. Maruska, trabajador de RCA (Radio Corporation of America) hizo crecer una capa de GaN sobre un sustrato de zafiro por una técnica de epitaxia en fase de vapor mediante hidruros (por sus siglas en inglés HVPE) siguiendo instrucciones de James Tietjen, el objetivo de RCA era desarrollar pantallas planas de televisión basadas en diodos luminiscentes (LEDs) la razón de porque

usaron zafiro fue por su robustez, nula reactiva con el precursor de amoniaco y su disponibilidad. Como era de esperar el trabajo de Maruska no se quedó en solo el crecimiento del material, dado el objetivo de la empresa, tenía que usar este material para implementarlo en LEDs, el material sintetizado es tipo n intrínsecamente y con un alta densidad de electrones, lo que imposibilitó en aquel momento la síntesis del material dopado eficiente tipo p (aun dopándolo solo se compensaba la concentración intrínseca), sin embargo Maruska junto a Pankove [7] consiguieron los primeros LED de nitruros, uno de los cuales se muestra en la figura 1.1.

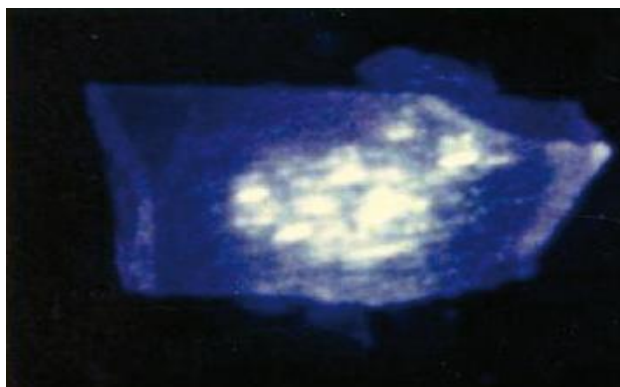


Figura I-1 Primer diodo electroluminiscente de GaN dopado con Mg emitiendo en la región del violeta [8]

Después de esto, muchos grupos de investigación por todo el mundo siguieron las bases sentadas por el grupo de RCA, pero quienes lograron avanzar más fueron los japoneses, en 1986, Amano et al [2] mostraron un procedimiento de crecimiento de dos fases para mejorar la calidad de la capa de GaN, posteriormente en 1991 Nakamura et al [9]. Encontró una capa de nucleación entre 450°C a 600°C que lograba una capa de GaN de alta calidad y largo tiempo de vida útil. Esta investigación logró mejorar la calidad de GaN y sentó las bases del desarrollo de dispositivos electrónicos basados en éste. En el proceso de búsqueda de un sustrato más compatible con la industria establecida, se tienen los primeros reportes de GaN/Si (111) por Watanabe et al [10], el cual logró el crecimiento mediante el uso de una capa intermedia de AlN sobre el sustrato de Si, lo cual representó un avance mayúsculo hacia la integración de las propiedades optoelectrónicas del GaN con la tecnología del silicio.

Entre los estudios más recientes sobre el efecto del dopaje de silicio en GaN se tiene el realizado por Bouzidi, et al [11], que reporta la caracterización hecha mediante fotorreflectancia a muestras de GaN dopadas con silicio, en este estudio las muestras fueron sintetizadas por (sus siglas en ingles es MOCVD) y se observó el efecto de Burstin-Moss y oscilaciones de Franz-Keldysh. En el caso de Bouzidi se empleó substrato de zafiro (0001) y sus resultados fueron que a temperatura ambiente los espectros de Fotorreflectancia (PR) mostraron señal por encima del gap, producto del efecto de Franz-Keldysh (FKO), fenómeno que es producido en puntos críticos de su estructura electrónica durante la modulación de un campo eléctrico intrínseco de la muestra, así en el régimen del estudio mencionado se encontró que hay una dependencia lineal entre el gap energético y el dopaje.

Un ejemplo de la versatilidad de la técnica de fotorreflectancia que se empleó para caracterizar el GaN es el artículo publicado por Casallas-Moreno et al [12], lo que hicieron fue medir mediante fotorreflectancia el gap energético de InN nano columnas auto ensamblados, en este artículo se hicieron tanto caracterizaciones de fotoluminiscencia como fotorreflectancia, ambas caracterizaciones llegaron a un resultado similar para la estimación del gap energético del InN.

Este trabajo estudiamos las propiedades ópticas de películas de GaN crecidas sobre substratos de Silicio (111) por epitaxia de haces moleculares (MBE) y los efectos del dopaje. La técnica principal de caracterización óptica fue por fotorreflectancia, en conjunto con fotoluminiscencia. Así con la información obtenida, se llevará a cabo una evaluación de calidad cristalina y las propiedades ópticas como función tanto del dopaje, como de las condiciones mismas del crecimiento.

1.1 HIPÓTESIS

Es posible encontrar mediante fotoluminiscencia y fotorreflectancia el efecto de las condiciones de crecimiento en la emisión de muestras de GaN/Si(111). Así como también encontrar cual es el efecto del dopaje en las propiedades ópticas de GaN/Si(111) dopadas con Silicio.

I.2 OBJETIVOS

I.2.1 Objetivo General

- Estudio del efecto del dopaje de silicio y de las condiciones de crecimiento en las propiedades ópticas de películas de GaN/Si(111) crecidas por MBE.

I.2.2 Objetivos particulares

- Caracterizar películas de GaN/Si(111) crecidas mediante MBE, utilizando espectroscopia de fotorreflectancia.
- Medir la fotoluminiscencia de las muestras.
- Correlacionar las propiedades ópticas con el dopaje de las muestras.

I.3 ESTRUCTURA DE LA TESIS

La estructura de esta tesis en grandes rasgos es la siguiente: En el capítulo 2 se da una descripción general de la teoría de semiconductores, como son las estructuras cristalinas, bandas de energía, aproximación de masas efectivas además de describir el material de estudio. En el capítulo 3 se describe las técnicas de caracterización como lo son la fotorreflectancia (PR) y fotoluminiscencia (PL), además de la teoría en la que se fundamentan las técnicas. En el capítulo 4 se describe el arreglo experimental y las especificaciones de este. En el capítulo 5 se presentan los resultados obtenidos en el trabajo experimental. Para finalizar, en el capítulo 6 se presentan conclusiones y perspectivas.

II MARCO TEÓRICO

II.1 TEORÍA DE LOS SEMICONDUCTORES:

II.1.1 Introducción

Un semiconductor, en principio es un material con las características propias de un aislante, sin embargo, bajo ciertas condiciones puede modificar sus propiedades hasta tener características de un conductor y por ende soportar un flujo de significativo de corriente eléctrica [13]. Usualmente el término semiconductor es para hacer énfasis en que sus propiedades eléctricas lo ubican en un punto intermedio conductor o aislante, por lo que aplicando mediante una fuente de voltaje de magnitud limitada (un rango sería 0.3 – 4 volts) en sus terminales del material provoca ser conductor.

Los semiconductores pueden clasificarse en función de sus propiedades y aplicaciones [14]. Por ejemplo, en base de su estructura de banda electrónica, o la tabla periódica (compuestos de los grupos IV, III-V y II-VI), estructura cristalina o propiedades eléctricas. Ninguno de estos esquemas de clasificación sería completamente aceptable en todos los casos; por lo tanto, no nos adherimos a ningún esquema específico y rígido, pero usamos estos diversos esquemas a medida que se vuelven útiles para la descripción de diferentes materiales y sus aplicaciones.

Actualmente la manera más convencional de hacer un material semiconductor para aplicaciones es tomando un material de alta pureza como el silicio o el germanio y doparlos (agregar defectos) en algún porcentaje razonable mediante técnicas de crecimiento. Entre las más versátiles se encuentra la técnica de epitaxia de haces moleculares (MBE), con la cual obtenemos materiales muy estables y mediante ellos es posible modificar sus propiedades ópticas y eléctricas. En específico la técnica MBE permite crecer tanto materiales en volumen o bulto como sistemas nanoestructurados complejos, así en el presente trabajo tendremos el caso de material GaN dopado con silicio en bulto. Para abundar un poco sobre las propiedades de mayor importancia en los semiconductores, a continuación, se desarrollarán

los conceptos básicos sobre materiales semiconductores y sobre estructura cristalina de los mismos.

II.1.2 Estructura cristalina

Las categorías fundamentales de los sólidos, según su orden estructural son cristalinos, policristalinos y amorfo. Cabe señalar que la mayoría de los semiconductores utilizados en aplicaciones electrónicas son materiales cristalinos, aunque algunos semiconductores policristalinos y amorfos han encontrado una gama de aplicaciones en diversos dispositivos electrónicos. En los materiales cristalinos los átomos están dispuestos en un patrón(distribución) tridimensional periódico de las moléculas o átomos a vecinos más próximos, esto lo mostró Laue en 1912 [15]. Para la descripción de los cristales, podemos definir la red (Lattice) que es un arreglo periódico de puntos de red en tres dimensiones, cada punto en este arreglo tiene un entorno idéntico y por una base o grupo de átomos con posición específicas que mediante la repetición de la red me genera el cristal. El sólido entero puede ser representado por repetición de traslación de la llamada celda primitiva en tres dimensiones.

La mayoría de los semiconductores de uso extensivo como el Silicio, GaAs, el β -GaN tiene una estructura cristalina FCC (Face-Centred Cubic), como se muestra en la figura 2.1

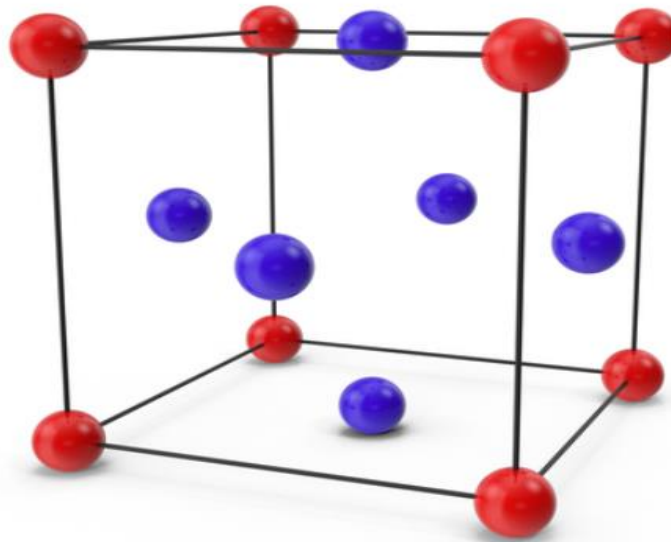


Figura II-1 Estructura FCC donde las esferas rojas serian átomos en cada arista, las esferas azules se refieren a los átomos centrados en cada cara del cubo.

La red esta está definida mediante un conjunto de vectores primitivos de la red que comúnmente se denotan de la siguiente manera:

$$\vec{a}_1 = \frac{A_0}{2}(\hat{j} + \hat{k}), \quad \vec{a}_2 = \frac{A_0}{2}(\hat{i} + \hat{k}), \quad \vec{a}_3 = \frac{A_0}{2}(\hat{j} + \hat{i}) \quad 2.1$$

Donde a_1 es el vector en la dirección i -ésima y los vectores de traslación, es decir que conectan puntos equivalentes en el cristal, se pueden representar de la siguiente manera:

$$R = \alpha_1 \vec{a}_1 + \alpha_2 \vec{a}_2 + \alpha_3 \vec{a}_3 \quad 2.2$$

Donde $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ son enteros [16].

Los semiconductores fabricados con Si, GaAs, AlAs y InP, todos estos tienen una estructura FCC con dos átomos en la base de la red, uno colocado en $(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8})$ y otro en $(-\frac{1}{8}, -\frac{1}{8}, -\frac{1}{8})$, en unidades de A_0 .

Para el grupo IV los materiales como Si y Ge, tienen la estructura del diamante que es la FCC que se acaba de describir, solo que los átomos en las dos posiciones son el mismo. Si los átomos son distintos entonces se tiene la estructura zinc Blenda como lo que pasa con GaAs, AlAs, CdTe y HgTe, prácticamente son las estructuras predominantes en el grupo III-V y II-VI.

																		Grupo III - V					
1 H 1.00794																		2 He 4.00260					
3 Li 6.941	4 Be 9.0122																	5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.180
11 Na 22.990	12 Mg 24.305																	13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 Sc 44.956	22 Ti 47.867	23 V 50.942	24 Cr 51.996	25 Mn 54.938	26 Fe 55.845	27 Co 58.933	28 Ni 58.693	29 Cu 63.546	30 Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.80						
37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc [98]	44 Ru 101.07	45 Rh 101.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.60	53 I 126.90	54 Xe 131.29						
55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57-70 * Lanthanide series	71 Lu 174.97	72 Hf 178.49	73 Ta 180.95	74 W 183.84	75 Re 186.21	76 Os 190.23	77 Ir 192.22	78 Pt 195.08	79 Au 196.97	80 Hg 200.59	81 Tl 204.38	82 Pb 207.2	83 Bi 208.98	84 Po [209]	85 At [210]	86 Rn [222]					
87 Fr [223]	88 Ra [226]	89-102 ** Actinide series	103 Lr [260]	104 Rf [261]	105 Db [262]	106 Sg [263]	107 Bh [264]	108 Hs [265]	109 Mt [266]	110 Uun [267]	111 Uuu [268]	112 Uub [269]	114 Uuq [270]										
		* Lanthanide series		57 La 138.91	58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm [145]	62 Sm 150.36	63 Eu 151.96	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.50	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04						
		** Actinide series		89 Ac [227]	90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np [237]	94 Pu [244]	95 Am [243]	96 Cm [247]	97 Bk [247]	98 Cf [251]	99 Es [252]	100 Fm [257]	101 Md [258]	102 No [259]						

Figura II-2 Tabla periódica donde se señalan los grupos III-V, grupos los cuales son de nuestro interés [17].

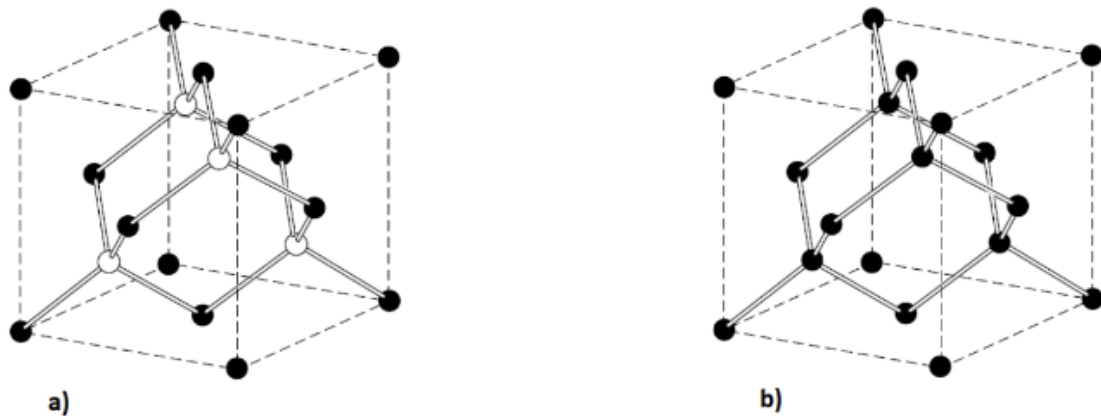


Figura II-3 Estructuras cristalinas. a) Estructura Zinc Blenda. b) Estructura del diamante.

El caso del GaN es especial ya que la fase estable del mismo denominada α -GaN es del grupo III-V y no es ninguna de las dos estructuras cúbicas mencionadas anteriormente, este material tiene la estructura llamada Wurtzita la cual es un poco más complicada que las mostradas en la figura 2.3, esta es una estructura hexagonal. Aunque cabe señalar que es posible tener al GaN en estructura Zinc Blenda, pero es una estructura metaestable que se puede provocar en

el GaN bajo ciertas condiciones en su crecimiento. En este trabajo se estudiará GaN en fase hexagonal que nos referiremos a ella como Wurtzita.

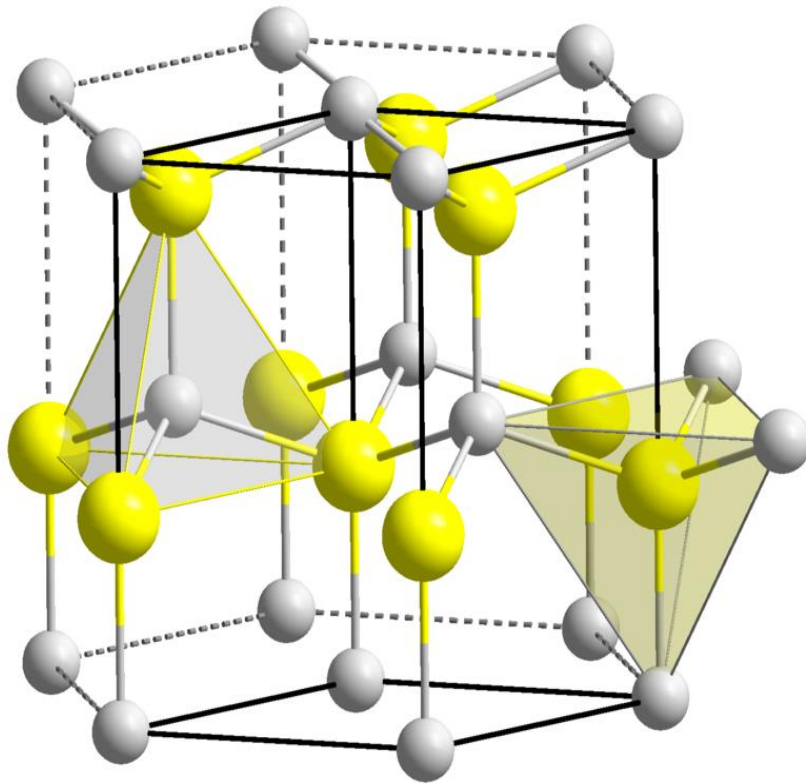


Figura II-4 Estructura cristalina hexagonal Wurtzita, esta estructura es la fase estable para el semiconductor GaN [18].

II.1.3 Bandas de energía

Para hablar sobre las bandas de energía primero debemos hablar del modelo de electrón libre, se considera que los electrones son partículas totalmente libres dentro del material. En este modelo, debido al principio de exclusión de Pauli, la probabilidad de que un estado determinado con energía E este ocupado por un electrón es igual a $f(E)$, siendo esta la distribución de Fermi-Dirac

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_f}{kt}\right) + 1} \quad 2.3$$

donde E es la energía, E_f es la energía de fermi, k es la constante de Boltzmann y t la temperatura absoluta.

Esta teoría es capaz de explicar el comportamiento de materiales simples como los del grupo I de la tabla periódica, sin embargo, el modelo del electrón libre tal cual falla al describir la distinción de metales, semimetales, semiconductores y aislantes además de los coeficientes del Hall positivos. Es muy fácil ver la diferencia de un buen conductor a un buen aislante porque lo hacemos mediante la resistividad eléctrica como tenemos un rango amplio para distinguirlos ya que un buen conductor tiene una resistividad eléctrica $10^{-10}\Omega \cdot cm$ a $1K$ y un buen aislante su resistividad eléctrica es del orden de $10^{22}\Omega \cdot cm$. Esto quiere decir que hay 32 órdenes de magnitud para explorar propiedades físicas de los sólidos con respecto a la resistividad eléctrica. Así, si el modelo de electrón libre no es capaz de explicarlo es claro que tenemos que mejorar el modelo [16]. Claramente se necesita un modelo menos “ingenuo” para estos problemas, afortunadamente estos problemas del modelo del electrón libre se pueden resolver introduciendo el potencial periódico que existe en el cristal como una perturbación al modelo del electrón libre.

Todo sólido contiene electrones y núcleos, ahora la problemática es cómo reaccionan esos electrones del material al aplicarles un campo eléctrico, es decir al aplicar una fuerza sobre

este. Un electrón de valencia en el sólido metálico se sentirá prácticamente libre, aunque este siempre está sujeto a los potenciales periódicos del cristal y estos gobernarán su acción bajo el campo eléctrico, que tan cerca o no este del modelo de electrón libre depende de la magnitud del potencial periódico respecto a la energía de este. Cuando tenemos más de un átomo y su esparcimiento es pequeño, las funciones de onda de los átomos se superponen y debido al principio de exclusión de Pauli se forman dos niveles muy próximos entre sí en lugar del nivel definido, así en un cristal tenemos una gran cantidad de átomos, en donde los niveles antes bien definidos, ahora forman una gran cantidad de niveles muy próximos entre sí, esto provoca que no podremos distinguir los niveles discretamente, en otras palabras se forma un continuo y esto da pie a la formación de las bandas de energía. La integración del electrón con el campo cristalino dará origen a la formación de las llamadas bandas de energía de los materiales, y en el caso de los aislantes y semiconductores existen zonas no permitidas para estar a los electrones en el material, a estas se les conoce como brechas de energía (energy gap o band gap, que en la jerga técnica de ciencias de nano ciencia se les llama comúnmente solo gap); es decir, no existen electrones que se muevan en el cristal con energías que estén en la brecha de energía.

Con las bandas de energía se puede dar una descripción de lo que es un material aislante o un conductor. En la gran mayoría de los procesos, las escalas de energía que tratan los procesos físicos-comunes, solo los electrones de valencia del átomo participan. Ahora bien, un aislante es aquel en el cual la banda que contiene los electrones de valencia está completamente ocupada y hay un band gap respecto a la siguiente banda permitida, así al aplicar un campo eléctrico no hay un estado libre al cual hacer la transición, así el electrón no puede cambiar su estado y por lo tanto no hay conducción de corriente. Un conductor por otra parte es quien tiene prácticamente vacías las bandas y permite un movimiento libre de electrones cuando se aplica un campo eléctrico. Finalmente, el semiconductor es aquel que tiene algunas bandas llenas y otras vacías, lo que permite que bajo un campo eléctrico se de el movimiento de electrones cuando se aplica un campo eléctrico de cierta magnitud o en su defecto el movimiento de orbitales libres o huecos en las bandas casi llenas.

Las bandas más importantes en un material, por ser las que determinan las propiedades ópticas y electrónicas, y las que usaremos para describir propiedades posteriormente, son la

banda de valencia y la de conducción, la banda ocupada por electrones en la capa más externa de un átomo es la llamada banda de valencia y la banda de conducción que se encuentra por encima de esta última. Se denomina banda de conducción ya que los electrones que llegan a esta son libres de participar en la conducción eléctrica.

Es importante recalcar que a temperatura $T = 0$ todo semiconductor es en efecto un aislante, pero a temperatura ambiente existe una probabilidad finita de que un electrón ocupe un estado no ocupado a $T = 0$, es decir que hay una posibilidad distinta de cero de que haya electrones en la banda de conducción y haya niveles desocupados en la banda de valencia que denominamos huecos.

II.1.4 Semiconductores

En los textos de física de estado sólido, se le define a un semiconductor como un material que tiene una resistividad eléctrica en un rango de $10^{-2} - 10^9 \Omega \cdot cm$ [19]. De otra forma, también se puede ver como un material que tiene un gap de energía entre $0 \sim 4 eV$.

La forma más cómoda de estudiar el comportamiento de un semiconductor es mediante la estructura de bandas, al estudiarse de esta manera podemos fácilmente percibir su banda de valencia, banda de conducción y gap de energía, lo que nos permite utilizar como herramientas para caracterizar un material y poder entender los procesos físicos que en ellos se producen.

Hay una distinción de dos tipos de semiconductores, con respecto al band gap energético, los del band gap directo y los de band gap indirecto; los primeros son aquellos que, al aplicarles una energía igual o mayor al band gap, pueden absorber un fotón, un electrón de la banda de valencia pasa a la banda de conducción conservando su momento y la menor energía posible del sistema, la cual llamamos E_0 , y que en la mayoría de los semiconductores III-V se localiza en el centro de la primera zona de Brillouin y para el cual momento cristalino es cero. En cambio, los de band gap indirecto son aquellos que, al aplicarles una energía igual o mayor al band gap, un electrón de la banda de valencia pasa a la banda de conducción, requiere

además de un fotón también un fonón que no es otra cosa que la cuantización del momento del cristal, es decir, además de la energía óptica se requiere momento para lograr que el electrón pase de una banda a otra. Al ser la promoción de un electrón de la banda de valencia a la de conducción un proceso que involucra más interacciones se tiene que este proceso no es tan eficiente como lo es la simple absorción de un fotón, así de manera más lógica se tiene que los materiales de band gap indirecto no son tan útiles como los materiales de band gap directo, en lo que concierne a aplicaciones ópticas.

Si bien en la discusión de las propiedades ópticas y electrónicas se habla mucho de los electrones en la banda de conducción, también es de suma importancia tratar los electrones que están en la banda de valencia, en la práctica, para semiconductores esta banda está en realidad llena y es equivalente tratar con aquellos lugares que no están llenos, es decir los orbitales que quedan desocupados en la banda de valencia a estos se les denomina “hueco”. Estos huecos se tratan como si fueran partículas con carga de magnitud igual a la del electrón que paso de la banda de conducción, pero con signo positivo(es debatible que en vez de usar el término hueco se puede hacer todo el desarrollo con el término $N - 1$ electrones para explicar la ausencia de los electrones en vez de usar hueco, si bien se puede hacer la gran parte de desarrollo de la teoría de semiconductores, se ha adoptado este concepto por cuestiones de simplicidad y de que es totalmente equivalente con el desarrollo de ausencia de electrones).

II.1.5 Absorciones ópticas para transiciones no excitónicas

La absorción óptica para las transiciones entre banda de valencia y la de conducción, está relacionada con la función de onda del pozo cuántico de los electrones de la sub-banda de conducción n y los huecos de la sub-banda de valencia m , $G_n^c(z)$ y $G_m^v(z)$, de la forma:

$$\alpha_{nm}(\hbar\omega) \sim \sum_k |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{cv}^{nm}| \delta(E_{cv}^{nm}(k) - \hbar\omega) \quad 2.4$$

donde

$$\mathbf{P}_{cv}^{nm} = \langle u_{c0} | M | u_{v0} \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dz G_n^c(z) \cdot G_m^v(z) = \mathbf{P}_{cv} I_{nm} \quad 2.5$$

donde \mathbf{e} es la polarización de la luz incidente, \mathbf{P}_{cv} es la matriz de elementos entre las bandas del material, I_{nm} es la integral de superposición entre las funciones envolventes de las sub-bandas de valencia y de conducción, y tenemos que:

$$E_{cv}^{nm}(k) = E_c^n(k) + E_v^m(k) + E_{gap} \quad 2.6$$

la forma $\alpha_{nm}(h\omega)$, está caracterizada por un salto en la absorción en $E_{cv}^{nm}(0)$ que continua con una magnitud constante a altas energías, Esta forma de la absorción surge cuando se suma sobre los estados del espacio k en la ecuación 2.4 que para el caso de estados en 2D (de dos dimensiones) es característica por una densidad de estados constante [20]. Para el caso de hilos y puntos cuánticos, las expresiones son similares con la excepción de que la función de onda se restringe dependiendo la dimensionalidad del sistema, además que las densidades de estados exhiben las características propias de cada dimensionalidad [21]. Lo relevante es que el coeficiente de absorción se relaciona con el momento dipolar y finalmente con las funciones que describen a los electrones en las bandas de valencia y conducción, cuya descripción está contenida en los diagramas de bandas, se verá que, al aplicar un campo eléctrico, la distribución de estados cambia y eso induce cambios en la absorción que serán aprovechados por PR para medir estos puntos críticos en la distribución de estados. Estos saltos se verán más claros ya que aparecerán como puntos críticos de las derivadas de reflectancia.

III MÉTODOS SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN

III.1 MÉTODO DE SÍNTESIS

En el presente trabajo se utilizan muestras de la familia de nitruros crecidas en el equipo C21 RF-MBE en el Laboratorio de Epitaxia por Haces Moleculares del Departamento de Física del Centro de Estudios Avanzados del IPN por el Dr. Máximo López López y la Dra. Yenny Casallas.

Se mencionarán algunos puntos esenciales de la técnica de crecimiento de epitaxia por haces moleculares (mejor conocida como MBE por sus siglas en inglés, Molecular Beam Epitaxy). El impulso de la nanotecnología está asociado al desarrollo de sofisticadas técnicas de fabricación que dan acceso a las escalas donde nuevos fenómenos físicos cobran relevancia. En el caso del crecimiento cristalino de materiales semiconductores, la epitaxia por haces moleculares permite el crecimiento de capas cristalinas con control del espesor a nivel de monocapa atómica (ML del inglés, monolayer) y por ende la fabricación de estructuras avanzadas para el estudio de la física en la escala nanométrica.

El desarrollo de la técnica MBE comienza en la década 1970 con los trabajos de Alfred Y. Cho [22]. La interacción de haces moleculares o atómicos con la superficie de un sustrato en un entorno de ultra alto vacío (UHV, ultra high vacuum) permite el crecimiento de capas epitaxiales de semiconductor de alta calidad cristalina con un control muy preciso del espesor y composición. Los haces moleculares son generados en célula de efusión a partir de materiales de alta pureza. En UHV el flujo se mantiene en régimen molecular, esto es, el recorrido libre medio de las moléculas es mayor que las dimensiones de la cámara de vacío, concretamente la dimensión relevante en un reactor MBE es la distancia entre las células efusión y el sustrato. Por lo que los haces moleculares son altamente direccionables, no interaccionan antes de alcanzar el sustrato y además pueden ser interrumpidos de manera muy rápida y controlada [23].

Desde el comienzo, la técnica MBE ha impulsado la investigación en el campo de los semiconductores y la fabricación de dispositivos optoelectrónicos [24]. Hoy en día es usada en el crecimiento de semiconductores elementales del grupo IV(Si,Ge) y semiconductores

compuestos III-V (GaAs, AlAs, InAs, GaP, AlP, InP, GaSb, AlSb, InSb, GaN, AlN, InN) y II-VI (ZnSe, ZnTe, CdSe, CdTe) entre otros materiales principalmente para investigación y desarrollo.

El crecimiento mediante MBE de materiales semiconductores del grupo III-V, grupo a la que pertenecen el GaN que es el estudiado en este trabajo de tesis, se basa en los principios del método conocido como el método de las tres temperaturas de Günther [25]. Los semiconductores del grupo III-V presentan una alta tasa de disociación en su evaporación y a una temperatura dada el elemento del grupo III tiene presiones de evaporación mucho menores que el elemento del grupo V, por esto se emplean células de efusión independientes para cada elemento por su grupo (III: Ga, In o Al y V: As, P o Sb) y se debe cumplir la siguiente condición $T_V < T_S < T_{III}$, donde T_S , T_V y T_{III} se refieren a la temperatura del sustrato, de la fuente del elemento del grupo V y la fuente del elemento del grupo III. En estas condiciones todos los átomos del elemento del grupo III se condensan en la superficie del sustrato, en cambio los átomos del grupo V son re-evaporados si no son incorporados a la red cristalina del semiconductor. Esta situación se obtiene, si se suministra elementos del grupo V en exceso, la relación al flujo del elemento del grupo III. La estequiometría (es el cálculo de las relaciones cuantitativas entre los reactivos y productos en el transcurso de una reacción química) de la capa depositada se mantiene ya que el exceso del elemento del grupo V puede ser reevaporado. En cambio, si depositamos el elemento del grupo V en defecto, en respecto al flujo del elemento del grupo III, el exceso del elemento del grupo III no incorporado no puede ser reevaporado, dando lugar a la formación de gotas (droplets) metálicas del elemento del grupo III en la superficie del sustrato.

Esto es una de bastantes cosas que se tienen en consideración cuando se sintetiza por MBE.

La síntesis usando MBE se realizan a temperaturas de crecimiento relativamente bajas, en cámaras de alto vacío que tiene y, lo que permite que al mismo momento en que se crecen los materiales se puede ir monitoreando este proceso. Normalmente dentro de la cámara de vacío se hacen el estudio de reflexión y difracción de electrones de alta energía (RHEED), microscopía de exploración por tuneamiento (STM). Estas dos técnicas de caracterización in situ hace que sea posible controlar el crecimiento con una precisión de capa monoatómica.

Así se logra obtener una excelente interfaz y muestras de muy alta calidad mediante este método.

MBE al ser un proceso epitaxial que implica el uso de haces moleculares con una superficie cristalina (al cual se denomina lo que es nuestro sustrato) bajo condiciones de alto vacío (10^{-11} Torr). En un proceso epitaxial, el sustrato juega un papel importante aquí generalmente es una oblea hecha de un material que es un solo cristal y de alta calidad forma una oblea la cual actúa como semilla del cristal. Estos haces se crean mediante la vaporización de los materiales precursores, generalmente los elementos en alto grado de pureza. Estos materiales se alojan en celdas individuales que al ser calentados crean los haces de los distintos materiales, son calentados en sus cámaras correspondientes son creados mediante la vaporización del material en cada celda al vaporizarse sale por un pequeño orificio por eso salen colimadas, ya que el vapor sale a un ambiente de alto vacío hace que las moléculas puedan viajar balísticamente varios metros sin colisionar hasta el blanco que es el sustrato [19].

Es común que se tengan muchas celdas para que se tengan los haces de vapores elementos necesarios para la síntesis de crecer las muestras de un material específico, así, entonces por eso el método MBE permite la fabricación precisa de heteroestructuras semiconductoras obteniendo películas delgadas de una fracción de micra hasta por debajo de una monocapa. Aunque la técnica es costosa y lenta ya que su velocidad de síntesis es de crecer $1 \mu\text{m/hr}$ es una que nos permite gran control sobre lo que se desea sintetizar.

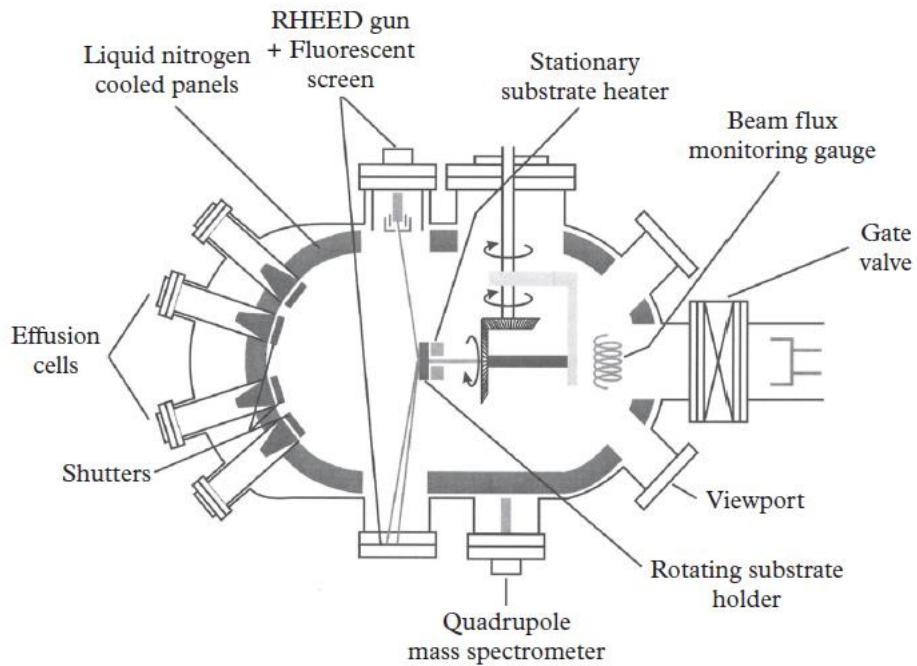


Figura III-1 Diagrama esquemático de una máquina típica de MBE. El sistema de cámara de acero inoxidable tiene al menos un vacío de 10^{-11} Torr, las cámaras de efusión lanzan haces colimados hacia la montura rotante donde está el sustrato, el haz está siendo calibrado constantemente con un indicador de iones, el RHEDD y la pantalla fluorescente monitorean cuando se puede seguir a la siguiente capa de la muestra, ya que no se debe perder la presión en ningún punto del proceso de síntesis todos los elementos de MBE están dentro de la cámara de vacío [22]



Figura III-2 fotografía del sistema MBE del laboratorio del Cinvestav

Las etapas más importantes del proceso de crecimiento por MBE:

- adsorción de los átomos o moléculas de los elementos constituyentes en la superficie del sustrato.
- difusión superficial y disociación de las moléculas adsorbidas.
- reacción entre los constituyentes e incorporación en la red cristalina del sustrato o de la capa ya crecida.
- desorción termina de las especies no incorporadas en la red.

Las principales partes que conforma el MBE son:

Celdas Knudsen- Es donde el material se evapora, en el interior se encuentra un crisol (comúnmente de PBN) que se calienta con un filamento calefactor. La temperatura del crisol se mide con un termopar y se estabiliza empleando técnicas PID (Proportional-Integral-Derivate).

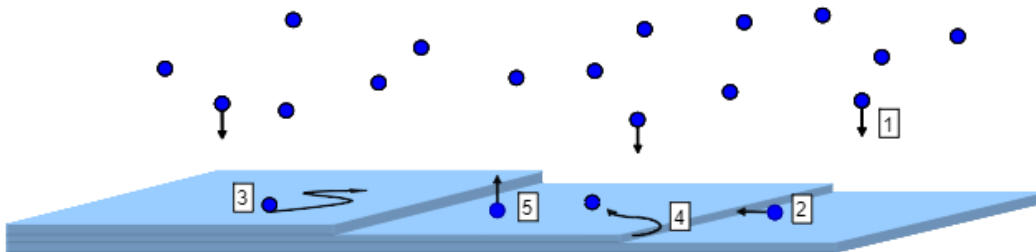


Figura III-3 Representación esquemática de los principales procesos que ocurren en la superficie durante el crecimiento mediante epitaxia de haces moleculares: (1) llegada de átomos, (2) incorporación al cristal, (3) difusión, (4) descomposición y (5) desorción [26] .

Medidor de flujos- Este medidor es necesario para estimar el número de átomos que llegan al sustrato por unidad de tiempo y unidad de superficie en función de la temperatura de las diferentes celdas Knudsen, se emplea una sonda Bayard-Alpert retráctil. La presión de haz equivalente se mide colocando la sonda, en la posición que ocupara el sustrato en la cámara de crecimiento.

El manipulador- Este elemento permite rotar y calentar el sustrato durante el crecimiento. La rotación es importante porque mejora notablemente la homogeneidad de las muestras, Las velocidades de rotación varían entre 60-120 rpm.

Y las técnicas de caracterización in-situ Como lo es el sistema RHEED (por sus siglas en ingles reflection high-energy electron diffraction) conocida como difracción de electrones de alta energía en incidencia rasante.

Otros elementos de mucha importancia son la cámara de introducción, la fuente de plasma, el sistema de refrigeración de nitrógeno líquido y el panel de control electrónico.

III.2 CARACTERIZACIÓN

Se tiene que hay diversas técnicas experimentales para caracterizar semiconductores, en el presente trabajo nos centraremos en la caracterización óptica de los mismos mediante las técnicas de reflectancia y fotoluminiscencia, así haremos una breve descripción de este par de técnicas que son muy empleadas, haremos más hincapié en fotorreflectancia porque es la que nos llevó a resultados más interesante en el presente trabajo de tesis.

Primero hablemos de luminiscencia, esta se refiere a la emisión de radiación electromagnética debida a la recombinación de los excesos de huecos y electrones generados por excitación externa. El requisito principal para la luminiscencia es que el sistema no esté en equilibrio, de acuerdo con el modo por el cual se excita hay diferentes tipos de luminiscencia:

Fotoluminiscencia (PL): Excitación de portadores de carga por incidencia de fotones (i.e. Laser o alguna otra fuente de luz).

Cadotoluminiscencia (CL): Excitado por la incidencia de electrones (i.e. El laser de electrones de un microscopio de barrido).

Electroluminiscencia (EL): Los portadores de carga son colocadas mediante la aplicación de un campo eléctrico.

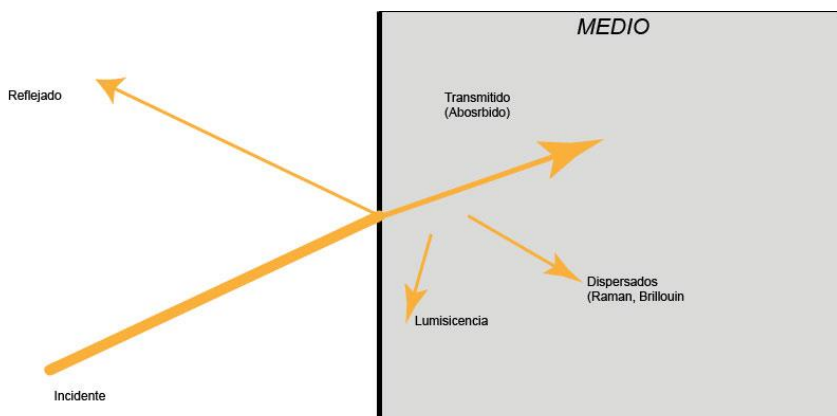


Figura III-4 Diagrama que muestra los principales procesos ópticos en una transición de un medio a otro, en este caso se asume que el haz incidente llega la superficie desde el vacío.

III.2.1 Fotoluminiscencia

La fotoluminiscencia (PL) es la emisión de luz de la materia debido a la absorción de radiación electromagnética, es luminiscencia que es provocada mediante foto-excitación. Después de que un electrón es excitado, pueden ocurrir varios procesos de relajación en los cuales los fotones son re-radiados. El tiempo entre la absorción y la emisión varía; en un rango de femtosegundos para emisiones que involucran un electrón en un semiconductor, milisegundos en un proceso de fosforescencia en sistemas moleculares y hasta minutos u horas en situaciones particulares. Esta técnica es importante para conocer la pureza y calidad de un cristal de semiconductores como GaN y para la cuantificación del desorden presentado en el sistema [27].

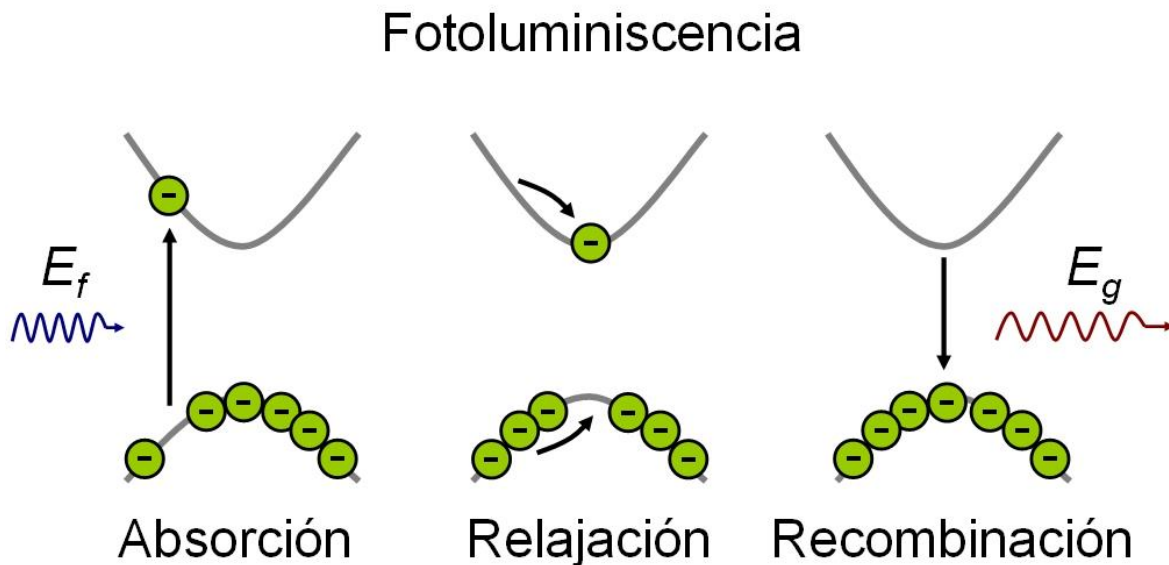


Figura III-5 proceso esquemático de fotoluminiscencia en un semiconductor [28].

En pocas palabras la fotoluminiscencia es la emisión electromagnética inducida por una excitación óptica de una muestra producida por una fuente de luz externa. En la fotoluminiscencia convencional, lo que se busca es medir el espectro de emisión de la muestra bajo ciertos parámetros fijos de la radiación primaria o de excitación. En esta concepción, la medición del espectro es determinado principalmente por la magnitud de la oscilaciones y tiempo de vida de estos estados radiactivos con la energía cerca de los límites de absorción e indirectamente por el proceso de relajación de los estados excitados. Existe

otra forma de hablar sobre la fotoluminiscencia que es fotoluminiscencia de excitación (PLE), el espectrómetro es configurado para detectar la emisión de fotones con una energía que es específico de la muestra, la emisión de la muestra es graficada como función de la energía de los fotones de excitación del material, la técnica PLE nos arroja información de la magnitud de la oscilación y de la densidad de estados sobre los límites de absorción fundamentales, más sin embargo, no proporcionar información sobre los tiempos de vida de estos estados.

En un arreglo experimental común de PL, es tener un material excitado con una fuente de luz con una energía mayor a la energía del gap energético. Ya que los fotones son absorbidos, se forman pares electrón-hueco con un cierto momento \mathbf{K} en la banda de conducción y de valencia respectivamente, La excitación lleva la energía y el momento hacia donde gap energético es mínimo. El proceso finaliza con la recombinación de los huecos y bajo la emisión de fotones.

Para este proceso es de importancia hablar sobre los excitones, un electrón al ser excitado subiendo a la banda de conducción desde la banda de valencia y el hueco que deja atrás el electrón, al tener carga opuesta, interacciones con él, atrayéndolo a través de la fuerza de Coulomb, de forma que quedan ligados entre sí, siendo este sistema resultante a lo que llamamos excitón y se da únicamente en materiales semiconductores y aislantes. El concepto de excitón fue propuesto por Frenkel en el año 1931 [29]. Es importante este concepto ya que el excitón libre, es la excitación de un electrón el cual se encuentra relacionado con el movimiento de electrones y huecos, al ser un estado ligado de un par electrón-hueco, la carga neta es cero por lo que no es portador de carga, pero si lo es de energía. Existen excitones más complejos llamados los excitones de transferencia de carga y el excitón de Wannier-Mott.

En semiconductores, para el caso de fotoluminiscencia (PL) hay dos clasificaciones, fotoluminiscencia intrínseca y extrínseca. La fotoluminiscencia intrínseca principalmente ocurre por las transiciones radiativas banda a banda en semiconductores de alta pureza incluso a temperatura relativamente alta, donde por absorción de un electrón de energía mayor al band gap E_G , provocando el proceso que se explicó anteriormente, véase figura 3.6a. La transición banda a banda que ocurre en semiconductores de band gap indirecto como

lo son el silicio o el germanio, necesitan la asistencia de un fonon, por lo que la eficiencia de recombinación radiativa para los semiconductores de band gap directo es mayor dado que no necesitan asistencia de este fonon, así al ser más eficiente la recombinación radiativa en materiales de gap directo estos son usados ampliamente para la fabricación de LEDs y diodos laser.

A temperaturas bajas, un par electrón-hueco excitado puede formar un excitón libre (FE) o un excitón de Wannier-Mott a través de su fuerza de coulomb como se observa en la figura 3.6d, Y de esa forma PL ocurre mediante la recombinación excitónica en lugar de una transición de banda a banda en un semiconductor. Además de fotoluminiscencia de excitón libre, la recombinación de varios tipos de excitones, como el excitón ligado, el polarón excitónico, el excitón auto atrapado (STE) y la molécula excitónica, tienen lugar a bajas temperaturas. Los excitones juegan un papel aún más importante en los semiconductores. Pozos cuánticos, hilos y puntos cuánticos, donde la fotoluminiscencia excitónica puede ser observada incluso a temperatura mucho más altas, esto debido al confinamiento cuántico que provoca un aumento de la energía de enlace de excitones [30, 31].

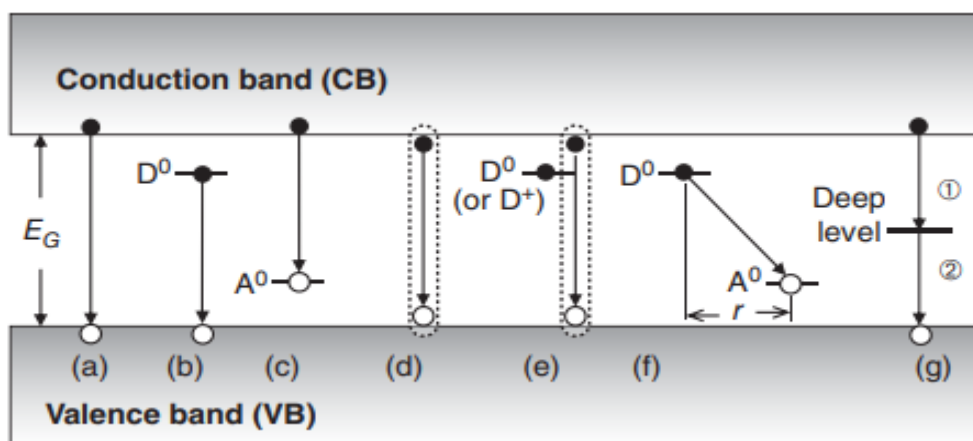


Figura III-6 esquema de procesos de recombinación radiativa en semiconductores. (a) recombinación de e-h de banda a banda; (b) transición de donante neutro (D^0) a banda de valencia (VB); (c) transición de banda de conducción (CB) a aceptor neutro (A^0); (d) recombinación radiativa de excitón libre (FE); (e) recombinación radiativa de excitón unido (BE), que está unido a D^0 ; también es posible la recombinación de un (BE) unido a un donante ionizado D^+ ; (f) recombinación del par donante-aceptor (DAP) con separación r ; (g) luminiscencia de defecto de nivel profundo; cualquiera de las dos transiciones 1 y 2 es radiativa. [32]

Ahora hablemos de la fotoluminiscencia extrínseca, es provocada principalmente por impurezas metálicas o defectos (que en la jerga científica comúnmente se les dice

activadores) intencionalmente incorporados dando como resultados cristales iónicos y semiconductores, los materiales que se hacen luminiscentes de esta manera se les denominan fósforos. La fotoluminiscencia extrínseca se produce entre portadores libres y estados de impureza o defectos, o dentro de los estados de las impurezas o defectos (centros de luminiscencia localizados).

Las impurezas más importantes son los donores y/o aceptores en un semiconductor. En semiconductores con incorporaciones intencionales de impurezas lo que se busca es colocar el donador como una trampa para el electrón que se recombina con el hueco que está en la banda de valencia como se observa en la figura 3.6b o el aceptor que por así decirlo atrapa un hueco que se recombina con un electrón de la banda de conducción como se ve en la figura 3.6c. También suele suceder que tengamos tanto los donores y aceptores ionizados o cargados, con una energía E_D para el donador y una energía para el aceptor de E_A , el par donador-aceptor (DAP) pueden ocurrir recombinaciones como se muestra en la figura 3.6f. hay una distancia DAP que es de considerar, ya que cuando la separación r entre D^+ y A^- es mucho más grande que la dimensión interna, es decir, el radio de Bohr efectivo de D^0 o A^0 . Así se da el siguiente proceso un electrón excitado de la banda de conducción se enlaza con el donador y lo neutraliza $D^+ \rightarrow D^0$ luego un hueco libre se enlaza con el aceptor $A^- \rightarrow A^0$ y finalmente se hace la transición banda a banda quedando tanto el aceptor como el donador neutros ambos, luego al emitir el fotón regresamos al siguiente caso $D^0 + A^0 \rightarrow D^+ + A^- + \hbar\omega$, pero también ahora tenemos una energía potencial que nos da como resultado una fuerza tipo coulomb $-\frac{e^2}{\kappa r}$ donde κ es la constante dieléctrica del material [33], por lo que $\hbar\omega$ tiene que ser mayor que la diferencia de energía entre los niveles de donador y aceptor por $\frac{e^2}{\kappa r}$, $\hbar\omega = E_G - E_D - E_A + \frac{e^2}{\kappa r}$, esto es interesante ya que r solo puede ser múltiplos de la constante cristalina, entonces esto da lugar a una larga serie de líneas nítidas en la parte de mayor energía del fotón en el espectro PL.

III.2.2 Fotorreflectancia

Como ya se describió en el apartado del marco teórico, un semiconductor tiene un gap de energía entre 0 y 4 eV, un fotón con una energía igual o mayor puede excitar el estado del electrón llevándolo de la banda de valencia a la de conducción, el espectro óptico del semiconductor es de suma importancia ya que nos brinda información de las propiedades ópticas y electrónicas del material. Además, el fotón puede interactuar con las vibraciones de la red cristalina del material, con electrones localizados en las impurezas del material, en regiones activas como lo son las nanoestructuras que se crean dentro de dicho material, estas estructuras se inducen su crecimiento en su diseño, con el propósito de cambiar las propiedades ópticas del material.

Ahora enfoquémonos en la llamadas espectroscopia de modulación, en la cual se aplican pequeñas perturbaciones periódicas a una propiedad física, ya sea al sistema o a la muestra.

así la modulación se puede conseguir mediante varios mecanismos como lo son el campo eléctrico (electromodulación), la temperatura (termo modulación), la deformación (tribomodulación), etc. En el caso de electromodulación esta se puede hacer de manera directa empleando un arreglo tipo capacitor, en donde se hace una variación del campo eléctrico mediante la aplicación de un voltaje o bien modulando el campo eléctrico mediante la aplicación de un haz de luz vía el efecto electro-óptico, en este cuando la modulación es mediante luz se llama fotorreflectancia (PR). En PR el campo eléctrico modula solo la superficie de la muestra o la interfaz por la generación de pares electrón-hueco (PEH). Este campo eléctrico superficial se forma al estar el semiconductor expuesto a condiciones ambientales, su superficie es atacada por el aire (oxígeno) formando una película de óxidos principalmente, sobre dicha película pueden absorberse átomos o moléculas del ambiente generando un conjunto de estados complejos electrónicos localizados o trampas superficiales, estas cargas crean una región de carga especial, la cual es responsable de la existencia de un campo eléctrico intrínseco y estados posibles dentro del band gap del material, similar a como lo harían impurezas, pero localizadas principalmente en la superficie, creando así una densidad de estados superficiales que son ocupados por electrones del interior del cristal.

Debido a la presencia de electrones en los estados superficiales se crea una barrera de potencial para los otros electrones que lleguen a la superficie, esto provoca una curvatura en las bandas de conducción y valencia cerca de la superficie, y por la alta cantidad de estados superficiales se modifica el nivel de Fermi. En fotorreflectancia se emplea un láser de mayor energía que el band gap de la muestra, este siendo interrumpido mecánicamente (por ejemplo, con un chopper óptico), de tal forma que cuando el chopper óptico se interpone, es decir cuando el láser no incide en la muestra, las bandas energéticas están curvadas por los estados superficiales están por encima del nivel de Fermi. Ahora cuando el láser incide en la muestra, lo que obtenemos es el proceso de pares electrón-hueco foto inducidos que son separados por el campo generado en la superficie, es decir, que los electrones de la banda de valencia son excitados y pasan a la banda de conducción. Los huecos que quedan en la banda de conducción neutralizan electrones de la superficie provocando que la barrera de potencial disminuya, aplanando las bandas de energía en la región de carga especial y con esto cambiando la reflectividad.

Se espera que este proceso sea más rápido que la frecuencia de la modulación, lo que tiene como resultado final, un cambio en la reflectividad la cual es sensible a las transiciones de los puntos críticos de la zona de Brillouin, con lo que el espectro resultante mostrará señales bien definidas del tipo derivada, además de que el ruido es eliminado casi completamente.

Los cambios diferenciales en la reflectividad pueden ser relacionados con una perturbación de la función dieléctrica compleja de la siguiente forma:

$$\frac{\Delta R}{R} = \alpha \Delta \varepsilon_1 + \beta \Delta \varepsilon_2 \quad 3.1$$

donde R es la reflectividad, $\Delta \varepsilon_1$ y $\Delta \varepsilon_2$ son los cambios de la función dieléctrica compleja con $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$, α y β son los coeficientes de Seraphin [34] que son expresados como:

$$\alpha = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \epsilon_1}; \quad \beta = \frac{1}{R} \frac{\partial R}{\partial \epsilon_2} \quad 3.2$$

Cuando la vecindad del band gap de un material se considera que $\beta \approx 0$, en el estudio de heteroestructuras se tiene que considerar los dos términos, tanto $\alpha \Delta \epsilon_1$ como $\beta \Delta \epsilon_2$ debido a los efectos de interferencia.

III.2.2.1 Función dieléctrica modulada

La constante dieléctrica nos da la respuesta del material ante un campo eléctrico, y la manera usual de calcularlo es a través de la polarización del medio y la corriente que este induce.

así en el sólido, al estar un campo eléctrico presente se induce una polarización que determina el vector desplazamiento eléctrico y por ende la función dieléctrica como sigue:

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon E \quad 3.3$$

ahora bien, el campo eléctrico que oscila dentro del material induce una polarización que también oscila, y que este cambio en la polarización produce una corriente:

$$J = \frac{\partial P}{\partial t} \quad 3.4$$

la cual, asumiendo campos armónicos se tiene que:

$$J = -i\omega P \quad 3.5$$

por lo que se tiene que el vector desplazamiento para campos armónicos queda como:

$$D = \epsilon_0 E + \frac{i}{\omega} J \quad 3.6$$

así para calcular la constante dieléctrica se tiene que calcular la corriente que se induce en ante la presencia de un campo eléctrico.

Ahora como se relacionan estas cantidades con las mediciones que se pueden hacer en el laboratorio y en particular a través de la reflexión, la respuesta simple es a través del índice de refracción y el coeficiente de absorción [35].

Así, en el modelo de sólido más simple que es isotrópico y homogéneo se define un índice de refracción complejo $N = \eta + i\rho$. La parte real η es también conocida como índice de refracción y ampliamente documentada en la literatura, la parte imaginaria ρ se conoce como coeficiente de extinción.

Al pasar la luz (considerándose como un flujo de fotones) de un medio a otro y ser absorbida, va de una posición r_1 a una r_2 , y el coeficiente de absorción está definido por:

$$I(r_2) = I(r_1) \exp(-\alpha|r_2 - r_1|) \quad 3.7$$

donde $I(r_i)$ denota la intensidad en r_i .

El coeficiente de absorción está relacionado con α, ρ, ω y c de la siguiente forma:

$$\alpha = \frac{4\pi\rho}{\lambda_0} = \left(\frac{\omega}{\eta c}\right) \varepsilon_2(\omega) \quad 3.8$$

donde λ_0 es la longitud de onda en el vacío y c la velocidad de la luz en el vacío [19].

Por otro lado, la función dieléctrica se relaciona con el índice de refracción complejo de la forma:

$$\varepsilon(\omega) = N^2 \quad 3.9$$

entonces

$$\varepsilon_1(\omega) = \eta^2 - \rho^2; \quad \varepsilon_2(\omega) = 2\eta\rho \quad 3.10$$

generalmente $\varepsilon_2(\omega)$ es el término relacionado con las transiciones electrónicas, y la manera más común para determinarlo es mediante mediciones de absorción, en contraste, en reflectancia con incidencia normal, las transiciones electrónicas dependen de ambas partes, la función dieléctrica de la manera:

$$R = \left(\frac{N - 1}{N + 1} \right)^2 \quad 3.11$$

por otra parte, las partes real e imaginaria de la función dieléctrica están relacionadas mediante las relaciones de Kramers-Kroning:

$$\varepsilon_1(\omega_0) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\omega \cdot \varepsilon_2(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega \quad 3.12$$

$$\varepsilon_2(\omega_0) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(\omega) - 1}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega \quad 3.13$$

Intentemos ahora ver cómo es que se puede encontrar esta constante dieléctrica. Esto lo haremos a través de encontrar la corriente que se induce al estar el campo eléctrico de la onda incidente sobre el material. Esta corriente en la aproximación de 1-electron en presencia de un campo eléctrico se puede obtener a través de la solución de la función de onda en donde se incluye el campo eléctrico de la onda además del potencial del cristal. Este campo eléctrico se introduce a través de los potenciales vectoriales el cual en la norma de Coulomb se puede escribir como:

$$E = -\frac{\partial A}{\partial t} \quad 3.14$$

aquí A es el potencial vectorial, (Jackson electrodynamics).

de este modo tenemos que la corriente que se induce por la presencia del campo eléctrico estaría dada por:

$$J(r, t) = \frac{ie\hbar}{2m} [\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*] - \frac{e^2}{m} A \psi^* \psi \quad 3.15$$

el término extra se debe al acoplamiento mínimo del potencial vectorial. En este caso la ecuación que debe de satisfacer la ecuación de onda está dada por:

$$\frac{1}{2m} [p + eA]^2 \psi + V\psi = \frac{i\hbar \partial \psi}{\partial t} \quad 3.16$$

así la manera de resolver este sistema en el sólido, hay que considerar que el campo eléctrico es una perturbación al hamiltoniano del cristal, con lo que es posible mediante perturbación dependiente del tiempo encontrar esta función de onda.

Ahora bien, aquí la idea es que al final nos quedamos con términos que son una solución, que es la corriente y después se ocupa la transformada de Fourier para obtener está en el espacio de frecuencia, y nos quedamos hasta términos lineales en la amplitud del potencial vectorial, los cuales por la relación entre el campo eléctrico y el potencial, obtenemos la expresión final para la constante dieléctrica. Alternativamente uno puede pensar la interacción del sólido con campos eléctricos a través no de constante dieléctrica si no los índices de refracción y de absorción que nos dice como una onda electromagnética se propaga en el sólido. Aquí es más claro que la absorción está directamente relacionada con la corriente que se induce ya que es precisamente esta corriente la que disipa energía del campo electromagnético en el material y da como consecuencia la absorción de este. En el sólido la relación de la corriente inducida con el campo eléctrico es mediante la conductividad, así la expresión más útil es la que me encuentra la constante dieléctrica en función de la transformada de Fourier de la corriente como [36]:

$$\begin{aligned} \varepsilon(E, \Gamma) = 1 + \frac{4\pi e^2 \hbar}{m^2 E^2} \int_{BZ} d^3 k \int_0^\infty dt |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2 \\ \times \exp \int_{-t/2}^{t/2} dt' \frac{i[E - E_{cv}(\mathbf{k}) + i\Gamma]}{\hbar} \end{aligned} \quad 3.17$$

donde Γ es el parámetro de ensanchamiento y se asume que tiene una forma lorentziana, \mathbf{P}_{cv} es el elemento de matriz de momento entre la banda de valencia y la banda de conducción y se asume que es independiente del momento k , de E_{cv} que es la diferencia de energías entre las bandas de valencia y conducción, y $E = \hbar\omega$ es la energía del fotón. En general esta función es compleja y está directamente relacionada con los coeficientes de absorción y reflexión del material [37].

III.2.2.2 Función de densidad de estados conjuntos

La relación entre ε_2 y la estructura de banda podemos establecerla, asumiendo que la absorción es la suma de las transiciones entre los estados electrónicos del mismo vector de onda k , separados por la diferencia de energía $E_c - E_v = \Delta E = h\nu$, con esto podemos tratar a ε_2 como:

$$\varepsilon_2 \sim \int_{BZ} \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2 \cdot \delta(\Delta E - \hbar\omega) d^3 k \quad 3.18$$

esta expresión es fácil de obtener de la ecuación (3.3), ya que lo que tenemos que hacer es extender el tiempo en la exponencial de la integral y reconocerlo como la delta de Dirac, considerando que el ensanchamiento de la transición $\Gamma = 0$. Si suponemos además que el elemento de matriz es el mismo para todos los pares de estados situados verticalmente uno encima del otro, independiente de su ubicación en la zona de Brillouin, podemos definir la función de densidad de estados $J(\Delta E)$ como

$$\rho(\Delta E) = \int_{BZ} \frac{2}{(2\pi)^3} \cdot \delta(\Delta E - \hbar\omega) d^3 k \quad 3.19$$

este sencillo conteo de estados en la zona de Brillouin, es la hipótesis de trabajo en el análisis de la estructura de banda. Entonces, ignorando la dependencia energética del elemento de la matriz:

$$\varepsilon_2 \sim \rho(\Delta E) \cdot |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2 \quad 3.20$$

una transformación de la integral de volumen (ecuación 3.19) en una integral de superficie, sobre la superficie $\Delta E = \text{constante}$. Muestra las propiedades de la función de densidad de estados conjuntos de una mejor manera. Esta transformación se puede ver como:

$$\rho(\Delta E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{\Delta E = cte.} \frac{ds}{|\nabla_k(\Delta E)|} \quad 3.21$$

donde ds es el elemento de superficie, en la superficie isoenergética $\Delta E = cte$ y $\nabla_k(\Delta E)$ es el gradiente de la separación entre los estados inicial y final en el espacio de momentos (espacio- K) [35].

III.2.2.3 Puntos críticos en las superficies isoenergéticas

La densidad de estados tiene singularidades donde $|\nabla_k(\Delta E)|$ es cero, a estas singularidades se les llama singularidades de Van Hove y a estos se les llama puntos críticos. Asumiendo que $k = 0$ es un punto crítico en el espacio tridimensional, $E(k)$ puede expandirse como función de k alrededor del punto crítico de la forma siguiente:

$$E(k) = E(0) + \alpha_1 k_1^2 + \alpha_2 k_2^2 + \alpha_3 k_3^2 + \dots \quad 3.22$$

las singularidades de Van Hove se clasifican según el número de coeficientes α_i negativos en la expresión. En un espacio tridimensional tenemos cuatro tipos de singularidades de Van Hove, llamadas M_0 , M_1 , M_2 y M_3 . Cuando los α_i 's son todos negativos, la singularidad M_0 que representa el mínimo en la separación de bandas E_{cv} . M_1 , M_2 son llamados puntos silla ya que los gráficos de energías contra el vector de onda asemejan una silla, estos se dan

cuando uno o dos de los α_i 's son negativos. Cuando los tres α_i 's son negativos se tiene un máximo en la separación de bandas E_{cv} y corresponden a la singularidad M_3 . Cabe resaltar que, para cada tipo de punto crítico, hay una forma de línea característica, lo que da una valiosa herramienta para la identificación de la estructura en los espectros ópticos que son observados experimentalmente [35].

La modulación de la posición espectral E_{gap} de un punto crítico, afecta a ε_2 a través de la función de densidad de estados conjunta $J(E_{gap}, \hbar\omega)$:

$$\frac{\Delta\varepsilon_2}{\Delta E_{gap}} = \frac{C}{\omega^2} \cdot \frac{\Delta\rho}{\Delta E_{gap}} \quad 3.23$$

donde C contiene el elemento de matriz y los parámetros de masa efectiva. La función de densidad de estados conjunta varía como la raíz-cuadrada de la distancia espectral de E_{gap} en los cuatro tipos de puntos críticos. Por lo tanto, la derivada con respecto de E_{gap} tiene una singularidad del tipo $(E_{gap} - \hbar\omega)^{-\frac{1}{2}}$ en el punto crítico.

III.2.2.4 Espectros de modulación de un cristal

Ahora bien, como el espectro de fotorreflectancia es en esencia la variación al variar el campo eléctrico de la muestra, es requerido que hagamos el análisis de cómo cambia la constante dieléctrica al tener un campo eléctrico. Empecemos por lo más simple, el hamiltoniano de un electrón libre el cual es $H_0 = \frac{p^2}{2m}$, que como podemos ver es invariante ante cualquier traslación, por lo que se conserva el momento del electrón $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ y la estructura de bandas de energía del electrón libre es $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ esta forma de la energía nos da parábolas.

En el caso de un fotón con momento $\mathbf{p}_f = \hbar\mathbf{k}_f$ y energía $E_f = \hbar\omega_f$ fuese absorbido a primer orden por un electrón, el momento de este último cambiaría de manera significativa, por lo que su energía y momento no podrían conservarse en este tipo de transición óptica.

Consecuentemente, la suma de las transiciones permitidas para cualquier energía finita del fotón, es decir la parte imaginaria de la función dieléctrica ϵ_2 es igual a cero, ósea que para un electrón libre la función dieléctrica es solamente real.

Ahora consideremos un electrón que se encuentra dentro de un cristal, el hamiltoniano nuevo tiene un término extra $H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(r)$, con esta forma podemos ver que sigue siendo invariante a traslaciones que se hagan dentro del cristal (ya que se considera un cristal como un arreglo “infinitamente periódico”). Para este caso, la conservación del momento del electrón se ve debilitada (un poco más difícil que se dé dentro del nuevo arreglo), y su momento $\hbar\mathbf{k}$ es un buen número cuántico cuando está dentro de un vector \mathbf{K}_n de la red recíproca la energía del electrón libre se divide en bandas de energía y la absorción óptica es posible a primer orden utilizando un vector de la red recíproca para que el momento del electrón se conserve.

En las técnicas de modulación se añade un término perturbativo al hamiltoniano, ya que la perturbación es provocada por el campo eléctrico \mathbf{F} y el término perturbativo en el hamiltoniano es $H' = e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$, por lo cual el hamiltoniano queda de la forma $H = \frac{p^2}{2m} + V(r) + H'$, para este caso la invariancia traslacional se pierde dado que el electrón es acelerado. Lo cual causa que el momento del electrón deje de ser un buen número cuántico en la dirección del campo, este campo eléctrico aplicado se puede ver como un cambio en el vector de onda del estado de Bloch de \mathbf{k} a $\mathbf{k} + \frac{e\mathbf{F}t}{\hbar}$, desde el punto de vista matemático, esta sustitución expresa el hecho que el campo eléctrico mezcla todas las funciones de onda que tienen componente a lo largo de la dirección del campo, por lo que la componente k a lo largo de la dirección no serán un buen número cuántico ya que el vector de onda en sistemas periódicos hace que, aun con campos eléctricos pequeños, muchas funciones de onda sean mezcladas y dichas mezclas dependen del tiempo por el parámetro t . Desde el punto de vista del modelo de partícula libre, el electrón está siendo impulsado sobre la curva de dispersión y su energía cambia continuamente, dado a la apariencia de estar siendo acelerado por el campo eléctrico.

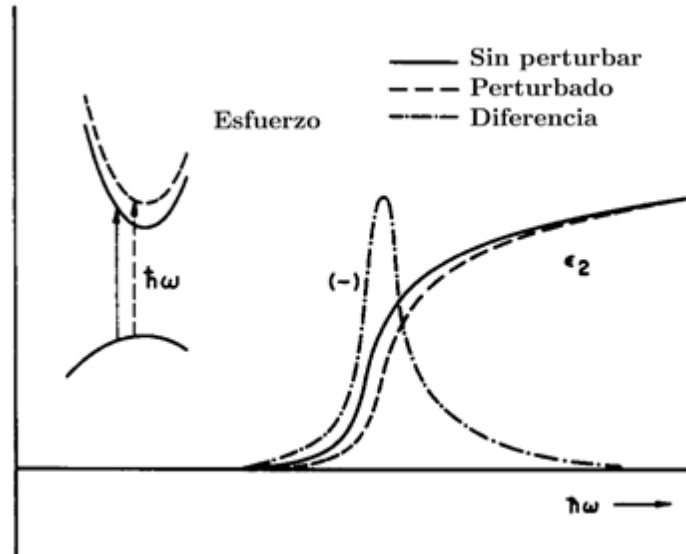


Figura III-7 Diagrama del cambio en la parte imaginaria de la función dieléctrica por modulación de la primera [38]

Retomamos la ecuación 3.17 que es la función dieléctrica para nuestras condiciones la cual es:

$$\begin{aligned} \varepsilon(E, \Gamma) = 1 + \frac{4\pi e^2 \hbar}{m^2 E^2} \int_{BZ} d^3 k \int_0^\infty dt |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2 \\ \times \exp \int_{-t/2}^{t/2} dt' \frac{i[E - E_{cv}(\mathbf{k}) + i\Gamma]}{\hbar} \end{aligned} \quad 3.24$$

si la condición de modulación es tal que la aceleración es pequeña, se puede simplemente hacer el remplazo de \mathbf{k} por $\mathbf{k} + \frac{eFt}{\hbar}$ en la expresión para la constante dieléctrica.

Aquí requerimos dos simplificaciones, la primera es considerar que el término P_{CV} es el mismo y que al estar en la vecindad de un punto crítico se tiene que la relación de dispersión es cuadrática, es decir que puedo hacer:

$$E_{CV} = E_{CV}(0) + \frac{1}{2\mu} k^2 \quad 3.25$$

aquí se puede cambiar y sustituir un tensor si no es isotrópico, pero dejémoslo simple. Si en esta expresión se hace el cambio \mathbf{k} por $\mathbf{k} + \frac{eFt}{\hbar}$

Es claro que el último término de la expresión se puede evaluar de una manera muy simple:

$$\exp \int_{-t/2}^{t/2} dt' \frac{i[E - E_{cv}(\mathbf{k}(t)) + i\Gamma]}{\hbar} \sim \exp \int_{-t/2}^{t/2} dt' \frac{i \left[E - E_{cv} \left(k^2(0) + k(0) \cdot \frac{eFt}{\hbar} + \left(\frac{eF}{\hbar} \right)^2 t^2 \right) + i\Gamma \right]}{\hbar}$$

por simetría el término lineal no sobrevive por lo que la expresión (3.24) se simplifica a:

$$\varepsilon(E, F, \Gamma) = 1 + \frac{iA}{E^2} \int_{BZ} d^3k \int_0^\infty dt \exp \left[\frac{i(E - E_{cv} - i\Gamma)t + i\Omega t^3/3}{\hbar} \right] \quad 3.26$$

donde $\Omega^3 = \frac{e^2 F^2}{8\mu\pi}$, $A = \frac{4\pi e^2 \hbar |\mathbf{e} \cdot \mathbf{P}_{cv}|^2}{m^2}$ y μ es la masa efectiva de la densidad de estados conjunta en la dirección del campo aplicado, el cual está relacionado con $\nabla_k(\Delta E)$ ($k = x, y, z$). La expresión 3.26 es conocida como la función de Airy [39].

Considerando que para campos pequeños o cuando el ensanchamiento homogéneo (Γ) es grande comparado con la dependencia temporal, es decir $\Gamma t \gg \Omega t^3$, podemos simplificar aún más la expresión anterior. Para este caso podemos expandir la exponencial que contiene Ω , tenemos $\exp\left(\frac{i\Omega t^3}{3}\right) \approx 1 + \frac{i\Omega t^3}{3}$, dando como resultado el límite de campo bajo de Aspnes:

$$\varepsilon(E, F, \Gamma) = 1 + \frac{iA}{E^2} \int_{BZ} d^3k \int_0^\infty dt \left(1 + \frac{i\Omega t^3}{3} \right) \exp \left[\frac{i(E - E_{cv} - i\Gamma)t}{\hbar} \right] \quad 3.27$$

ordenando los términos obtenemos:

$$\varepsilon(E, F, \Gamma) = 1 + \frac{iA}{E^2} \int_{BZ} d^3k \int_0^\infty dt \left\{ \exp \left[\frac{i(E - E_{cv} - i\Gamma)t}{\hbar} \right] + \frac{i\Omega t^3}{3} \exp \left[\frac{i(E - E_{cv} - i\Gamma)t}{\hbar} \right] \right\} \quad 3.28$$

donde el primer término de la integral representa la función dieléctrica sin perturbar, esto quiere decir que nuestro interés está en los siguientes términos, ya que el primer término es el sistema simple sin perturbar y la segunda parte de la integral representa el término perturbativo dependiente del campo. La dependencia temporal (t^3) en el término perturbativo puede ser diferenciado tres veces el término sin perturbar, bajo la integración respecto a E (y también con respecto a Γ o E_{cv}). Integrando la ecuación 3.28 obtenemos:

$$\begin{aligned} \varepsilon(E, F, \Gamma) = 1 + \frac{iA}{E^2} \int_{BZ} d^3k \frac{1}{E - E_{cv} + i\Gamma} \\ + \frac{2iA}{E^2} \int_{BZ} d^3k \frac{(\hbar\Omega)^3}{(E - E_{cv} + i\Gamma)^4} \end{aligned} \quad 3.29$$

ahora integrando la ecuación 3.17 llegamos que es de la forma:

$$\varepsilon(E, 0, \Gamma) = 1 + \frac{iA}{E^2} \int_{BZ} d^3k \frac{1}{E - E_{cv} + i\Gamma} \quad 3.30$$

de la ecuación 3.29 y de la ecuación 3.30 obtenemos que:

$$\Delta\varepsilon(E, F, \Gamma) = \varepsilon(E, F, \Gamma) - \varepsilon(E, 0, \Gamma) = \frac{2iA}{E^2} \int_{BZ} d^3k \frac{(\hbar\Omega)^3}{(E - E_{cv} + i\Gamma)^4} \quad 3.31$$

la cual es la forma funcional de la tercera derivada (TDF, del inglés, Third Derivative Functional Form) de Aspnes [40] el cual se puede escribir de manera compacta mas no sencilla como:

$$\Delta\varepsilon \sim \frac{d^3(E^2\varepsilon(E, 0, \Gamma))}{dE^3} \quad 3.32$$

el término t^3 surge directamente del hecho de que exista una curva de dispersión a lo largo de dirección del campo y por tanto un gradiente con respecto a \mathbf{k} , este gradiente hace que Ω sea finito en la ecuación 3.26. Con esta deducción, encontramos el hecho de que la forma de la perturbación rompa la invariancia traslacional, por lo que el electrón llega a ser acelerado por el campo. Esto es aproximadamente equivalente al esparcimiento de las transiciones verticales sobre un intervalo finito de momento inicial y final como se muestra en la figura 3.7 para campo pequeños, la mezcla de las funciones de onda será limitada cerca de las transiciones permitidas, las cuales eran originalmente verticales. Esto nos lleva a un espectro más complicado, en el cual se obtienen cambios de signos. Los dos cruces por el cero son característicos de una tercera derivada de la función dieléctrica sin perturbar como se muestra en la figura 3.8. Podemos pensar que la combinación hace por debajo del punto crítico se tenga una mayor absorción que la que se tiene si perturbar y lo mismo sucede para energía algo mayores que esta, sin embargo, para las transiciones originales que son verticales debido a que hay dispersión se espera que la absorción sea algo menor en ese punto, así tenemos dos puntos por arriba y al menos un punto por debajo, por lo que la diferencia de las dos curvas me da dos cruces.

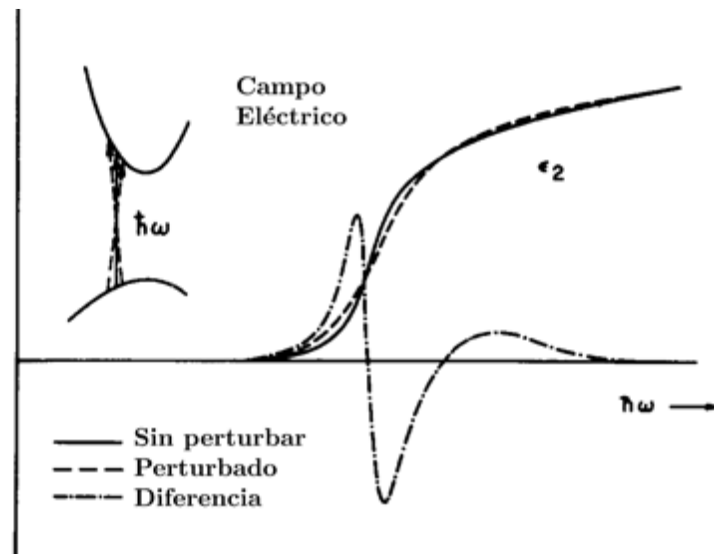


Figura III-8 Esquema del cambio en la parte imaginaria de la función dieléctrica para una modulación de tercera derivada y donde la periodicidad de red no se conserva.

III.2.3 Modelo simple parabólico de la densidad de estados

En una región cercana de los puntos críticos en la estructura de bandas puede ser reemplazada por un modelo parabólico simple, el cual es de gran ayuda en el análisis del espectro y en los parámetros de interés de la estructura de bandas. Esto es posible por la fuerte localización en el régimen de campo bajo de un punto crítico dentro de un rango de energía que no sobrepase varios parámetros de frontera y estas consideraciones son muy importantes para propósitos espectroscópicos.

Este modelo viene dado para los casos de cada arreglo, es decir por dimensiones, unidimensional, dos y tres dimensional ($D = 1,2,3$) de la manera siguiente:

$$D = 1 : \Delta\varepsilon^{ij} = \left(\frac{5i^{l-1}}{8}\right) \left(\left|\frac{2\mu_x}{\hbar^2}\right|^{\frac{1}{2}} K_y K_z\right) Q^{ij} F^2(E - E_{gap} + i\Gamma)^{-7/2} \quad 3.33$$

$$D = 2 : \Delta\varepsilon^{ij} = \left(\frac{2i^{l-2}}{3}\right) \left(\left|\frac{4\mu_x\mu_y}{\hbar^4}\right|^{\frac{1}{2}} K_z\right) Q^{ij} F^2(E - E_{gap} + i\Gamma)^{-3} \quad 3.34$$

$$D = 3 : \Delta\varepsilon^{ij} = \left(\frac{\pi i^{l-3}}{4}\right) \left(\left|\frac{8\mu_x\mu_y\mu_z}{\hbar^6}\right|^{\frac{1}{2}}\right) Q^{ij} F^2(E - E_{gap} + i\Gamma)^{-5/2} \quad 3.35$$

dónde:

$$Q^{ij} = \frac{e^4 \hbar^4 \mathbf{P}^2}{8\pi\mu_{\parallel} E^2 m^2} \quad 3.36$$

l es el orden del punto crítico, que es igual al número de masas efectivas negativas μ_x, μ_y, μ_z ; K_y, K_z representan los espacios k que no están incluidos en la dimensionalidad del modelo D ; μ_{\parallel} es la masa reducida entre las bandas evaluada en la dirección del campo.

Algo que pasa en general, es que el espectro de fotorreflectancia muestra una forma de línea simple con un extremo negativo y otro positivo. Esta forma de línea se puede aproximar mediante perturbaciones [35], la cual describe al espectro modulado de la reflectividad como:

$$\frac{\Delta R}{R} = \Re(C e^{i\theta} \Delta \varepsilon) \quad 3.37$$

el cambio en el campo inducido en la función dieléctrica $\Delta \varepsilon$, esta dado por:

$$\Delta \varepsilon \sim (E - E_{gap} + i\Gamma)^{-n}, \quad n \geq 2 \quad 3.38$$

Aspnes y Rowe determinaron un método para ajustar las formas de línea de los experimentos para determinar la energía entre las bandas con alta precisión. Ellos propusieron un método simple de tres puntos, definiendo el parámetro de asimetría como [35]:

$$\rho = -\left(\frac{\Delta R}{R_B}\right)\left(\frac{R_A}{\Delta R}\right) > 0 \quad 3.39$$

donde A y B son los extremos de mayor y menor energía respectivamente, en el espectro $\Delta R/R$. La posición de E_{gap} con respecto al extremo de energía E_A viene dado únicamente en términos de ρ de la manera siguiente:

$$E_{gap} = E_A + (E_B - E_A)f(\rho) \quad 3.40$$

donde $f(\rho)$ es trazada en la figura 3.9 como una función del parámetro de asimetría ρ , para $n = 2.0, 2.5$ y 3.0 . El valor $n = 3.0$, correspondiente a un punto crítico dos-dimensional también se ha visto en la literatura que modela de manera precisa la descripción de puntos críticos tres-dimensional con grandes relaciones de masa y bordes de absorción modificados por la interacción Coulombiana.

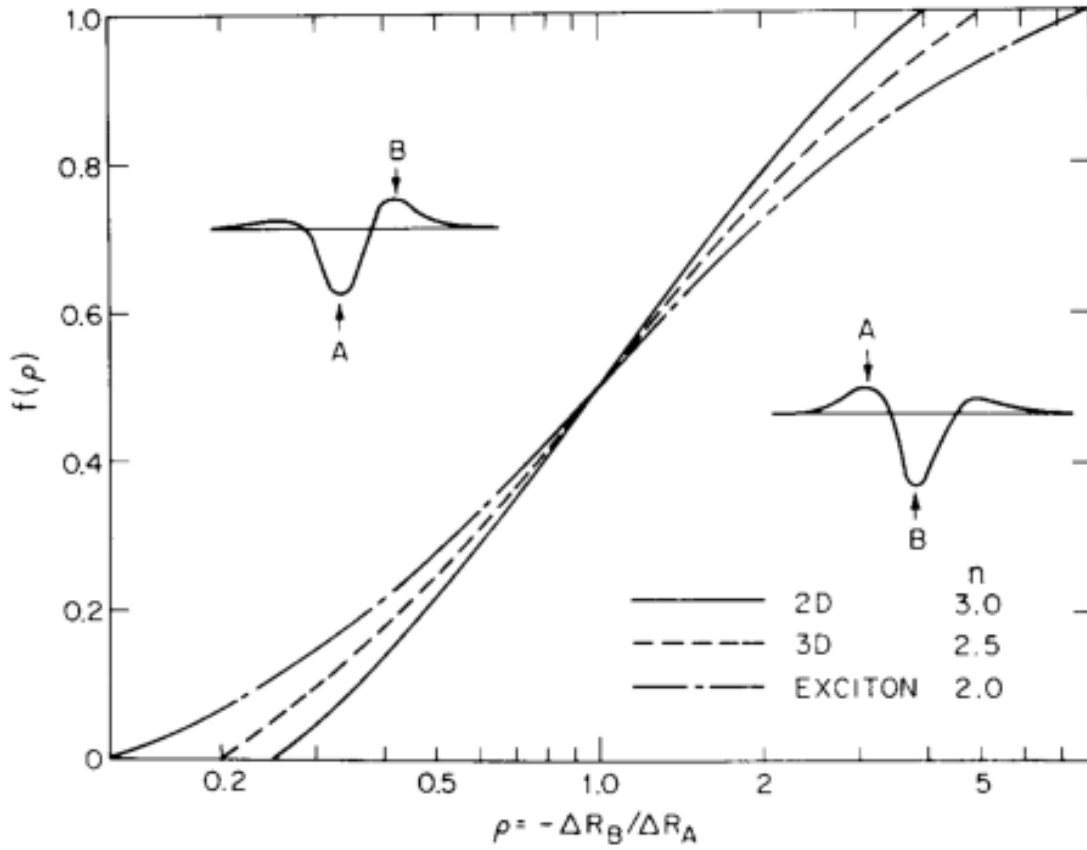


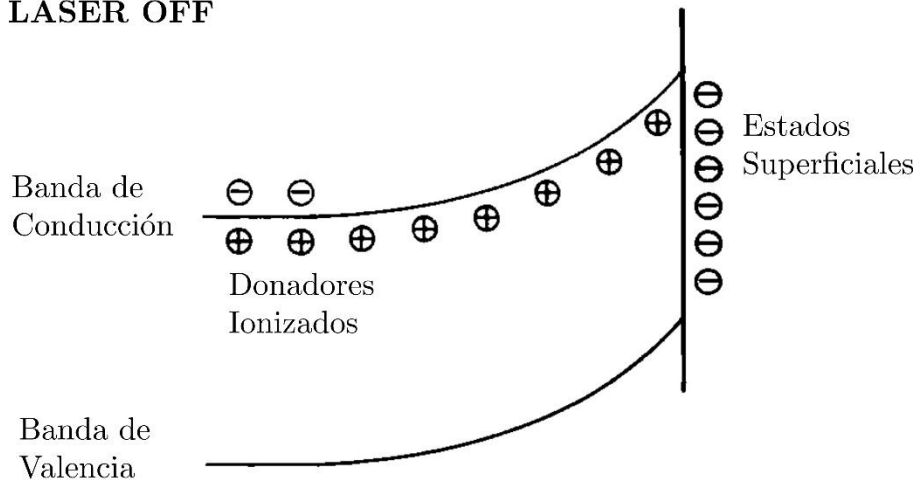
Figura III-9 Función $f(\rho)$ en términos del parámetro ρ , donde se muestra el parámetro de escala para tres diferentes valores de n [35]

Los valores de $n = 2.0, 2.5$, describen la modulación de excitones discretos y en general puntos críticos tres-dimensional, respectivamente. Dado que las curvas para los tres valores de n son muy parecidas, es dado que el método de los *tres puntos* es independiente del modelo físico que se tome para la representación de la transición, esto implica que la energía de los puntos críticos y los parámetros de anchura pueden ser determinados mediante el espectro $\Delta R/R$, sin recurrir a un análisis de Kramers-Kroning, o un conocimiento de la inhomogeneidad del campo, a la interacción electrón-hueco, o incluso a las propiedades ópticas del material [38].

III.2.3.1 Mecanismos de modulación

El mecanismo de modulación de la fotorreflectancia, es la modulación del campo eléctrico superficial o en interfaz de generación de pares electrón-hueco (PEH). Debido a la importancia de la modulación, aquí se describe el mecanismo mediante el cual se lleva a cabo. Cuando un semiconductor es expuesto a condiciones ambientales, la superficie es atacada por el aire formándose una capa de óxidos principalmente, sobre dicha capa pueden absorberse átomos y/o moléculas del ambiente generando un conjunto complejo de estados electrónicos localizados, o trampas superficiales, estas trampas crean una región de carga espacial responsable de la existencia de un campo eléctrico intrínseco y estados dentro de este gap de energía, similar como lo hacen las impurezas pero localizados en la superficie, generando así una densidad de estados ocupados por electrones del interior del cristal [38]. Debido a la presencia de electrones, se crea una barrera de potencial para que los otros electrones que llegan a la superficie penetren el material, y esto hace que se curven las bandas de valencia y conducción cerca de la superficie. La presencia de una alta densidad de estados superficiales hace que el estado de Fermi sea modificado para mantenerlo constante en la interfaz semiconductor-aire [41].

(a) LASER OFF



(b) LASER ON

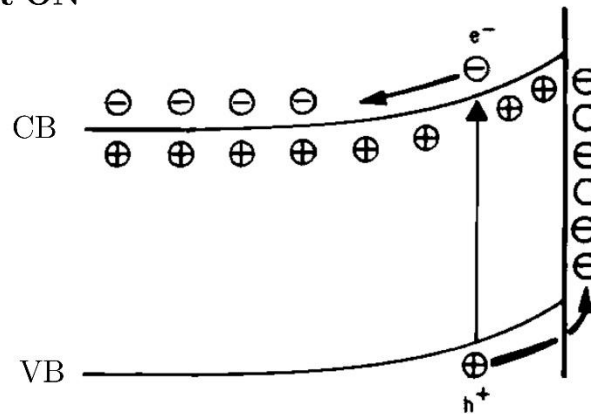


Figura III-10 Representación esquemática de los efectos de PR en una muestra tipo n [35]

Se emplea un láser interrumpido mecánicamente como fuente de modulación de tal manera que cuando el obturador se interpone provocando que las bandas se curven por la ocupación de estados superficiales que están por encima del nivel de Fermi, cuando el láser incide sobre la muestra a energías mayores a la banda prohibida se crean pares electrón-hueco foto inducidos (Ver figuras 3.13 y 3.14), que son separados por el campo eléctrico interno generado en la superficie, es decir electrones de la banda de valencia son excitados a la banda de conducción y difunden dentro del material. Los huecos que quedan en la banda de conducción neutralizan electrones de la superficie haciendo que la barrera de potencial baje, aplanando las bandas energéticas en la región de carga espacial lo cual se traduce en un cambio en la reflectividad.

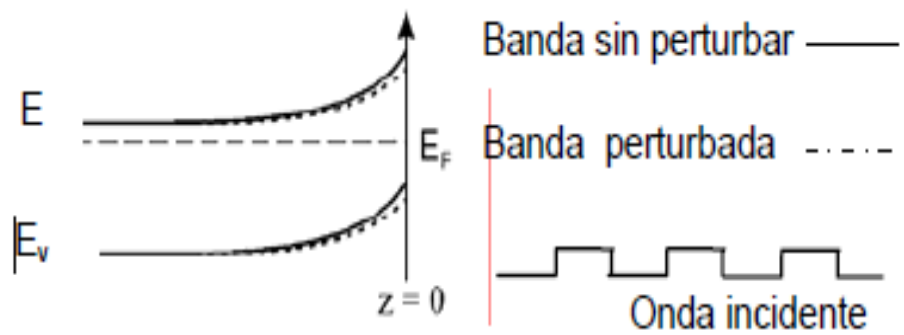


Figura III-11 Curvamiento de las bandas por el efecto del haz modulador para el semiconductor tipo n [35]

IV ARREGLO EXPERIMENTAL

IV.1 FOTORREFLECTANCIA

IV.1.1 Descripción de la técnica de fotorreflectancia

Investigaciones de Wang, Albers y Bleil reportaron en 1968 un artículo en el cual la reflectancia de un cristal es modulada por un segundo haz de luz incidente, a este método se le llamo fotorreflectancia [42]. Esta técnica tiene ventajas como son una alta resolución con montajes no necesariamente complejos, además de que es una técnica no destructiva. En la técnica de fotorreflectancia se utiliza como fuente de excitación la luz proveniente de un monocromador y como fuente de modulación la luz de un láser o diodo, el cual es cortado mecánicamente por un chopper.

En la figura 4.1, se muestra el diagrama del arreglo experimental que se implementó en el laboratorio de óptica. Se utilizó luz de una lámpara, la cual entra al monocromador y este a su vez nos permite controlar que longitud de onda es la que va a incidir sobre la muestra. Con esto podemos ir registrando la reflectancia para cada longitud de onda. Mediante el uso de dos lentes, enfocamos y colimamos la luz para hacerla incidir a la muestra. A su vez la muestra es modulada por un haz de un láser o diodo que pasa a través de una chopper, el cual opera a una frecuencia Ω_m . La luz reflejada por la muestra es enfocada con el uso de una lente hacia un foto-detector que convierte la intensidad de luz en una señal eléctrica.

La luz que proviene del láser o diodo debe de ser eliminada de la entrada del detector, por lo cual se utiliza un filtro óptico pasa altas. En el arreglo se obtienen dos señales, una que es proporcional a la reflectividad (R), esta es señal eléctrica DC la cual proviene del monocromador y esta se monitorea con un multímetro y una que es proporcional al cambio en la reflectividad (ΔR) la cual sería la señal eléctrica AC y esta proviene de la modulación del láser o diodo, que es detectada por un amplificador Lock-In. El Lock-In solo toma las señales moduladas que tengan concordancia con la referencia de la frecuencia utilizada Ω_m . Ambas señales son enviadas y analizadas en una computadora donde se guardan y se obtiene

el cociente de las intensidades registradas $\frac{\Delta R}{R}$ y es graficada en función de la longitud de onda en tiempo real. Para cada longitud de onda se realizan varios promedios para mejorar la señal obtenida en la medición.

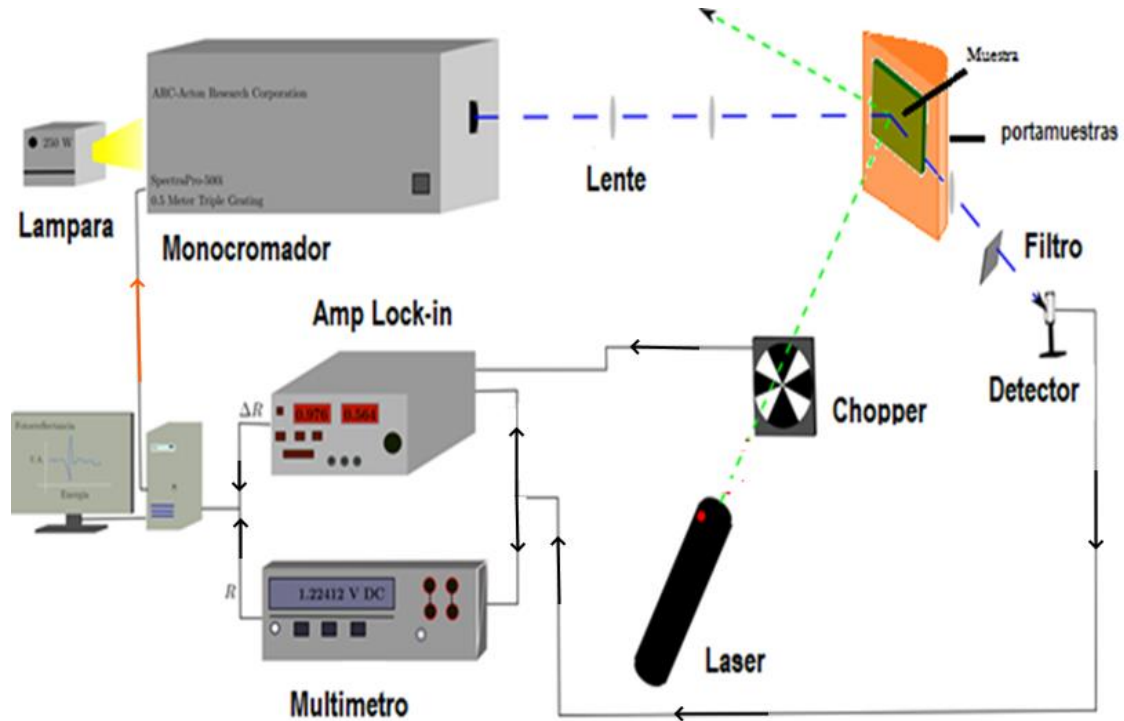


Figura IV-1 Diagrama del experimento de Fotorreflectancia, donde se muestra el camino que llevan los haces de luz, y el orden en que se manda y recibe la señal el equipo de cómputo.

IV.1.2 Procedimiento de normalización

Esta técnica es utilizada para reducir el ruido que se obtiene de la señal experimental, en la cual la señal de salida DC del detector (V_{DC}) está dada de la forma:

$$V_{DC} = I_0(\lambda)R(\lambda)K(\lambda)A(\lambda) \quad (4.1)$$

donde $I_0(\lambda)$ es la intensidad de la luz incidente, $R(\lambda)$ es la reflectividad DC de la muestra, $K(\lambda)$ es la respuesta del detector y $A(\lambda)$ es el factor de amplificación del detector.

La salida AC (V_{AC}) está dada por la forma:

$$V_{AC} = [I_0(\lambda)\Delta R(\lambda)K(\lambda) + I_{SP}(\lambda_{SP})K(\lambda_{SP})]A(\lambda) \quad (4.2)$$

donde $I_{SP}(\lambda_{SP})$ es la señal no deseada proveniente del láser y λ_{SP} es la longitud de onda no deseada. Debido a que la cantidad $\Delta R/R$ es la de interés en fotorreflectancia, es necesario eliminar el factor común $I_0(\lambda)$, es decir mantener $V_{DC}(\lambda)$ constante.

El método más simple de hacerlo es medir independientemente R y ΔR y obtener la razón entre ellos, pero este presenta el problema de que aparece el término de la señal no deseada de la siguiente manera:

$$\frac{V_{AC}}{V_{DC}} = \frac{\Delta R(\lambda)}{R(\lambda)} + \frac{I_{SP}(\lambda_{SP})K(\lambda_{SP})}{I_0(\lambda)R(\lambda)K(\lambda)} \quad (4.3)$$

por tanto, este método solo es apropiado si $I_{SP}(\lambda_{SP})$ es muy pequeño, el cual se logra con un buen arreglo experimental, donde la luz del láser utilizado difícilmente sea enfocada en donde está el detector.

Estas consideraciones fueron tomadas en cuenta al realizar el arreglo experimental de la figura 4.1, donde se procuró no enfocar el láser al detector y además se puso un filtro de altas para asegurar que la señal no deseada sea pequeña y así poder utilizar el método de normalización.

IV.1.3 Configuración experimental

En el presente trabajo se montó un arreglo experimental como se muestra en la figura 4.1, para este arreglo se utilizaron la siguiente lista de componentes.

- *Monocromador Oriel Cornerstone 130 1/8m*
- *Amplificador Lock-in Stanford SR530*
- *Multímetro Agilent 344410*
- *Lámpara de Xenón de 1000W*
- *5 lentes biconvexas o plano convexas*
- *Porta muestras*
- *Lámpara LED 285nm*
- *Computadora equipada con tarjeta PCI-GPIB*
- *Detector de Silicio Thorlabs PDA 100A*
- *Filtro óptico pasa altas con corte en 325 nm*
- *Filtro óptico pasa altas con corte en 400 nm**

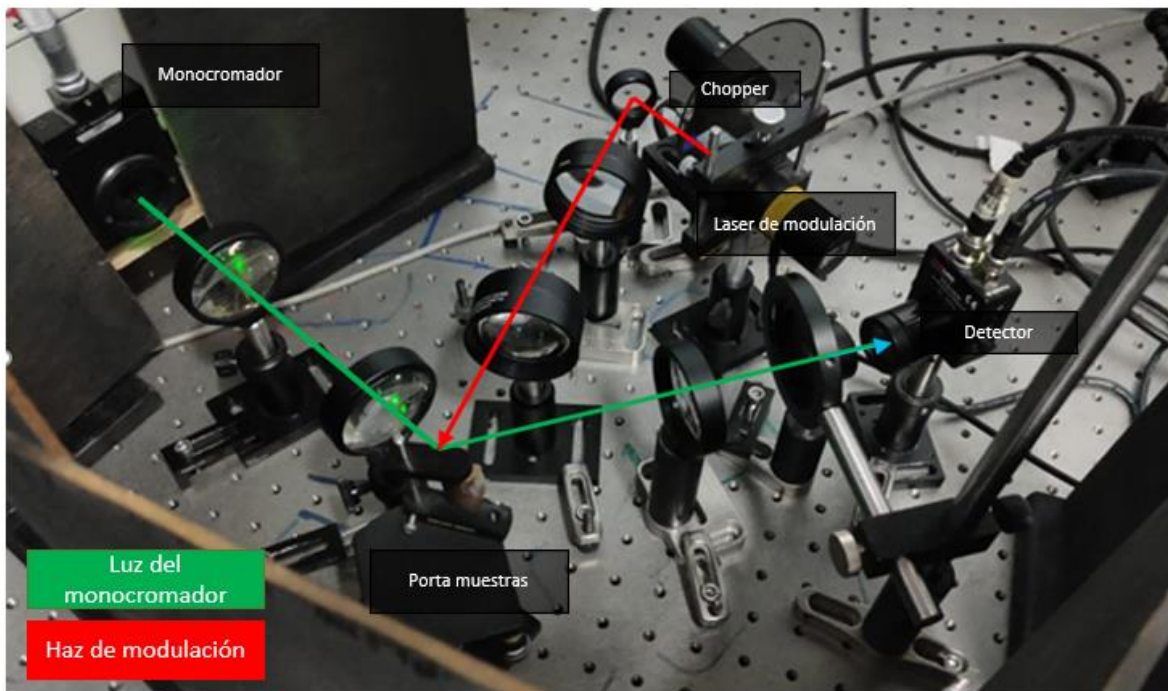


Figura IV-2 Fotografía del arreglo experimental utilizado para la técnica de fotorreflectancia.

IV.2 FOTOLUMINISCENCIA

IV.2.1 Descripción de la técnica de fotoluminiscencia

La técnica de fotoluminiscencia presenta varias ventajas con respecto a otras técnicas de caracterización, entre ellas, se tiene que es una técnica no destructiva y no requiere preparación previa de la muestra. En la técnica de fotoluminiscencia se requiere como fuente de excitación una luz con mayor energía del gap de la muestra.

En la figura 4.3 se muestra el diagrama de experimento de fotoluminiscencia que se llevó a cabo, todo inicia con la lampara LED que emite luz que se hace pasar por dos lentes para hacerla incidir en la muestra y con dos lentes reenfoamos y recogemos la señal y evitamos tener reflexión especular, luego ponemos un filtro pasa bajas de 325 nm para evitar el armónico de la muestra, la señal es recogida mediante una fibra óptica la cual está conectada a un espectrofotómetro, el cual está conectado a la computadora donde se recogieron los archivos para su análisis.

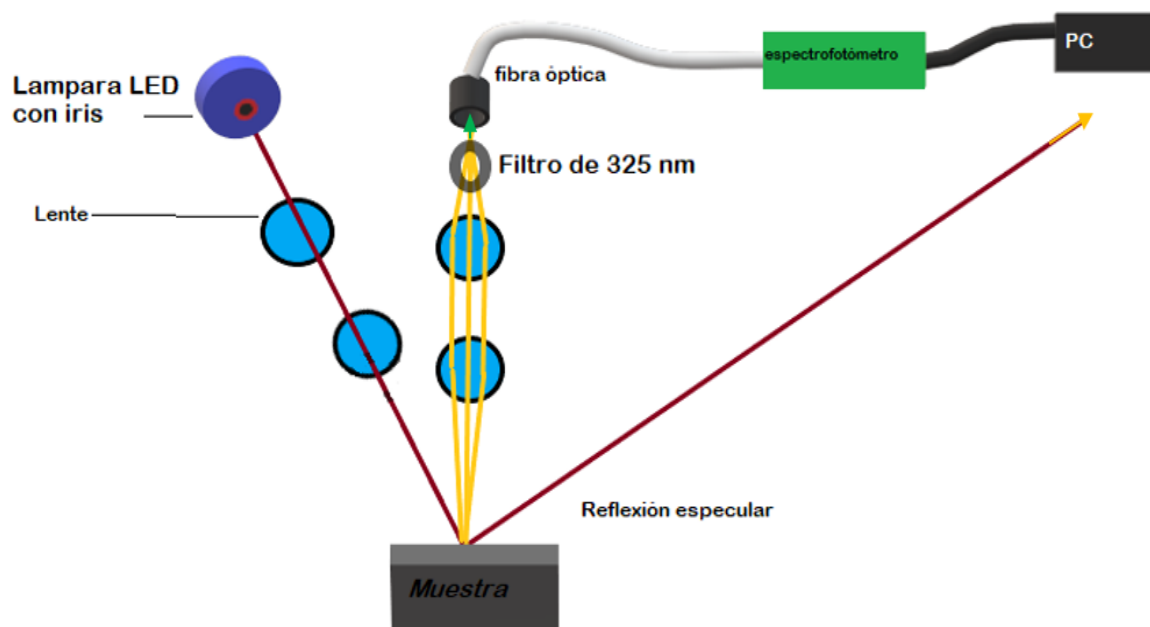


Figura IV-3 Diagrama del experimento de Fotoluminiscencia.

El filtro pasa altas de 400 nm fue utilizado en algunas de las muestras que presentaban un alta señal cercana al gap del GaN con la intención de medir una señal más débil de defectos, en particular ocurrió con las muestras M230, M359, M360, M465, este filtrado nos permite poder observar esta señal de defectos más débil sin saturar el espectrofotómetro.

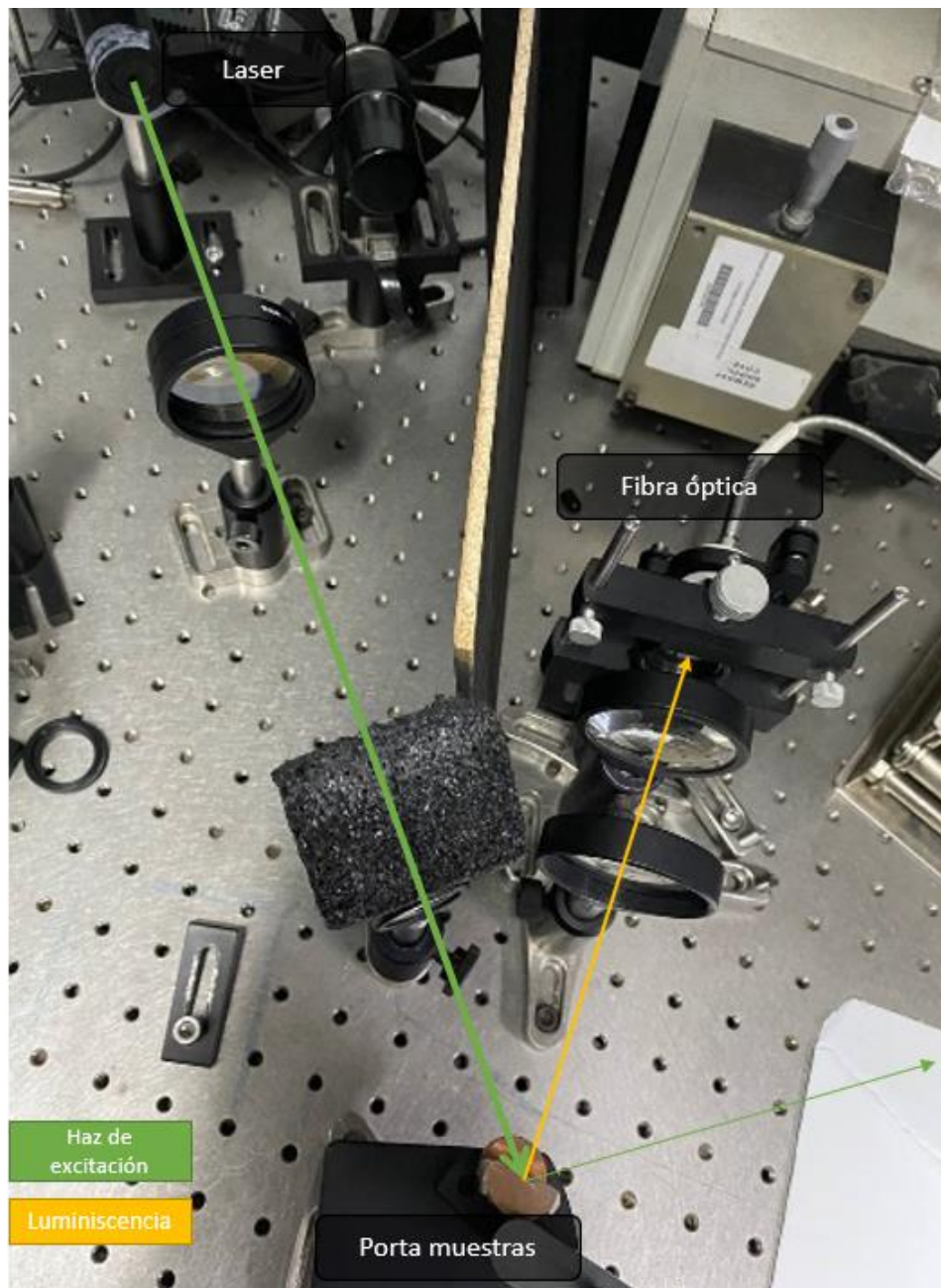


Figura IV-4 fotografía donde se muestra el arreglo experimental para la técnica de fotoluminiscencia, donde se observa la trayectoria de la luz.

V RESULTADOS

V.1 DESTALLES DE LAS MUESTRAS

Las muestras que fueron estudiadas en el presente trabajo corresponden a capas de GaN hexagonal sobre sustratos de Si (111) en la fase hexagonal, corresponden a una estructura wurtzita, esquemáticamente las muestras tienen la estructura mostrada en la Figura V-1.

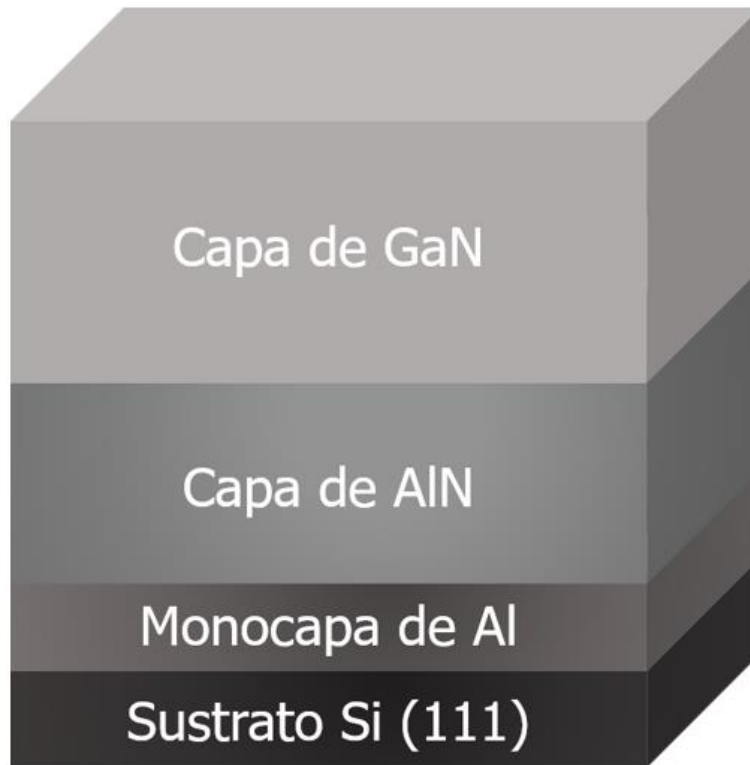


Figura V-1 Diagrama de las muestras en estudio, donde se observa que es una estructura de multicapas.

Estas muestras fueron crecidas en el laboratorio Epitaxia de haces moleculares del Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN por el Dr. Máximo López López y la Dra. Yenny Lucero Casallas Moreno, los parámetros significativos de estas muestras se presentan en la tabla 5.1. En esencia corresponden a dos series de muestras. La primera serie de muestras etiquetadas con número secuencial del 226 a la 230, corresponden a muestras de GaN en donde se tiene cambios en la temperatura del sustrato y de la celda galio, estas

muestras no tienen dopaje intencional. El objetivo de esta serie era el observar el cambio en sus propiedades ópticas mediante variaciones en los parámetros de crecimiento. Esta serie de muestras tiene un espesor nominal de 540 nm, en la *Tabla V-1* se indican los parámetros de crecimiento de todas las muestras del presente estudio.

La segunda serie, la estructura de la muestra es similar a la primera, a esta serie se le identifica con las etiquetas 359, 360 y 465 y la diferencia estriba en que son muestras mucho más gruesas que la serie anterior, con grosores de 1350 y 1440 nm, con las siguientes características el sustrato mantuvo la misma temperatura para su crecimiento, en algunas de ellas se agregó dopaje de manera intencional mediante la incorporación de silicio a las películas. En esta serie se tiene una muestra de control (la muestra 359), la cual no se dopó, las otras dos muestras la 360 y 365 el dopaje de silicio es distinto, producto de la variación de temperaturas 30 (°C) en la celda de evaporación de Si, por lo que se tiene que la muestra con más dopaje es la 360.

Tabla V-1 Detalles experimentales de la serie de muestras empleadas en el presente estudio, las muestras son intrínsecas a excepción de la 360 y la 465 que fueron dopadas con Silicio.

Muestra	T_{sus} (°C)	T_{Ga} (°C)	P_{Ga} (Pa)	T_{si} (°C)	Espesor (nm)	Tiempo (horas)
M226	700	970	6.2E-07	N/A	540	2.00
M227	700	987	4.8E-07	N/A	540	2.00
M228	730	970	6.2E-07	N/A	540	2.00
M229	730	987	4.8E-07	N/A	540	2.00
M230	750	970	6.2E-07	N/A	540	2.00
M359	800	N/A	5.4E-07	N/A	1350	3.78
M360	800	N/A	6.2E-07	1240	1440	3.55
M465	800	N/A	6.2E-07	1210	1350	3.78

V.2 ESPECTROS DE REFLECTANCIA Y FOTORREFLECTANCIA

Estas dos mediciones se hicieron de manera simultánea con el arreglo de Fotorreflectancia que fue descrito en el capítulo 4. Las mediciones fueron hechas en el rango de 325 a 700 nm, en energía que corresponde al rango de 1.8 a 3.8 eV.

Los detalles del arreglo experimental se mencionaron ya en los capítulos anteriores, El arreglo experimental emplea una lámpara de Xenón cuya emisión es dispersada por un monocromador que produce un haz de prueba quasicromático, este haz se refleja en la muestra y es medido por un detector de silicio (produciendo una señal DC que depende de la longitud de onda). Al mismo tiempo, sobre la muestra incide un segundo haz que se denomina de modulación, el cual produce un cambio en la reflectancia (señal AC con las frecuencias de la modulación), así a un mismo tiempo se puede medir la reflectancia (señal DC) y el valor del cambio de la reflectancia (señal AC). Del cociente del cambio de la reflectancia " ΔR " y la reflectancia " R " se obtiene la señal de fotorreflectancia. La reflectancia propiamente dicha requiere normalizarse para la cual se emplea el espectro de la lámpara.

V.2.1 Reflectancia

Los resultados de reflectancia se presentarán por separados para los dos conjuntos de muestras, las intrínsecas y las dopadas.

V.2.1.1 Muestras de GaN Intrínsecas

Las mediciones son similares en este conjunto de muestras de GaN sobre sustratos de silicio(111), por lo que se empleará la primera de ellas para describir a detalle los espectros obtenidos, en este caso es la muestra 226 cuyo espectro se muestra en la Figura V-2, El espectro de la muestra presenta dos regiones en energía, una que se encuentra por encima de 3.4 eV en donde la señal es relativamente plana, y la región por debajo de este valor, donde se observan oscilaciones. El valor del gap para el GaN Wurtzita (hexagonal-estable) se encuentra precisamente en la vecindad de este valor, es de 3.4 eV, por lo que, por debajo de

este valor, el GaN es esencialmente transparente. Consideramos que el origen de las oscilaciones que se observan por debajo del gap en el espectro se relaciona con interferencia entre el haz reflejado en la superficie y el haz reflejado en la interfaces GaN/AlN/Si.

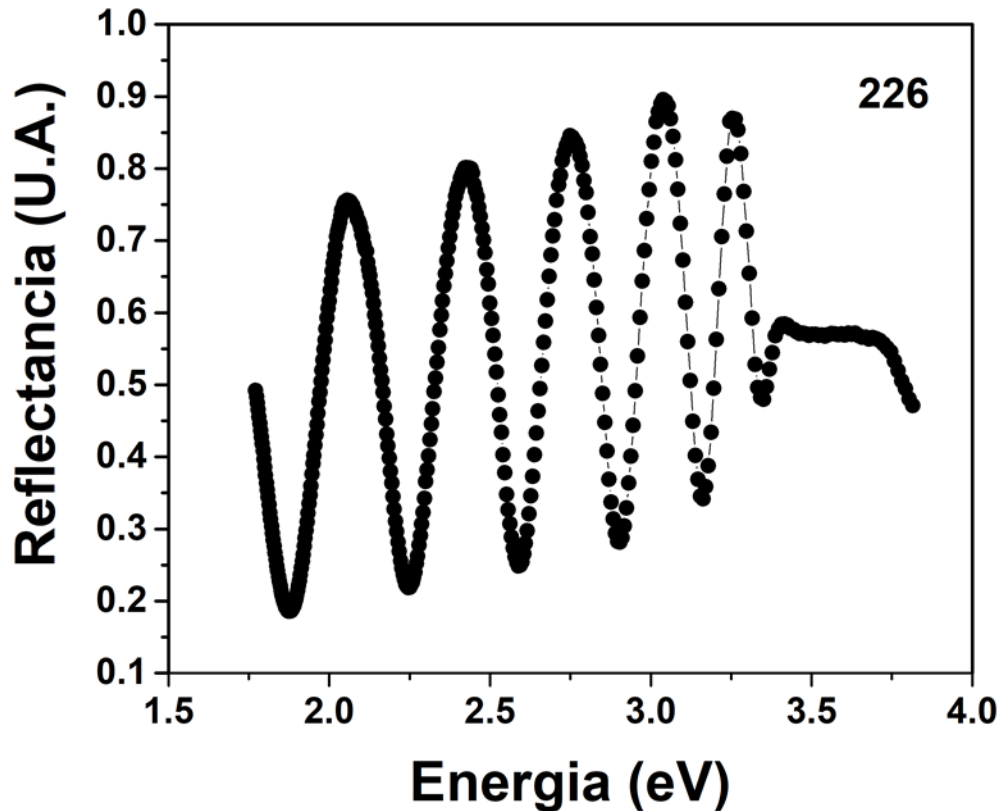


Figura V-2 Espectro de Reflectancia de la muestra 226, GaN/Si(111) intrínseco, 540 nm de espesor.

Del periodo de las oscilaciones y del valor del índice de refracción del GaN se puede estimar el espesor de la película, en el apéndice 7.3 se describe cómo se puede hacer el cálculo del espesor empleando las ecuaciones de Fresnel. En la Figura V-3 se presenta el espectro experimental y se compara con el espectro teórico del espesor nominal. Al comparar el resultado experimental con el teórico, los valores máximos y mínimos no coinciden. Considerando el espesor como una variable a ajustar se procedió a variar este valor, encontramos que la curva experimental está muy próxima a las curvas con espesores de 610 y 600 nm, por lo que podemos concluir que el espesor de la capa crecida de GaN es de 605 ± 5 nm.

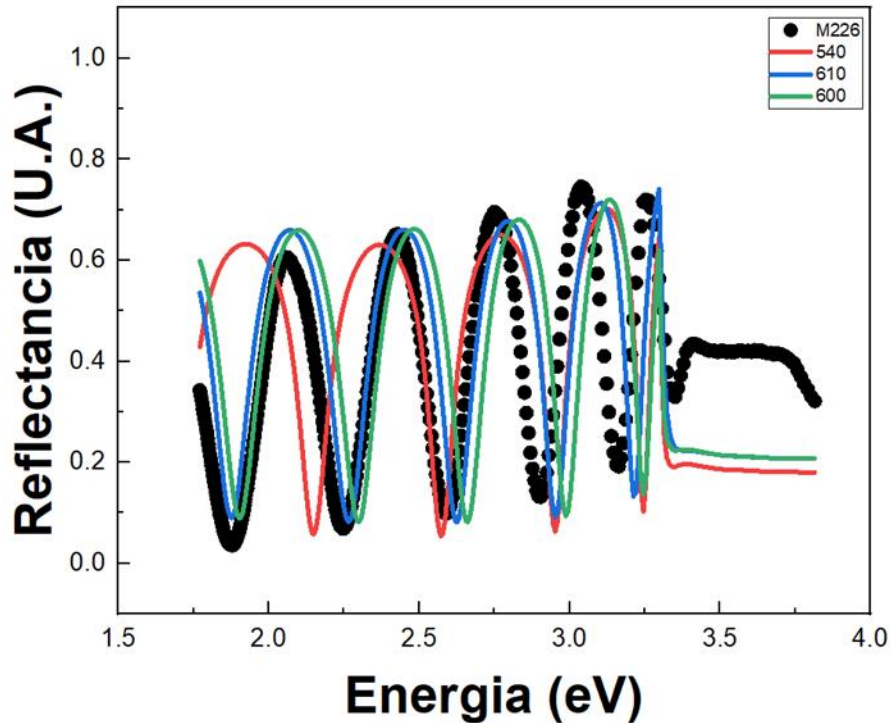


Figura V-3 Espectro de reflectancia experimental (círculos) de la capa de GaN en la muestra 226 y curvas de reflectancia teóricas de una capa de GaN con espesor de 540nm (curva roja), espesor de 600 nm (curva verde) y espesor de 610 nm (curva azul).

De este modo, se procede para estimar los espesores de la capa de GaN de cada una de las muestras. Los ajustes del espesor se reportan desde la Figura V-4 a la Figura V-7, se muestra ya la comparación de la curva experimental con las curvas teóricas. Se encontró que hay una buena correspondencia entre los máximos y mínimos de la señal de reflectancia, salvo las diferencias en la Figura V-5 y la Figura V-7, donde se observa un comportamiento que se aleja de la descripción teórica. Este comportamiento muy probablemente se debe a que hay muchos defectos en la misma y las interfaces tienen la misma calidad comparada con el resto de la serie.

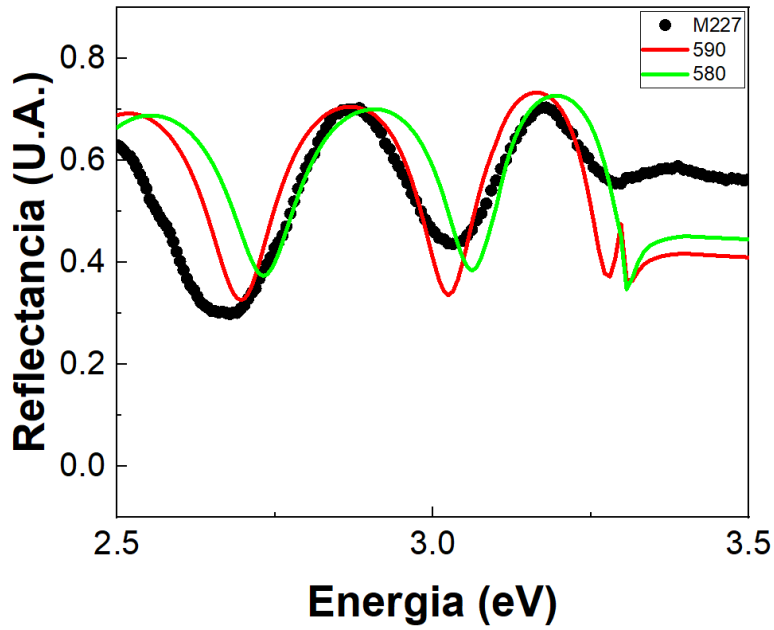


Figura V-4 Reflectancia de la muestra 227, y curvas teóricas de reflectancia con espesores de la capa de GaN de 580 nm (curva roja) y 590 nm (curva verde).

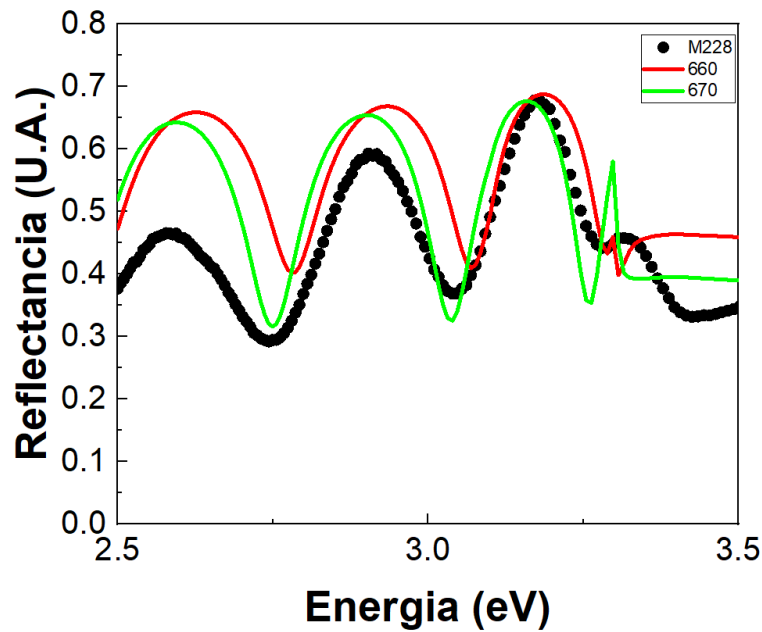


Figura V-5 Reflectancia de la muestra 228, y curvas teóricas de reflectancia con espesores de la capa de GaN de 660 nm (curva roja) y 670 nm (curva verde).

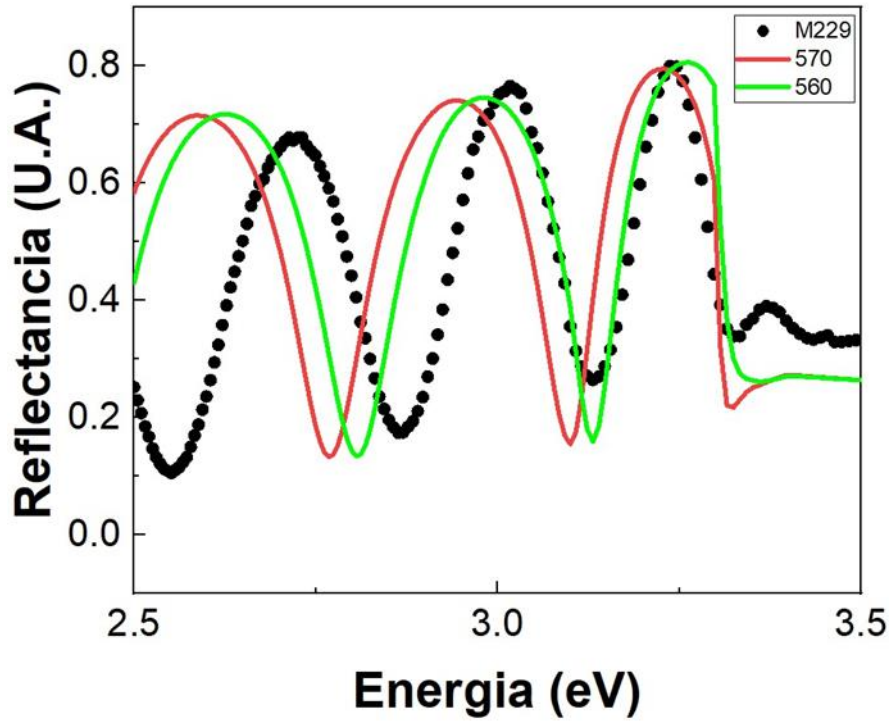


Figura V-6 Reflectancia de la muestra 229, y curvas teóricas de reflectancia con espesores de la capa de GaN de 560 nm (curva roja) y 570 nm (curva verde)..

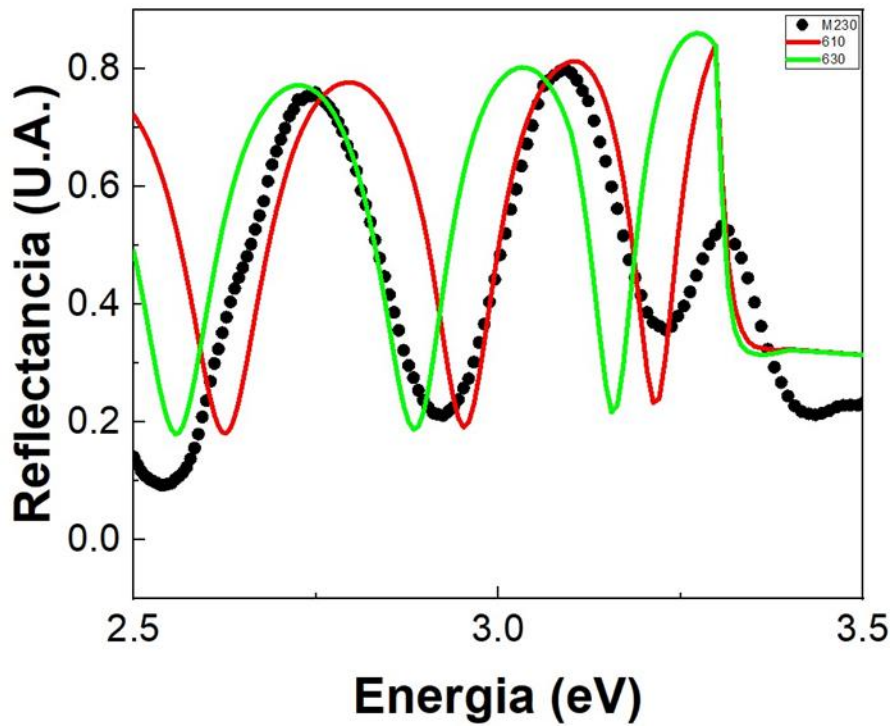


Figura V-7 Reflectancia de la muestra 230, y curvas teóricas de reflectancia con espesores de la capa de GaN de 610 nm (curva roja) y 630 nm (curva verde).

En la Figura V-8 se muestran las curvas experimentales de reflectancias de la primera serie de muestras de GaN intrínsecas, con un espesor nominal similar, se nota que siguen la forma esperada con oscilaciones en la región transparente del GaN, y estas se van espaciando hacia energías bajas o longitudes de onda larga como consecuencia de la variación del índice de refracción, que aumenta a medida que se aproximan al gap por el lado de energías bajas. También se encontró que hay variaciones del espesor que son consecuencia del cambio de los parámetros de crecimiento. Los espesores de la capa de GaN encontrados por medio de las curvas teóricas de reflectancia, se comparan con los espesores nominales en la Tabla V-2.

Tabla V-2 Comparación de los parámetros de crecimiento con el grosor obtenido experimentalmente para la serie que se sabe tuvieron el mismo tiempo de síntesis.

Muestra	T_{sus} (°C)	T_{Ga} (°C)	P_{Ga} (Torr)	Grosor (exp) (nm)	Grosor (nm)	Tiempo (horas)
M226	700	970	6.2E-07	605 ± 5	540	2.00
M227	700	987	4.8E-07	595 ± 5	540	2.00
M228	730	970	6.2E-07	665 ± 5	540	2.00
M229	730	987	4.8E-07	565 ± 5	540	2.00
M230	750	970	6.2E-07	620 ± 5	540	2.00

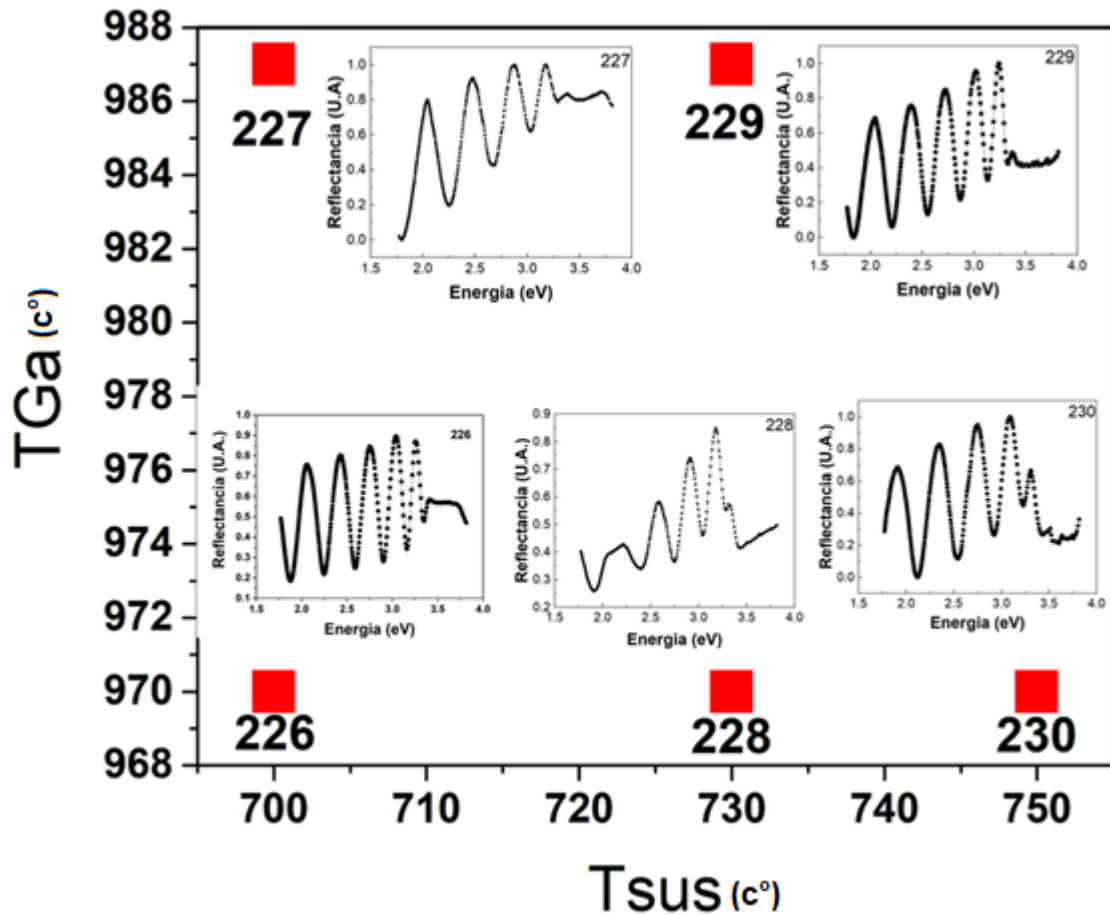


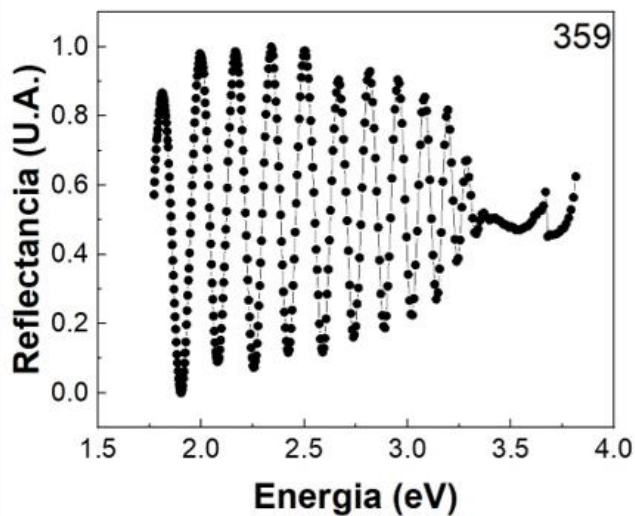
Figura V-8 Curvas de Reflectancias para cada una de las muestras de GaN de la serie sin dopar con un espesor nominal de 540 nm.

V.2.1.2 Muestras dopadas

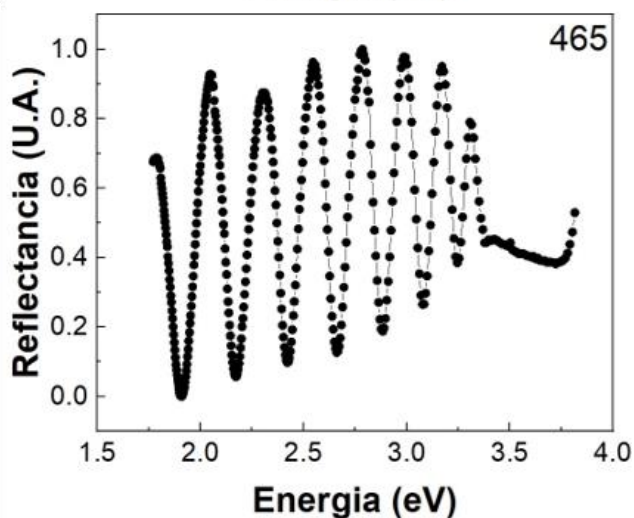
En esta serie de muestras se estudiaron capas de GaN dopadas con silicio, es de esperar que se tengan más oscilaciones por el hecho de que son más gruesas que la serie sin dopaje intencional.

En la Figura V-9 se tienen los valores de temperatura correspondiente a la celda de silicio para el caso de las 3 muestras con espesores similares, y dos de ellas con dopaje intencional. Lo que podemos apreciar comparando con las curvas teóricas, en la figura 5.9 la muestra con mayor dopaje (muestra 360) hay una gran atenuación en las oscilaciones producto de la absorción producto de la absorción.

$T_{Si}=0^{\circ}C$
 $t=1350\text{ nm}$



$T_{Si}=1210^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$



$T_{Si}=1240^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$

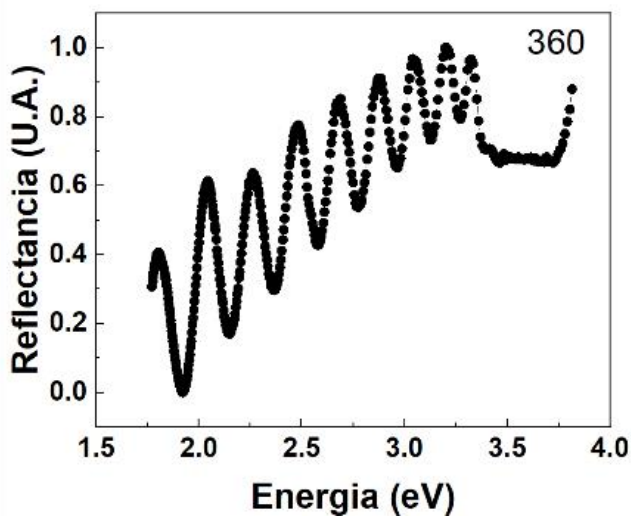


Figura V-9 Curvas de reflectancia de la serie de muestras de GaN con dopaje de silicio. Donde se puede observar al ser esta más anchas tienen más dopaje y como actuó el dopaje en estas señales..

Es precisamente esta muestra la que tiene un valor mayor del mismo. Por lo que podemos concluir que el dopaje produce absorción, lo que hace que la interferencia constructiva de la porción del haz que se refleja en las superficies de la muestra y el que se produce en la interfaz AlN/GaN no interfieran constructivamente o que haya un mayor mezclado de fase trayendo como consecuencia que las oscilaciones se encuentre atenuadas.

Comparando de manera directa el número de oscilaciones de la muestra 359 y la 465, que nominalmente deben de tener el mismo espesor, se tiene claramente que no coincide el número de estas, por lo que tenemos que el espesor nominal no es el correcto o bien la región transparente del mismo es menor que la que se creció. Esto podría ser el caso, ya que el tener un dopaje contribuye al desacople de la capa de GaN con la de AlN. De igual manera, de la Figura V-10 a la Figura V-12 se hace el ajuste del espectro considerando el espesor como un parámetro de ajuste.

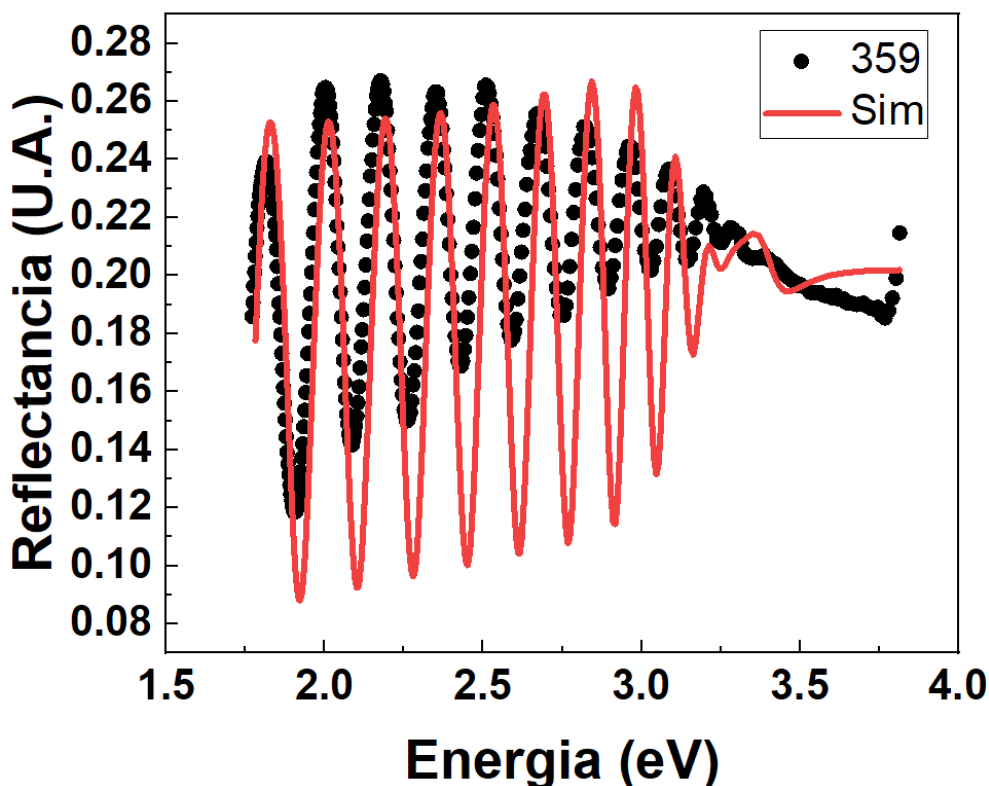


Figura V-10 Reflectancia de la muestra 359, en la cual se observa que tiene un espectro correspondiente de un grosor de 1440 nanómetros.

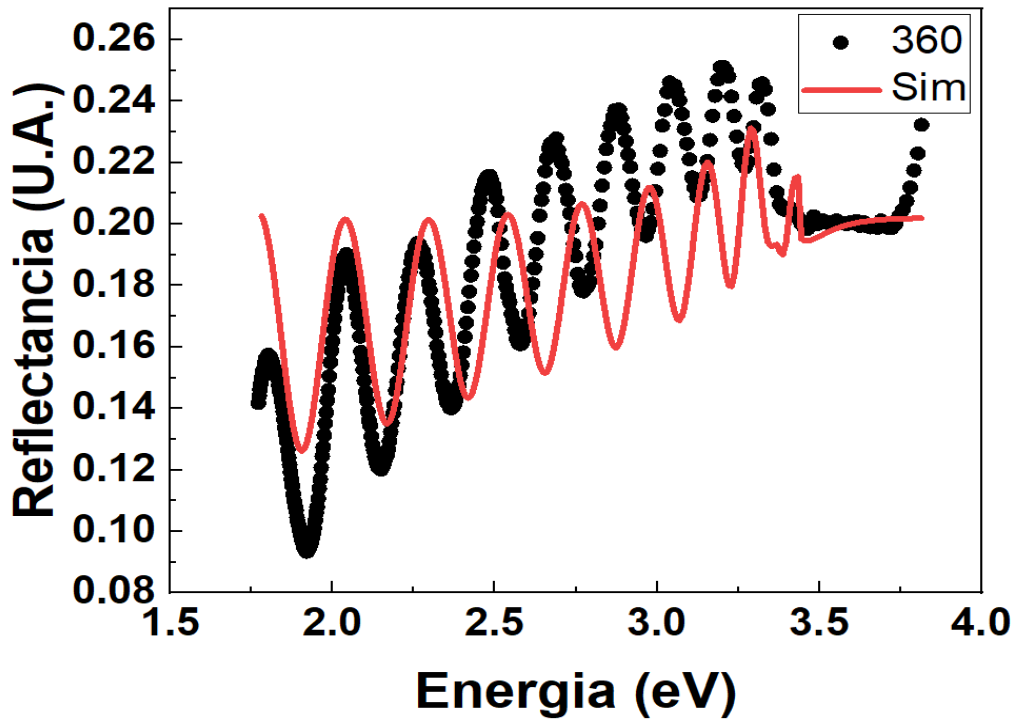


Figura V-11 Reflectancia de la muestra 360, en la cual parecer ser una señal parecida a la de grosor 1000 nanómetros.

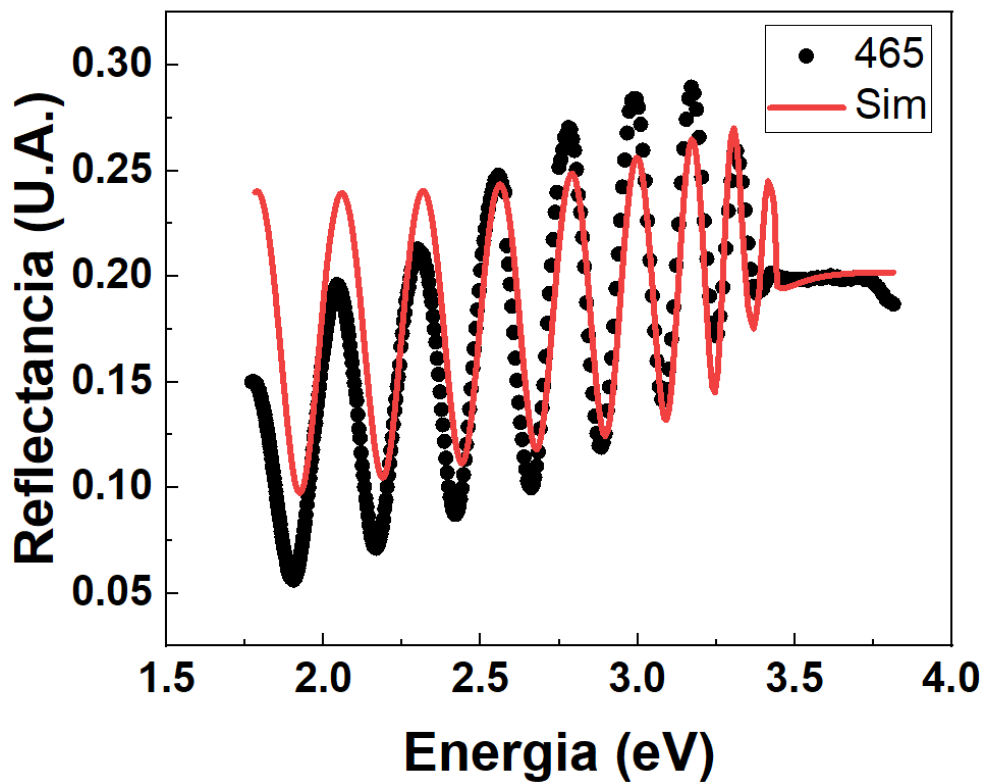


Figura V-12 Reflectancia de la muestra 465, en la cual se observa que la señal es comparable con una muestra de 970nm.

Los valores de los espesores calculados de las oscilaciones se reportan en la Tabla V-3.

Tabla V-3 Comparación de los grosores obtenidos experimentalmente de las muestras.

Muestra	T_{sus}	T_{si}	<i>Grosor (exp)</i>	<i>Grosor</i>	<i>Tiempo</i>
	(°C)	(°C)	(nm)	(nm)	(horas)
M359	800	N/A	1420 ± 5	1440	3.78
M465	800	1210	970 ± 5	1440	3.78
M360	800	1240	1000 ± 5	1350	3.55

Como podemos ver el dopaje afecta al grosor de la muestra, esto tiene sentido ya que la red cristalina es afectada dado que en vez de solo tener galio a su vez hay silicio.

V.2.2 Fotorreflectancia

Al igual que la señal de reflectancia se presentan los resultados de la señal de Fotorreflectancia para los dos conjuntos de muestras de manera separada.

V.2.2.1 Muestras de GaN intrínsecas

Los espectros de estas muestras son similares por lo que emplearemos la primera de las muestras para describir las características básicas.

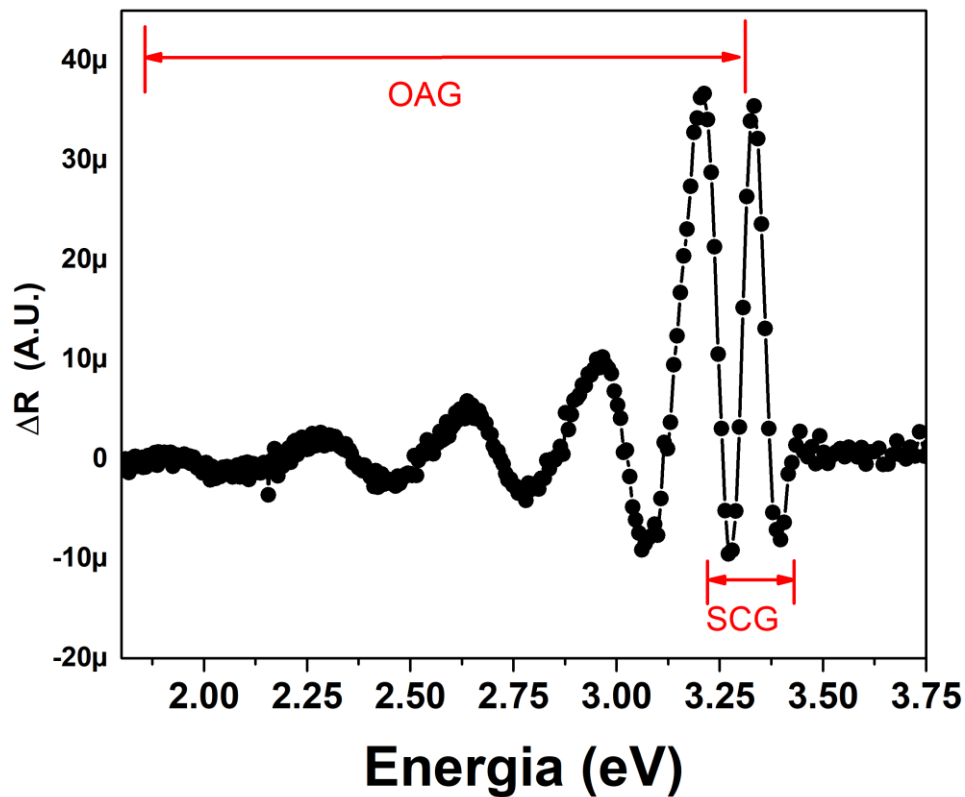


Figura V-13 Señal PR de la muestra 226 de GaN sin dopar, se muestra la región del espectro denominada OAG (Oscilaciones Abajo del Gap) y SCG (Señal Cercana al Gap)

Un espectro típico de señal “ ΔR ” de este conjunto de muestras se reporta en la figura 5-13. Se nota claramente un conjunto de oscilaciones que se encuentra por debajo del valor esperado del gap que denominaremos OAG (Oscilaciones Abajo del Gap), y una señal que

es cercana al gap que denominaremos (SCG). Se presume que la señal OAG es producida por una primera derivada de la curva de reflectancia, tal como se muestra en la figura 5-14 y que esencialmente es producto de la interferencia, mientras que la señal SCG es producida por el band gap, la señal del band gap es modelado por una tercera derivada de la curva de reflectancia. En la figura 5-14 se muestra que la derivada simple de la curva de reflectancia reproduce la oscilación, si bien para este caso la amplitud disminuye a medida que se aleja del gap, su forma general sigue la misma ondulación. Se nota claramente que las señales difieren de manera significativa en la región cercana como una superposición de la señal OAG y la señal asociada al band gap óptico (SCG).

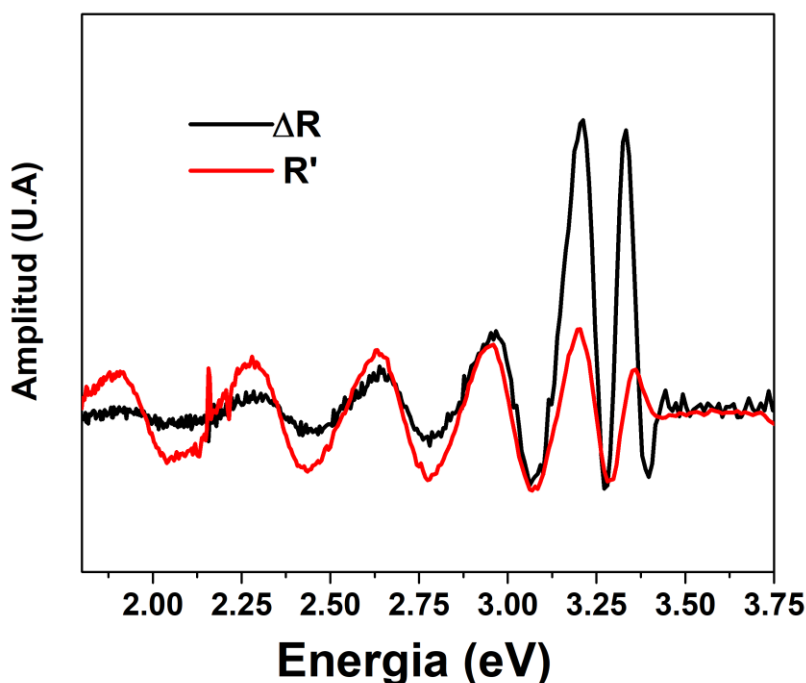


Figura V-14 Comparación de la señal ΔR con la primera derivada de la señal de reflectancia (curva roja), se nota una correspondencia en el periodo de oscilación, la amplitud decae a medida que se aleja del Gap del GaN. Se tiene una discrepancia en la forma de la señal en la vecindad del gap del GaN. Esta diferencia se asocia a la señal típica del band gap óptico (tercera derivada).

La señal asociada al band gap óptico corresponde a la tercera derivada de la reflectancia y está dada por la línea de Aspnes que se expresa por:

$$\frac{\Delta R}{R} = \Re \left[C e^{i\theta} (E - E_{gap} + i\Gamma)^{-n} \right] \quad 5.1$$

donde E_{gap} es el valor del band gap, C es la amplitud, θ es una fase, Γ es el ancho de la transición. n corresponde al tipo de estructura que se desea estudiar en nuestro caso como es material en bulto tenemos que $n = 5/2$. Entonces tenemos lo siguiente:

$$f(x) = Level + Real\left(\frac{C \cdot e^{i\theta}}{(E_g - x + i \cdot \Gamma)^{5/2}}\right) \quad 5.2$$

donde el ajuste se realizó empleando software matlab2019b y Origin Lab, el término extra (*Level*) es para tomar en cuenta posibles señales producidas por el haz de modulación y que entran en la señal como ruido, al ser independiente de la señal de prueba esto un offset de la señal, un caso típico de este offset sería la señal de PL que induce la fuente UV.

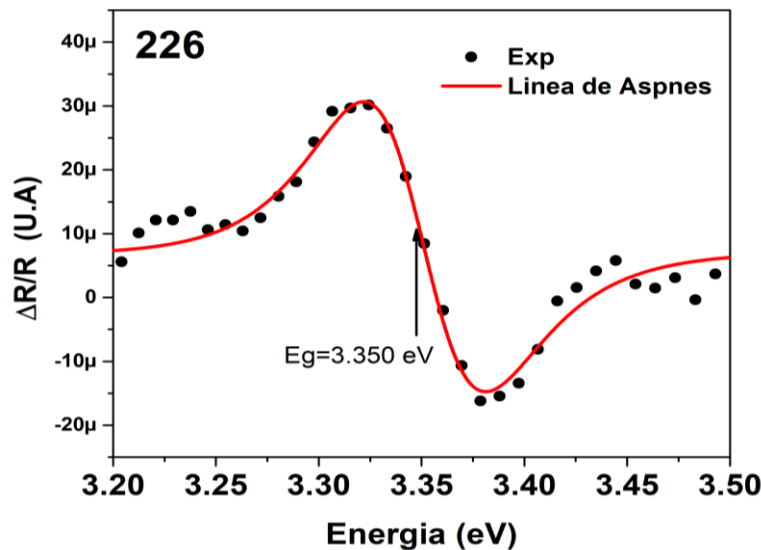


Figura V-15 Ajuste con datos experimentales muestra M226 empleando la línea de Aspnes en la vecindad del gap del GaN.

Así, la estrategia que se emplea es el de filtrar la señal más extendida denominada OAG en la región cercana del gap y posteriormente ajustar empleando la señal de Aspnes. El ajuste en

la región del gap se encuentra en la figura 5-15. Se encuentra que el valor del gap es 3.335 eV, el ancho de esta señal es de 62 meV, en la literatura se encuentra alrededor de 3.4 eV [43].

Se emplea el mismo proceso para cada una de las muestras y a continuación se presentan la señal de fotorreflectancia y el ajuste en la región de interés para cada una de las muestras.

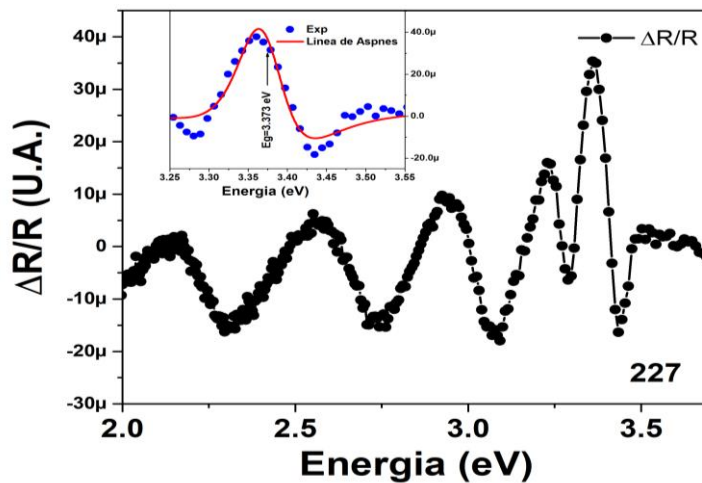


Figura V-16 Señal de PR de la muestra 227, se aprecia de nuevo oscilaciones por debajo del gap; además, de la señal cercana al gap, en el recuadro se presenta el ajuste de línea de Aspnes para la región del band gap del GaN.

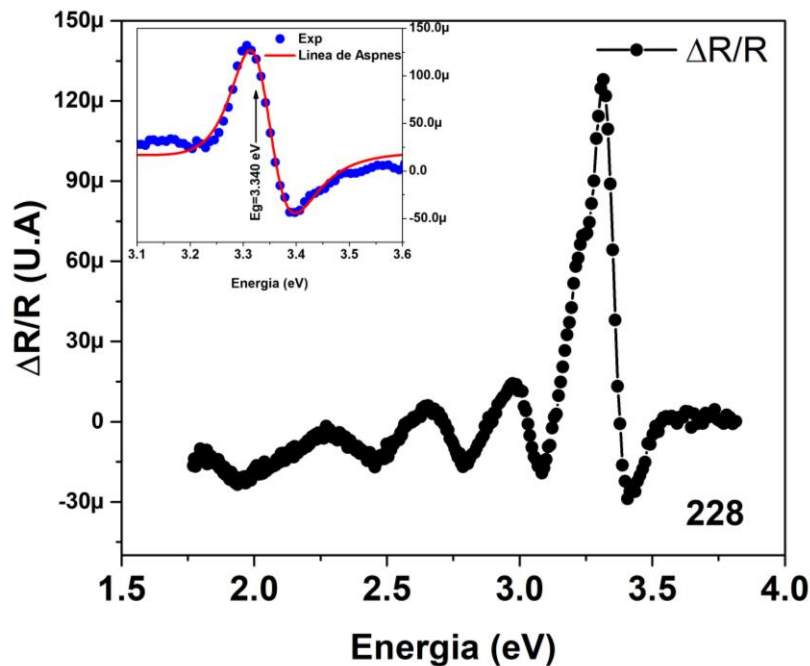


Figura V-17 Señal de PR de la muestra 228, se aprecia de nuevo oscilaciones por debajo del gap además de la señal cercana al gap, en el recuadro se presenta el ajuste de línea de Aspnes para la región del band gap del GaN.

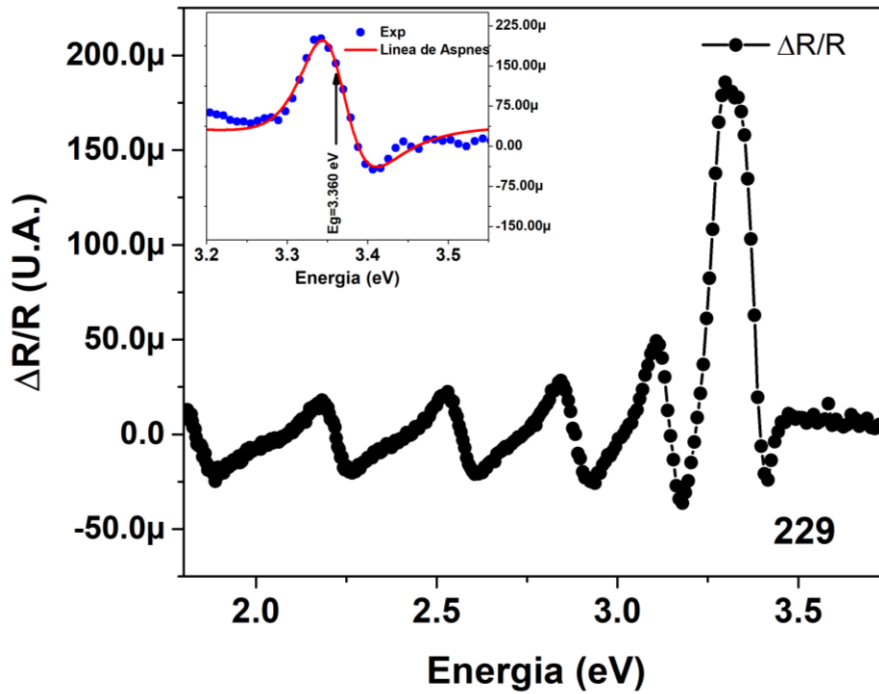


Figura V-18 Señal de PR de la muestra 229, se aprecia de nuevo oscilaciones por debajo del gap además de la señal cercana al gap, en el recuadro se presenta el ajuste de línea de Aspnes para la región del band gap del GaN.

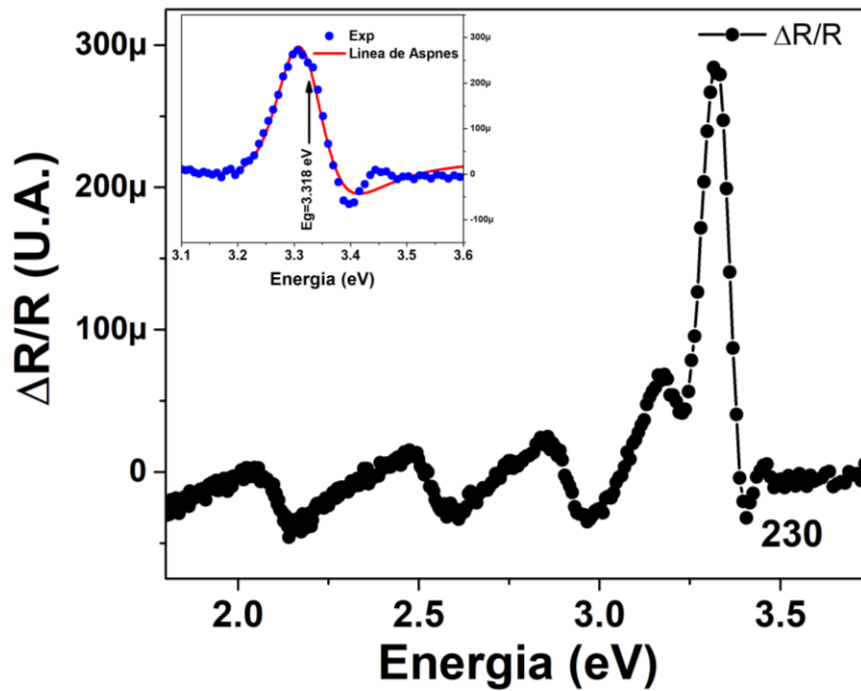


Figura V-19 Señal de PR de la muestra 230, se aprecia de nuevo oscilaciones por debajo del gap además de la señal cercana al gap, en el recuadro se presenta el ajuste de línea de Aspnes para la región del band gap del GaN.

Tenemos que en toda esta serie de muestras hay una señal cercana al gap que se puede ajustar mediante una línea de Aspnes, los valores para cada una de las muestras se presentan en la Tabla V-4 y se muestran en la Figura V-20.

Tabla V-4 Valores del gap y ancho de los ajustes del GaN en fase hexagonal para muestras intrínsecas donde se indica el ancho de la transición del band gap mediante Γ .

Muestra	T_{sus} (°C)	T_{Ga} (°C)	E_{Gap} (eV)	Γ (meV)
M226	700	970	3.349	61.6
M227	700	987	3.373	66.9
M228	730	970	3.340	85.7
M229	730	987	3.360	66.3
M230	750	970	3.318	96.4

Encontramos que, para un valor constante de la temperatura del sustrato, al aumentar la temperatura de Ga hace que el gap del GaN aumente en energía. Por otro lado, para una temperatura de la celda de Ga constante, se tiene que a medida que se aumenta la temperatura del sustrato, disminuye el valor del gap del GaN y aumenta el ancho de éste. El ancho de la señal respecto a la temperatura de Ga parece tener un valor más estable en $T_{Ga} = 987\text{ °C}$ que en lo que es la temperatura menor de $T_{Ga} = 970\text{ °C}$, donde presenta tanto el valor mínimo como los máximos. Estos anchos y posiciones se comparan más tarde con lo obtenidos de PL.

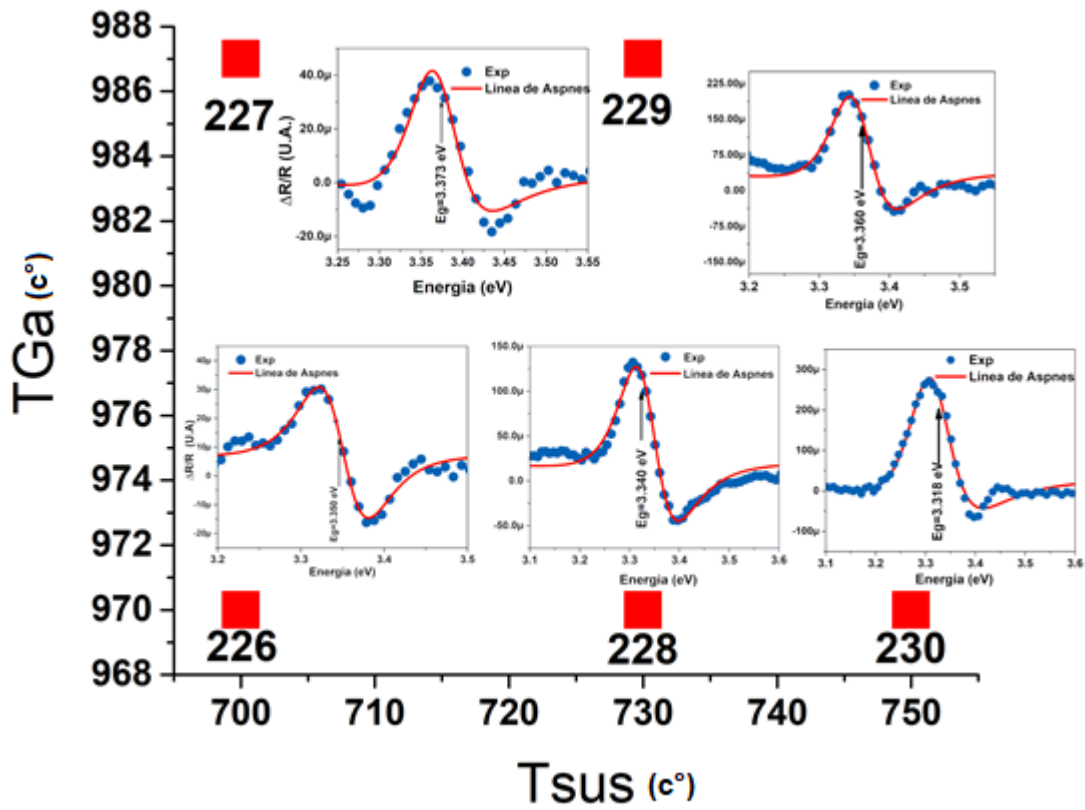


Figura V-20 Ajustes de línea para cada muestra como función de los parámetros de crecimiento para muestras de GaN/Si intrínsecas.

V.2.2.2 Muestras dopadas

A continuación, se presentan los espectros de fotorreflectancia para las muestras dopadas, en donde se tiene una muestra de control que esta sin dopar. En la muestra sin dopar (359) el espectro de PR muestras las mismas oscilaciones que en la serie intrínseca, la única diferencia es la disminución entre los máximos de las oscilaciones, que es producto de un mayor espesor de las películas. Del hecho de poder observar la interferencia constructiva en dicha señal no indica que para estos espesores el GaN es relativamente transparente. Esto contrasta drásticamente para las muestras dopadas, donde se observa una atenuación de la amplitud Figura V-21 o no se distingue del ruido experimental, es decir, la atenuación de estas oscilaciones es producto del dopaje del material. Así intuimos que la interferencia constructiva está severamente limitada como consecuencias del dopaje.

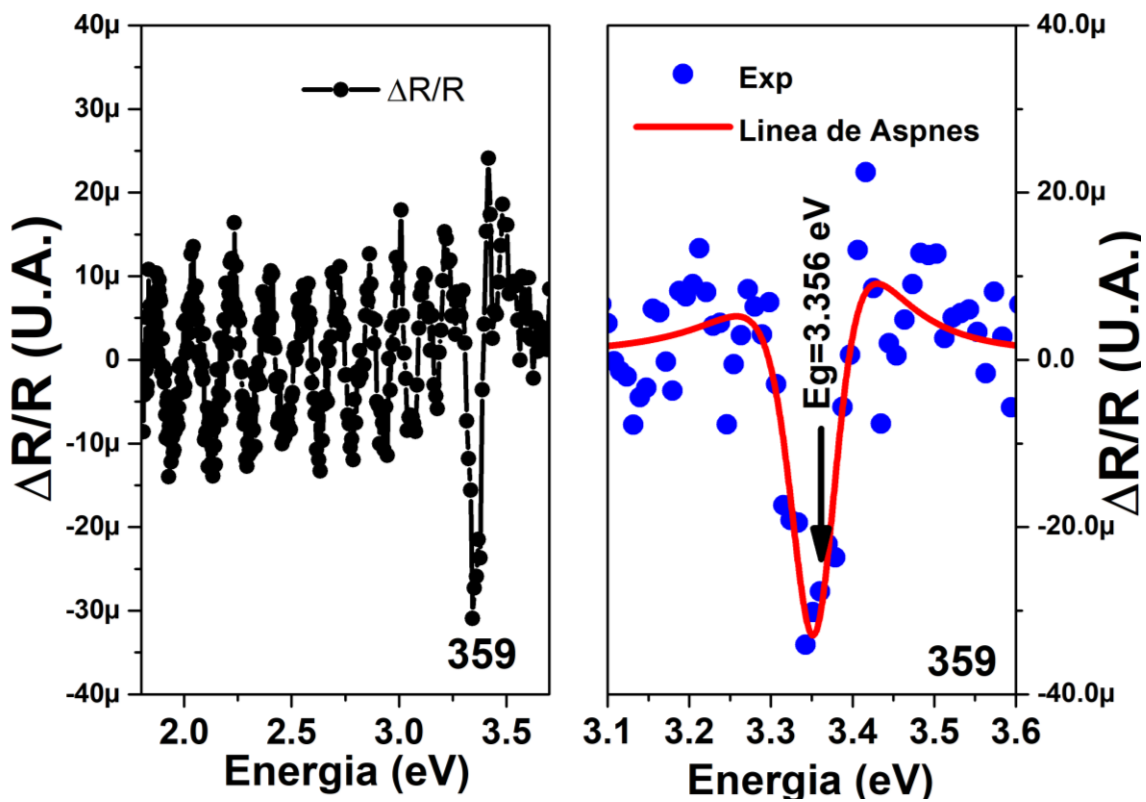


Figura V-21 Señal de PR de la muestra 359, se aprecia de nuevo oscilaciones por debajo del gap además de la señal cercana al gap, en el recuadro se presenta el ajuste de línea de Aspnes para la región del band gap del GaN.

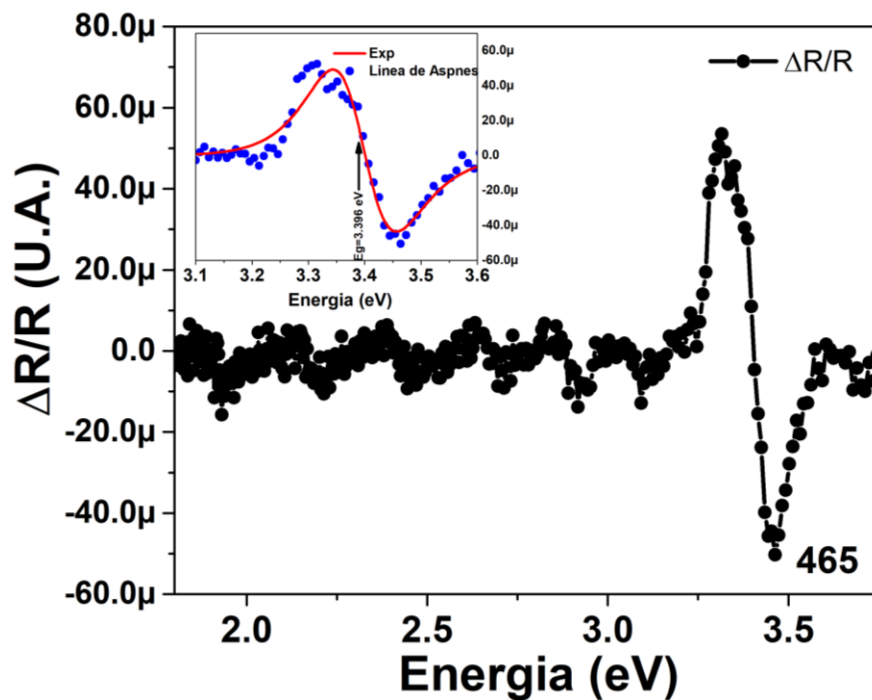


Figura V-22 Señal de PR de la muestra 465, se aprecia de nuevo oscilaciones por debajo del gap *además* de la señal cercana al gap, en el recuadro se presenta el ajuste de línea de Aspnés para la región del band gap del GaN.

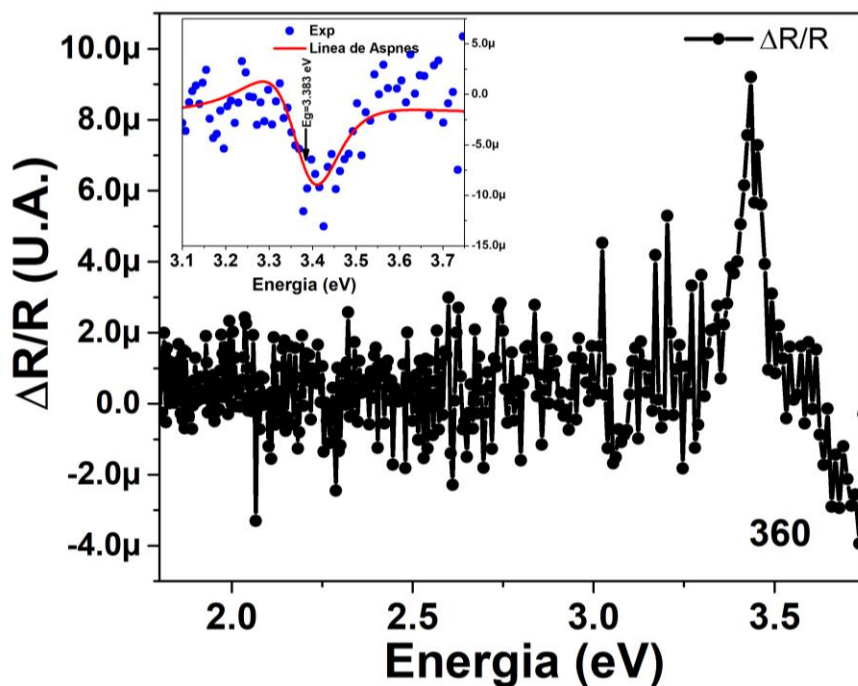


Figura V-23 Señal de PR de la muestra 360, se aprecia de nuevo oscilaciones por debajo del gap además de la señal cercana al gap, en el recuadro se presenta el ajuste de línea de Aspnés para la región del band gap del GaN.

El procedimiento es análogo para el caso de la muestra sin dopar, se resta de manera apropiada la señal primer-derivada y se hace el ajuste en la región de interés empleando la línea de Aspnes. Para el caso de las muestras dopadas el proceso es mucho más simple, dado que en estas las oscilaciones son más reducidas respecto a la señal cercana al gap, por lo que el ajuste se puede hacer de manera directa limitando la región de esta tal como se muestra en la Figura V-22 y Figura V-23.

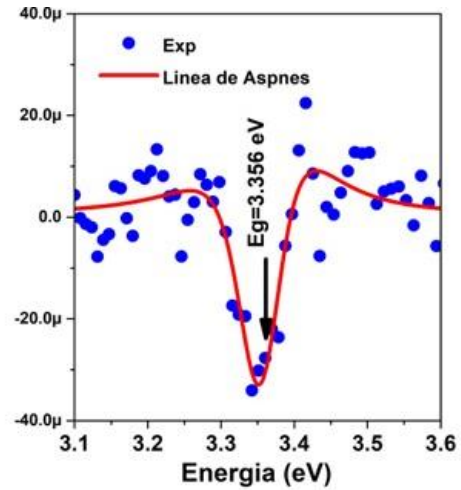
En la Figura V-24 se muestran los ajustes para cada una de las muestras de GaN sin dopar y dopadas, el gap tiene un valor cercano a 3.4 eV , los valores más relevantes son la posición de la transición y el ancho de estas, los cuales se presentan en la Tabla V-5.

Tabla V-5 Valores del band gap y ancho de los ajustes del GaN en fase hexagonal para la serie de muestra con dopaje de silicio.

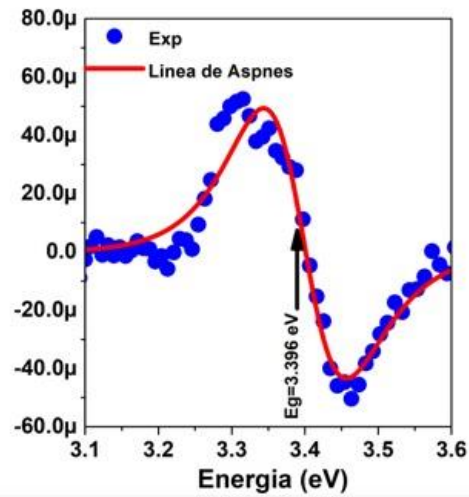
Muestra	T_{sus}	T_{si}	E_g	Γ
	(°C)	(°C)	(eV)	(meV)
M359	800	N/A	3.356	68.5
M465	800	1210	3.396	117.4
M360	800	1240	3.382	112.1

Se tiene que hay una disminución en el gap para las muestras dopadas, aunque el ancho de estas es aproximadamente el mismo, esta es una medición en principio de bulto del material, por lo que se aprecia sobre todo en la muestra M465, que hay un incremento del valor de la transición respecto a la muestra sin dopar, se abordara un poco más este efecto al final cuando se compare con los resultados de PL.

$T_{Si}=0^{\circ}C$
 $t=1350\text{ nm}$



$T_{Si}=1210^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$



$T_{Si}=1240^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$

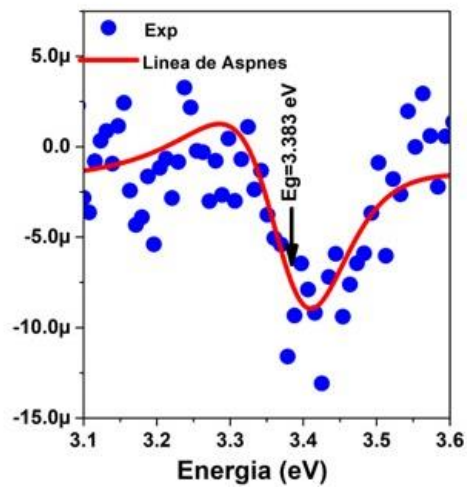


Figura V-24 Ajustes de línea para cada muestra como función de los parámetros de crecimiento para muestras de GaN/Si con dopaje intencional.

V.3 FOTOLUMINISCENCIA

Todas las muestras presentan una señal de luminiscencia, tanto cercana al gap como luminiscencia en el color amarillo del espectro, el balance entre estas dos depende drásticamente del dopaje y como veremos también, en función de los parámetros de temperatura, tanto de la celda de Galio como del sustrato. De nuevo mostramos los espectros para las dos series, a las muestras intrínsecas y las muestras dopadas.

V.3.1 Fotoluminiscencia en muestras intrínsecas

Para el caso de fotoluminiscencia (PL), al obtener la señal para todas las muestras (226-230), lo que nos permite analizar en orden cada una de estas. Recordemos que las muestras desde la 226 a la 230 tienen la misma estructura de GaN hexagonal sin impurificar, solo ligeros cambios en las temperaturas de crecimiento por lo que mostraremos los resultados y algunos comentarios sobre estas, luego hablaremos de sus similitudes y diferencias.

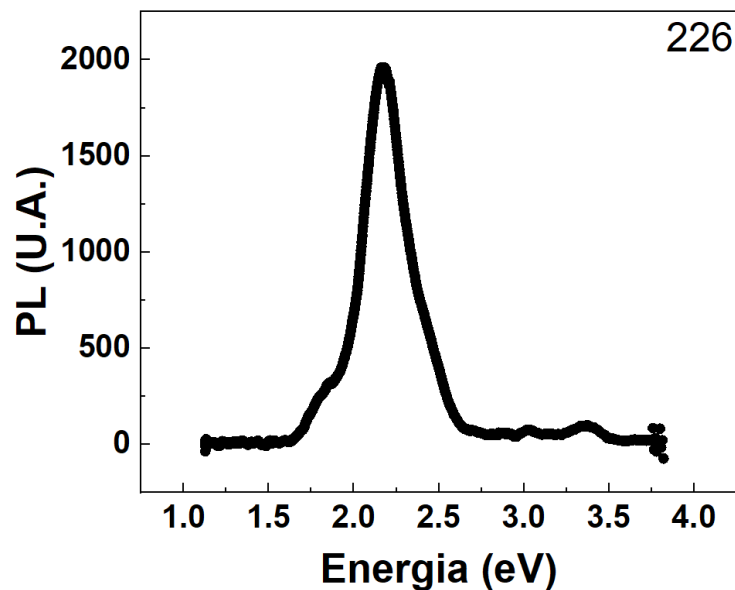


Figura V-25 Espectro de fotoluminiscencia para la muestra 226, donde se observa una señal amarilla ancha.

Para la muestra 226 se midió PL en la misma zona en la que se midió PR, esperábamos una emisión cerca al band gap del material que es 3.4 eV; además de posibles señales debido a

impurezas no intensionales que son características del GaN intrínseco. La señal más prominente en esta muestra es la centrada en 2.2 eV como se muestra en la Figura V-25.

Cabe aclarar que estas primeras señales de PL obtenidas en este trabajo de tesis fueron realizadas mediante el uso de un mini espectrofotómetro (MEF), con este equipo se realizó una lo cual, al ser una medición rápida, con la que se obtiene una permite la baja resolución espectral; sin embargo, como se esperan señales anchas al ser medidas a temperatura ambiente, no tendremos problemas al usar este equipo. Para corroborar, también hicimos mediciones con un tubo fotomultiplicador (PMT) y un espectrómetro de 0.5 m con una mayor resolución que el MEF (la cual aumenta de una resolución de $8nm \rightarrow 1 nm$, menor escala mayor resolución espectral). Otra diferencia entre estos dos detectores es que, también estriba en que el MEF tiene una sensibilidad pobre en la región UV comparado con el PMT (la sensibilidad en la región UV, del PMT es 4 veces mayor (en la hoja de especificaciones del fabricante) comparada con la resolución que exhibe el MEF que es un sensor CCD en la región UV ya que es una repuesta plana en el espectro visible, pero decae en el UV), por lo que se tiene una mayor señal en esta región cuando se emplea el PMT. Se observa en las Figura V-26, 5-27 y 5-28 donde obtenemos una señal muy ancha alrededor de 2.2 eV, que en la literatura se conoce como señal amarilla, la cual es visible a siempre vista como se muestra en la Figura V-28. Posteriormente, se hizo un análisis de la procedencia de cada pico y su contribución a la señal total de fotoluminiscencia. Para la señal de luminiscencia amarilla después se realizó un ajuste gaussiano, del cual se localizó el centro y el ancho de la señal, confirmando que es la señal amarilla comúnmente encontrada en GaN sin dopaje intencional. La señal que se encontró cercada al band gap (NBE) no es muy intensa en comparación a la amarilla, esta transición también se ajustó. La señal NBE se nota con mayor intensidad en la medición con el PMT que en la medición con el MEF, principalmente debido a la mayor sensibilidad del PMT, como ya se mencionó, véase Figura V-27.

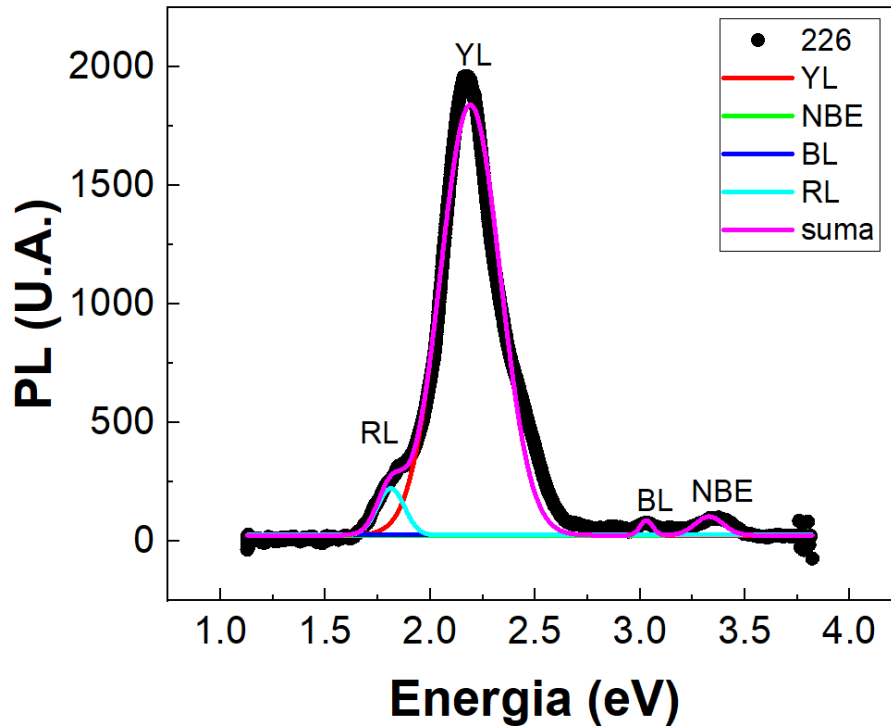


Figura V-26 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 226 con MEF, donde se puede apreciar que tenemos una señal amarilla muy ancha.

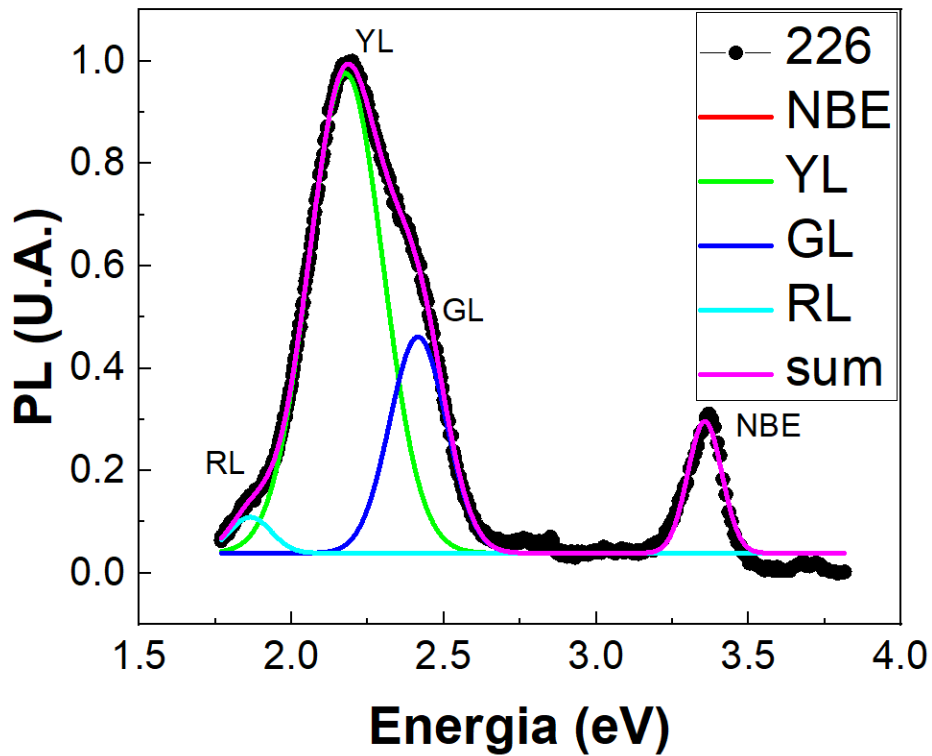


Figura V-27 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 226 con PMT, donde se observa la señal amarilla intensa en comparación de la señal cercana al band gap.

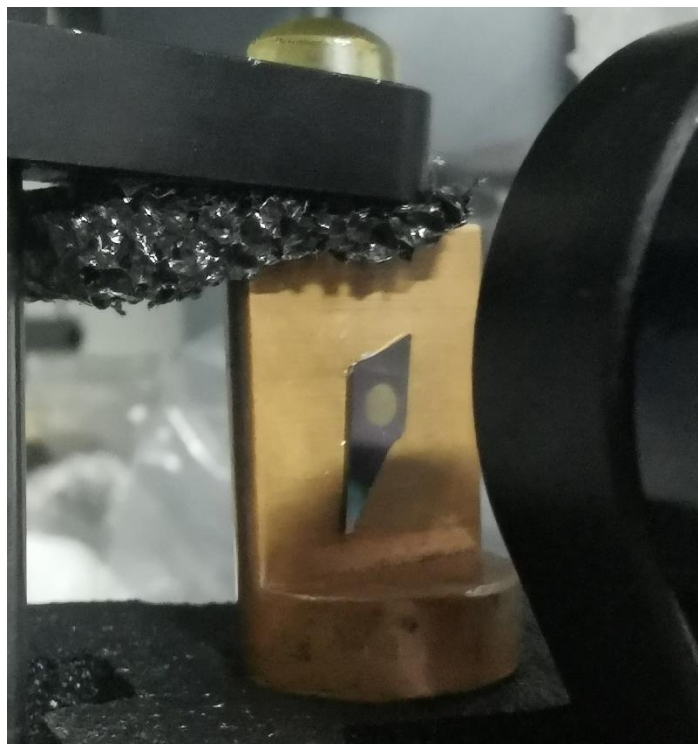


Figura V-28 Fotografía de la muestra 226, donde se observa la luminiscencia amarilla a simple vista.

En el análisis detallado del espectro de PL de la muestra 226, se encontró que la señal de 2.2 eV no es solo luminiscencia amarilla, sino que la señal tiene contribuciones rojas y verdes, este tipo de señal es muy común en GaN hexagonal sin dopaje, su origen es un tema de discusión hasta el momento., Algunos reportes iniciales indicaban que la señal amarilla debía su presencia a impurezas intrínsecas de carbono. En los estudios más recientes del tema, las señales se atribuyen a vacancias de galio, acompañadas por carbono en sitios de nitrógeno en la red [44]. Por otro lado, la señal roja se ha observado en espectros de fotoluminiscencia de GaN, dado que su rango es muy cercano a la señal amarilla suele ser como un hombro de esta señal, su origen se ha asociado con a puntos de defectos más o menos uniformemente distribuidos por la red; es decir, defectos de bulto. Usualmente la señal NBE es ancha y de baja intensidad en comparación con la amarilla, de hecho, esta señal es más evidente cuando se tienen condiciones de crecimiento ricas en galio [45]. La señal verde que está totalmente relacionada con la señal roja, de la misma manera aparece como un hombro de la señal amarilla, a temperatura ambiente esta tiene origen con defectos de pares electrón-fonon, esto se evidencia ya que en estudios a baja temperatura sobre esta señal

favorece que sea este el defecto que provoque la transición [46]. Respecto a la señal cercana al band gap como podemos observar, esta señal no es tan intensa como la señal amarilla a temperatura ambiente, sin embargo, en la medición con el PMT es claramente visible y su posición concuerda con la reportada en la literatura [47]. Ahora veamos los resultados de toda la serie las cuales se muestran empleando los dos arreglos experimentales que se utilizaron en este estudio.

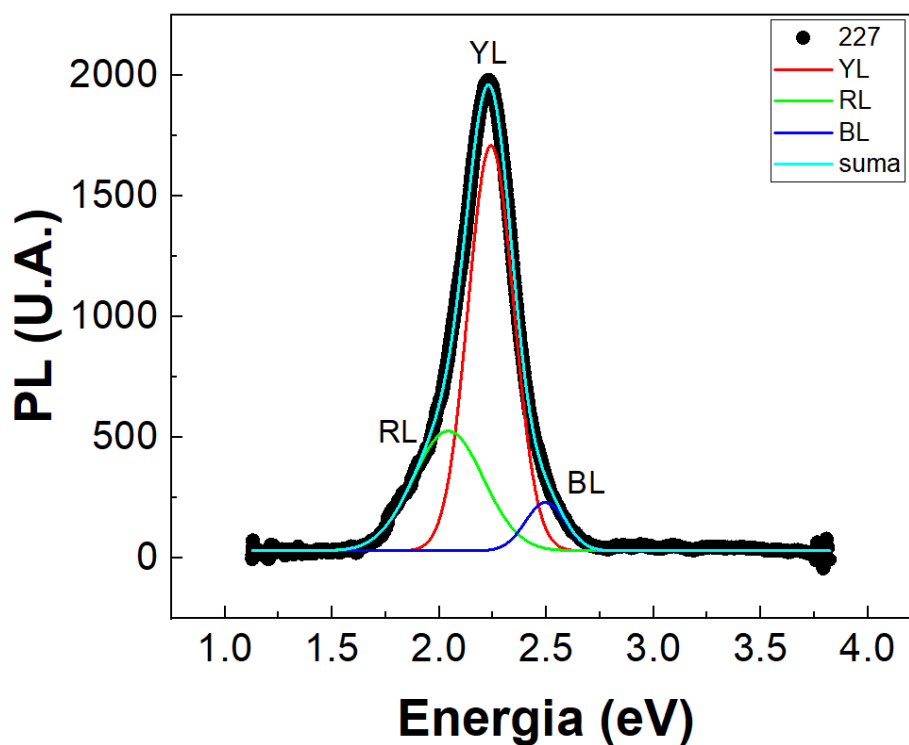


Figura V-29 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 227 con MEF, donde se puede apreciar que tenemos una señal amarilla muy ancha

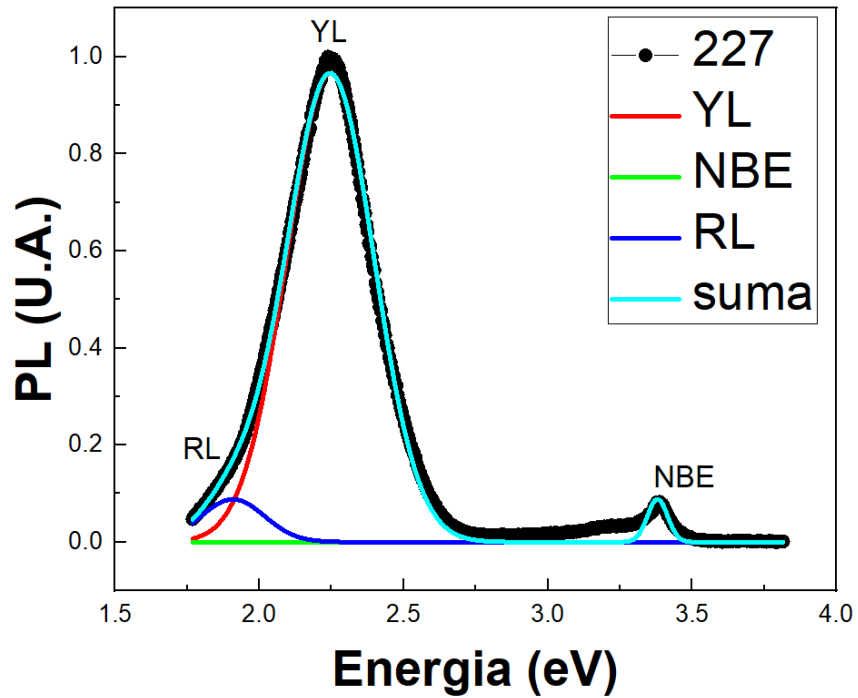


Figura V-30 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 227 con PMT, donde se observa la señal amarilla intensa en comparación de la señal cercana al band gap además de ser esta más débil que en la muestra 226.

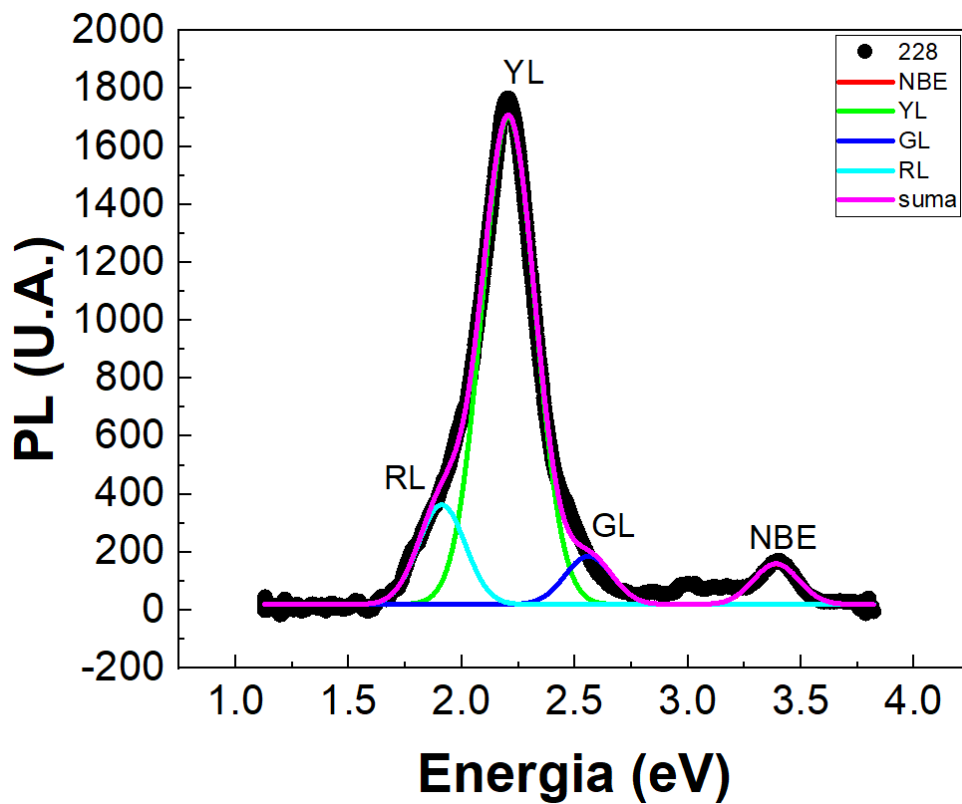


Figura V-31 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 228 con MEF, donde se puede apreciar que tenemos una señal amarilla ancha, y una señal cercana al band gap con mucho mas cuerpo.

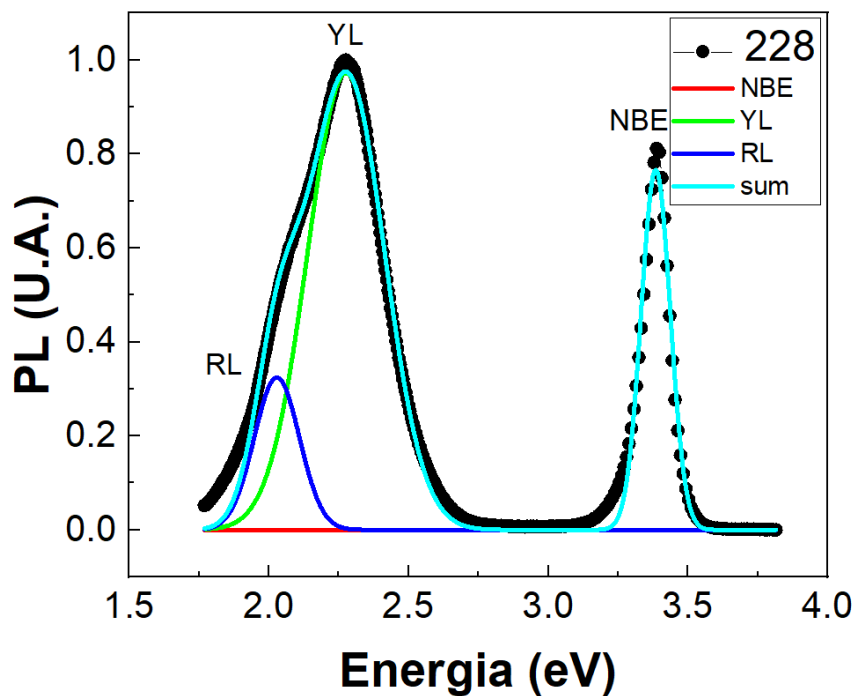


Figura V-32 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 228 con PMT, donde se observa la señal amarilla es comparable con la señal cercana al band gap.

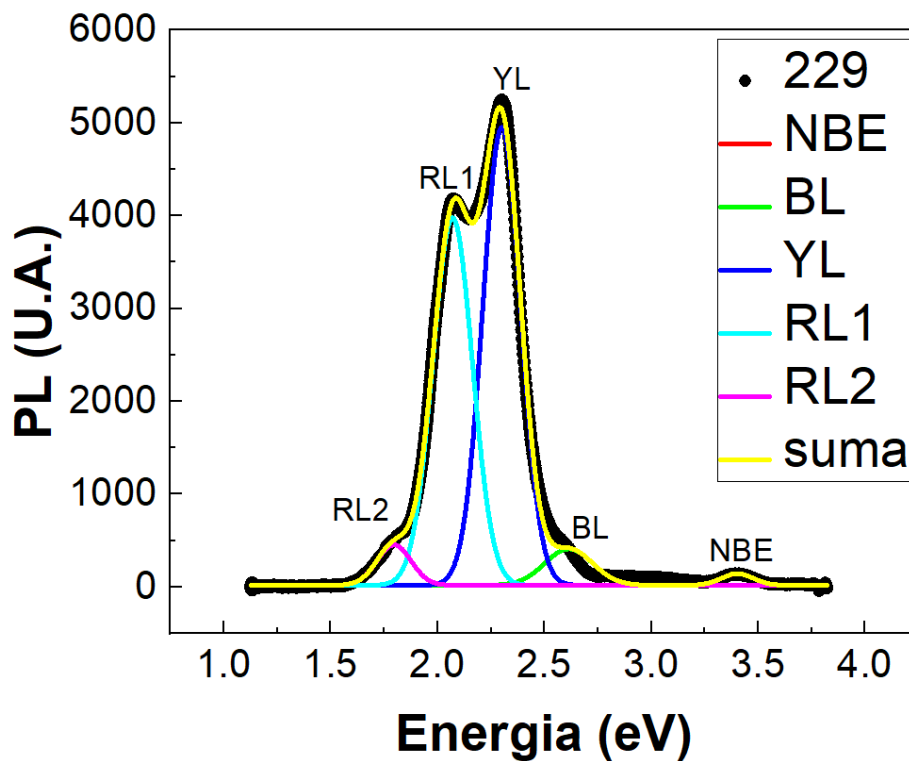


Figura V-33 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 229 con MEF, donde se puede apreciar que tenemos una señal amarilla ancha donde claramente contribuye a ella luminiscencia tanto rojas como azul.

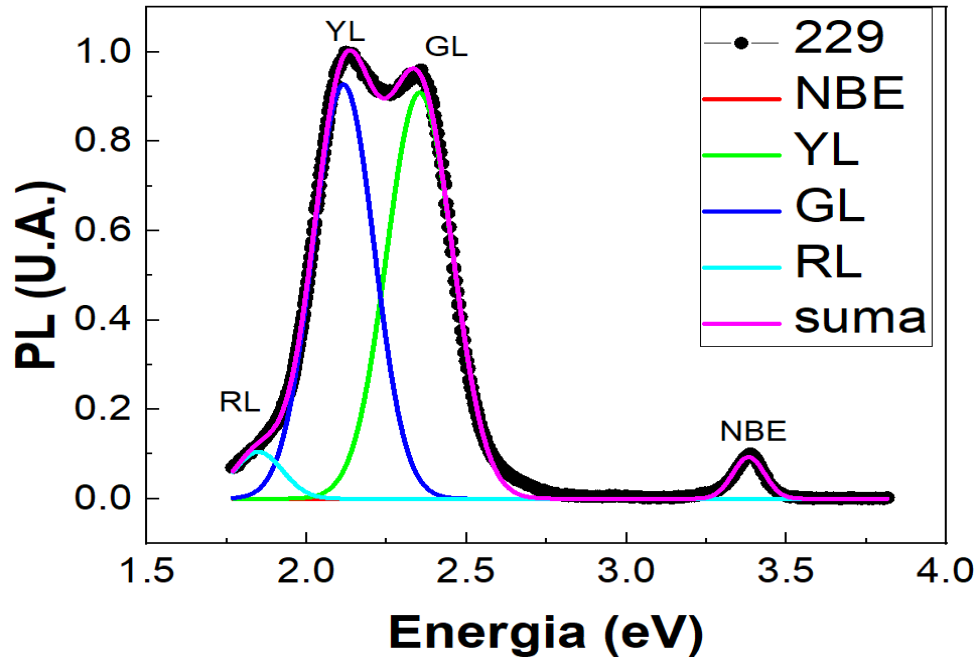


Figura V-34 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 229 con PMT, donde podemos ver que como el PMT tiene menor resolución cerca de la señal amarilla en este caso puede percibir una luminiscencia verde.

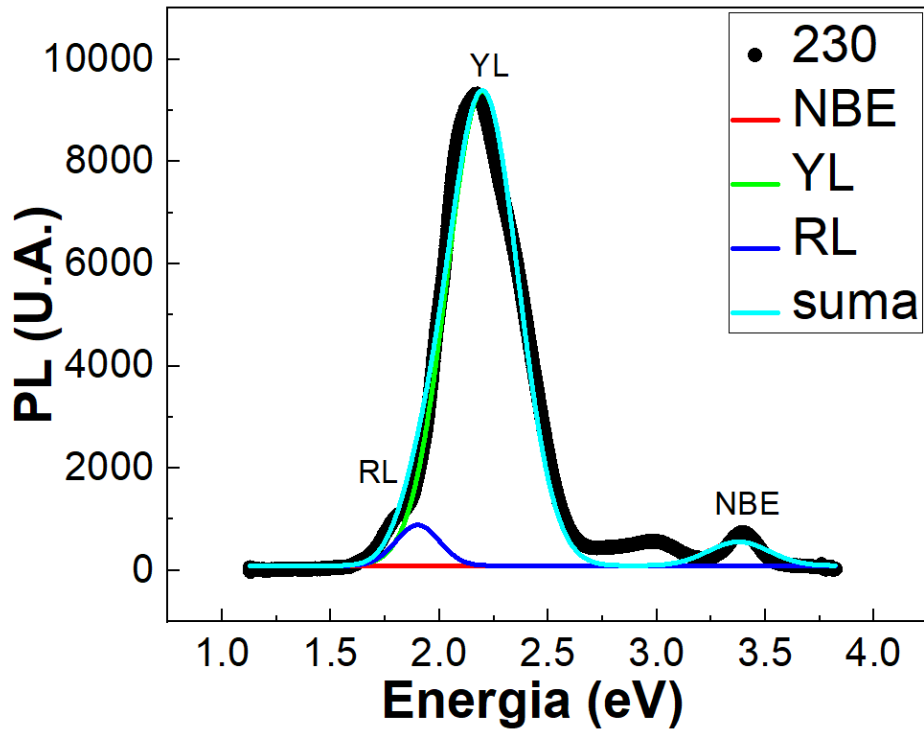


Figura V-35 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 230 con MEF, donde se puede apreciar que tenemos una señal amarilla ancha, y una señal cercana al band gap con mucho mas cuerpo

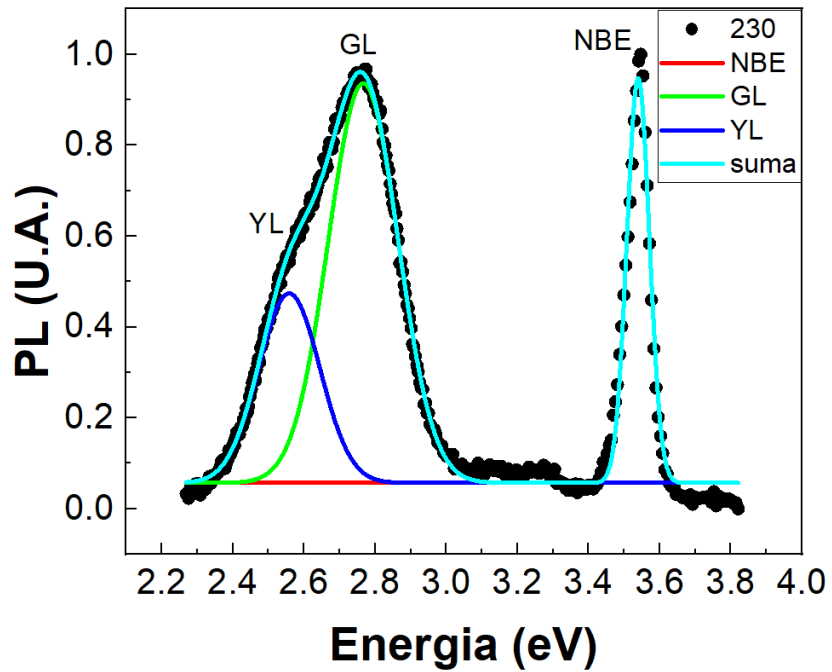


Figura V-36 Ajuste Gaussiano para la señal de fotoluminiscencia de la muestra 230 con PMT, donde podemos ver que como el PMT tiene menor resolución cerca de la señal amarilla en este caso puede percibir una luminiscencia verde contribuye más visto por el PMT.

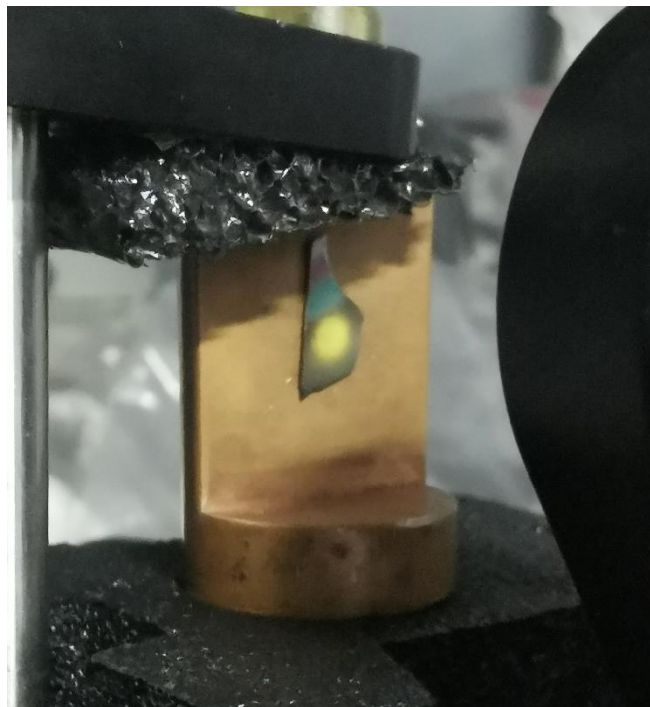


Figura V-37 Fotografía de la muestra 227, donde se observa la luminiscencia amarilla.

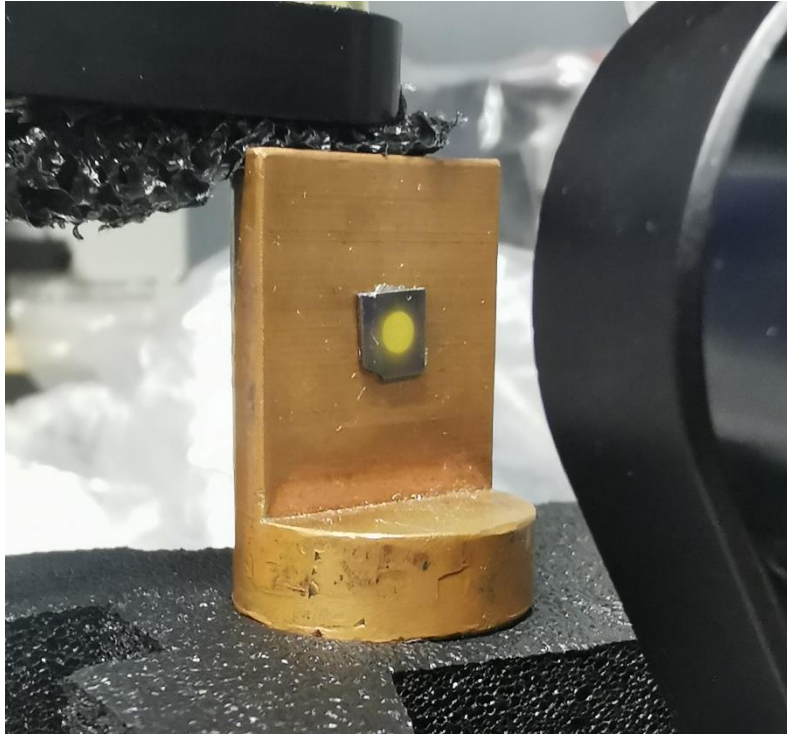


Figura V-38 Fotografía de la muestra 228, donde se observa la luminiscencia amarilla en una zona muy concentrada

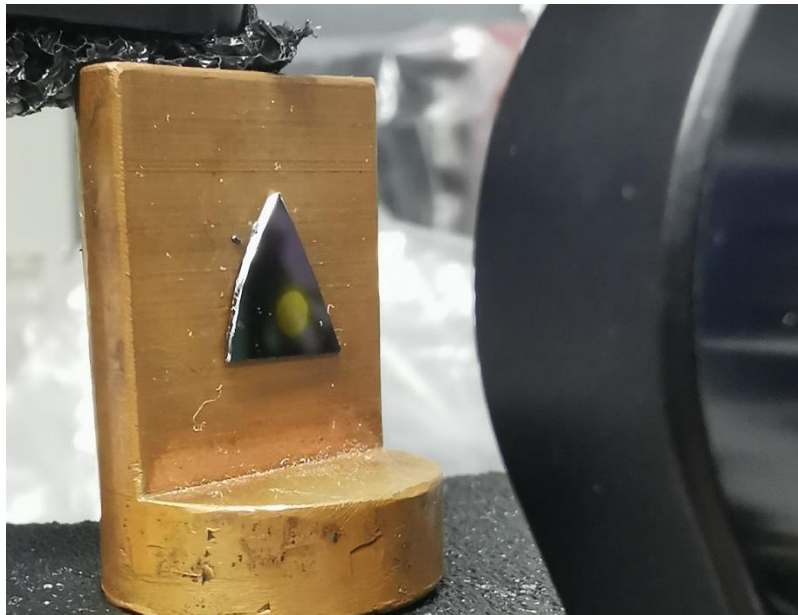


Figura V-39 Fotografía de la muestra 229, donde se observa luminiscencia amarilla, pero mucho más tenue en comparación de las de muestras anteriores

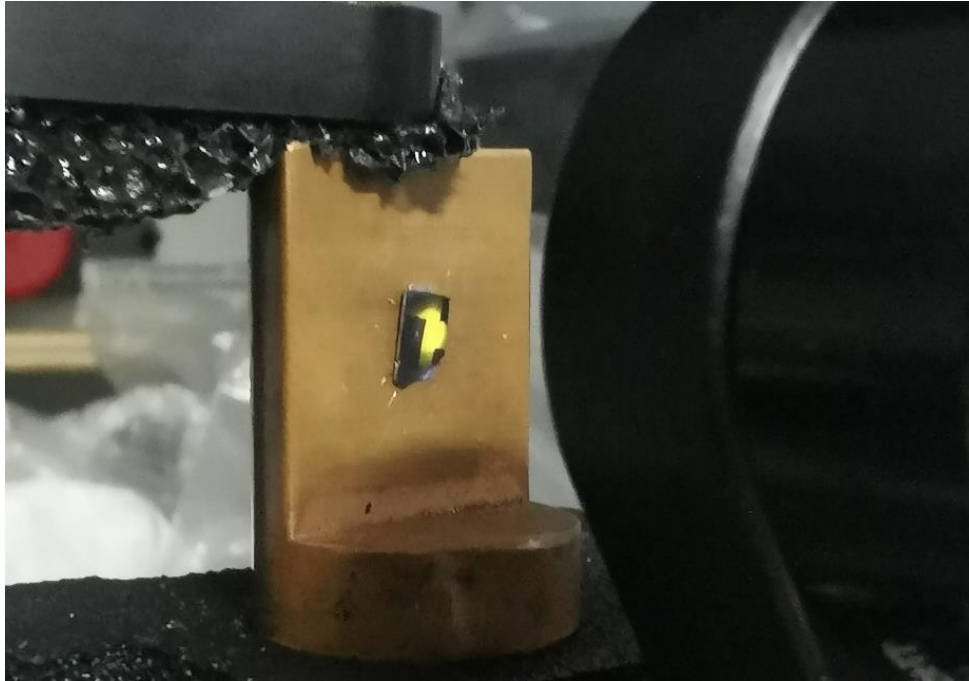


Figura V-40 Fotografía de la muestra 230, donde se observa la luminiscencia amarilla además se puede ver claramente que esta por secciones de la muestra.

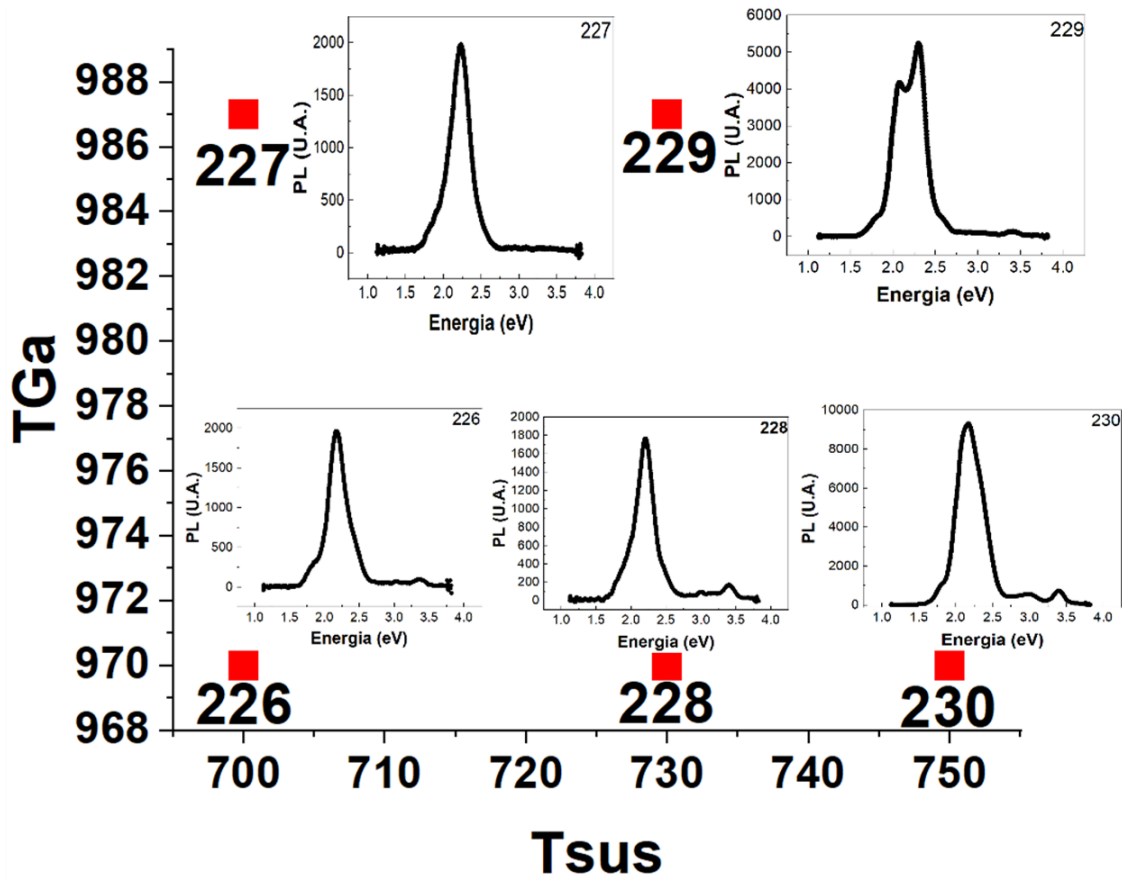


Figura V-41 Fotoluminiscencia para cada una de las muestras de la serie sin dopar medidas con el MEF.

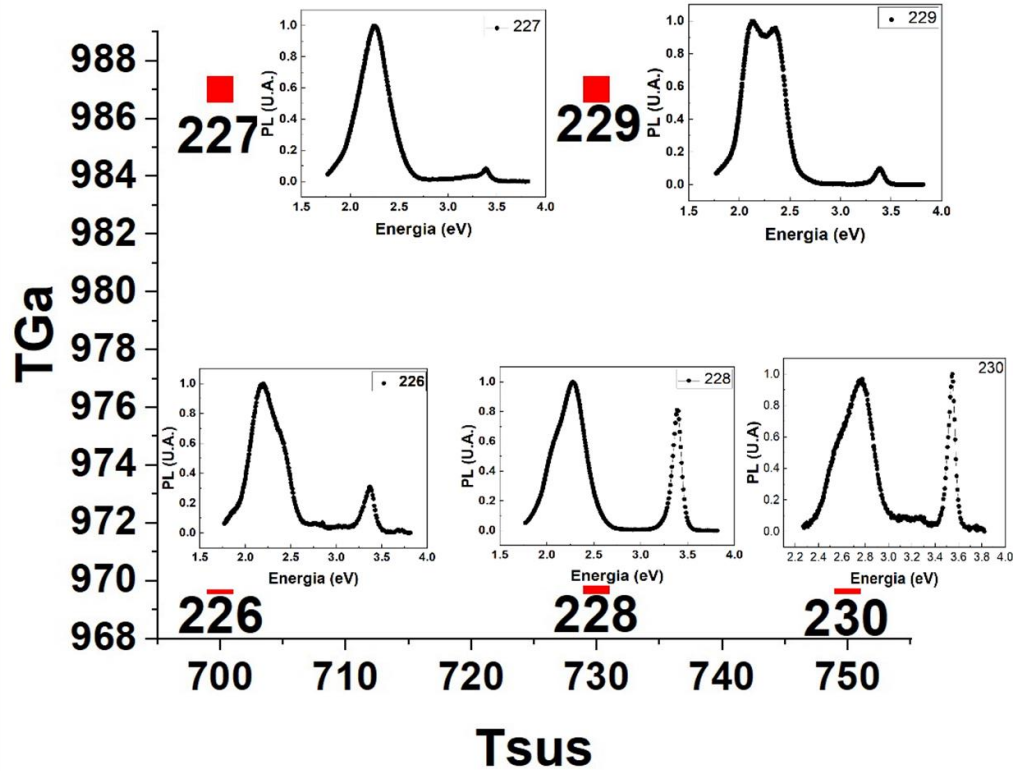


Figura V-42 Fotoluminiscencia para cada una de las muestras de la serie sin dopar medidas con el PMT.

Tabla V-6 De los valores obtenidos experimentalmente, se puede ver el ancho del pico de la señal cercana al band gap de cada muestra exponiendo que para el caso sin dopaje intencional tenemos un ancho similar.

Nombre	Pico de luminiscencia	Ancho del pico	T_{Ga}
	(eV)	(meV)	(°C)
M226	3.3678	103±2	970
M227	3.3844	73±5	987
M228	3.3848	99±5	970
M229	3.3823	92±4	987
M230	3.3677	97±3	970

Como podemos ver tenemos un efecto muy curioso en nuestra serie de muestras sin dopar, lo que sucede es que cuando la temperatura de la celda de galio es mayor, tenemos una señal cercana al band gap más débil, como se puede ver en las Figura V-44 y 5-45, se ve claramente que las muestras 227 y 229 tienen una disminución de la señal comparadas con las muestras que no fueron crecidas a menores temperaturas de galio y con la misma temperatura de

sustrato como es el caso de 226-227 y 228-229, las cuales nos revelan este hecho. Además, de que al aumentar la temperatura del sustrato se aumenta aún más la intensidad de la señal cercana al band gap; de hecho, la condición de crecimiento rico en galio, provoca gotas (droplets) las cuales provocan una atenuación en el borde de la banda de fotoluminiscencia y menores tiempos de vida de la emisión a temperatura ambiente, comparada con películas con menor cantidad de galio [48], y a temperatura baja cuando se tiene condiciones ricas de galio, lo que sucede es que las emisiones excitónicas desaparecen, debido a las dislocaciones que se provocan en la red [49]. Por lo que es común ver que el exceso de galio durante el crecimiento de GaN, de como resultado características más débiles en fotoluminiscencia, sin embargo, aumentando la temperatura del sustrato se tiene una señal mejor en todos los casos, de esta manera podemos jugar con los parámetros de crecimiento en caso de que se quiera una síntesis rica en galio, si se desea una buena emisión cercana al band gap, tendría que tener una temperatura de 750 °C, para nuestro caso que fue la temperatura más alta en este estudio.

Entonces lo que podemos decir de los picos obtenidos en las señales PL de nuestras muestras, es que presentan la llamada señal amarilla en todas las que no son dopadas, esto es, un fenómeno que se ha observado en bastantes muestras de GaN hexagonal crecidas por MBE, su zona es entre 2 – 2.2 eV cuando tenemos GaN sin dopaje se debe a vacancias de Ga (V_{Ga}) junto a carbono en sitios de N (C_N), además de ser el primer vecino con una vacancia [44], donde el autor realizó un cuidadoso análisis de los posibles culpables para esta señal, encontró que el culpable es un defecto C_N en específico la señal YL1 que es la que se encuentra centrada en 2.2 eV, este defecto fue observado mediante distintas técnicas de crecimiento para GaN, aún no se descartan los otros posibles defectos (dado que la señal PL es muy sensible a ellos) como $V_{Ga} - 3H$, $V_{Ga}O_N - 2H$ e incluso una V_{Ga} aislada pueden provocar señales como la YL1, sin embargo hasta no tener evidencia experimental confiable para estos defectos, el defecto responsable hasta el momento es un C_N aislado.

También está la señal roja que se ha observado en los espectros para el GaN, su rango es muy cercano, la primera es 2 eV y la segunda en 1.8 – 1.85 eV, esta se debe a puntos de defectos más o menos uniformemente distribuidos por la red; es decir, defectos de bulto, como usualmente son señales anchas es difícil atribuirse a excitones o defectos de red. Pero se sabe

que se suelen ver en GaN rico en Ga, suele manifestarse como un pequeño hombro en la señal amarilla, esta señal tiene muy poca intensidad comparada a la señal amarilla, sin embargo, su tiempo medio de vida es mucho mayor, comparado con la amarilla. En GaN de alta calidad cristalina se ve esta señal separada, usualmente es cuando se sintetiza por MBE o HVPE [50].

V.3.2 Fotoluminiscencia de muestras dopadas

La primera muestra que es la de control presenta una luminiscencia similar a las muestras con menor espesor, se distingue tanto la luminiscencia cercana al gap como la luminiscencia amarilla. Las Figura V-43 y Figura V-44 que corresponden a la muestra 359, se aprecia claramente las dos señales antes mencionada. La luminiscencia igualmente es observable a simple vista como se ve en la Figura V-50.

Ahora bien, para las dos muestras dopadas se tiene una disminución drástica de la luminiscencia amarilla respecto a la luminiscencia cercana al gap, el cual aumenta con la concentración, tal como se encuentran en los espectros tomados tanto por MEF como con el PMT. Esta reducción de luminiscencia amarilla como función del dopaje está claramente marcada en las imágenes ópticas de la luminiscencia figuras Figura V-51 y Figura V-52.

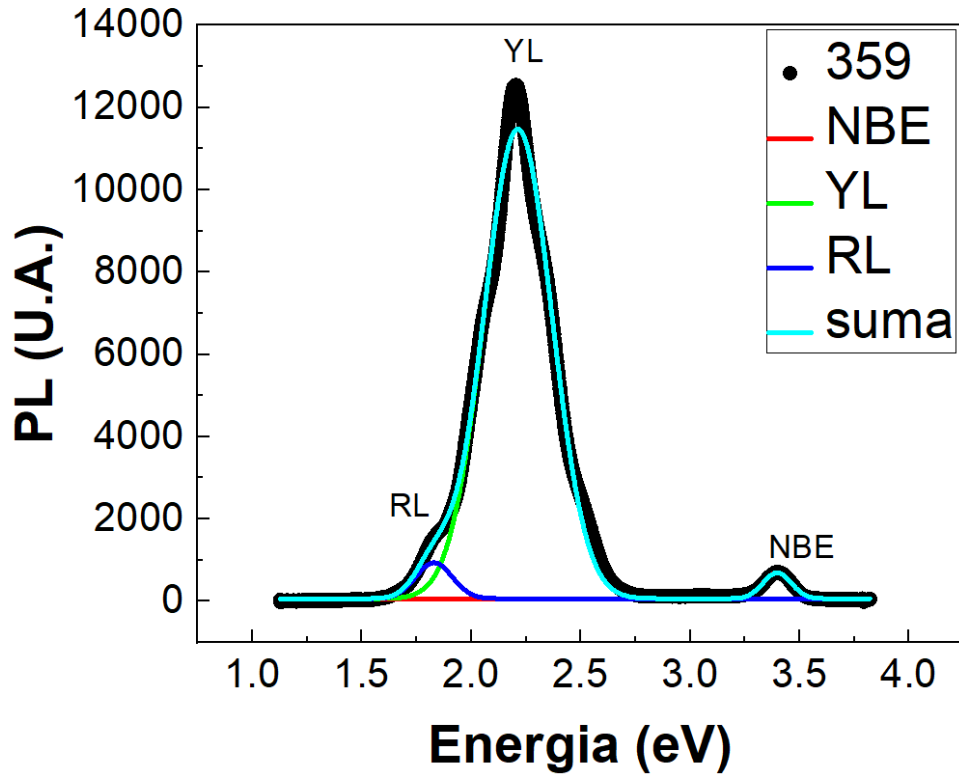


Figura V-43 Espectro PL medido con el MEF para la muestra 359, donde al ser una muestra sin dopaje muestra un espectro similar a la serie anterior.

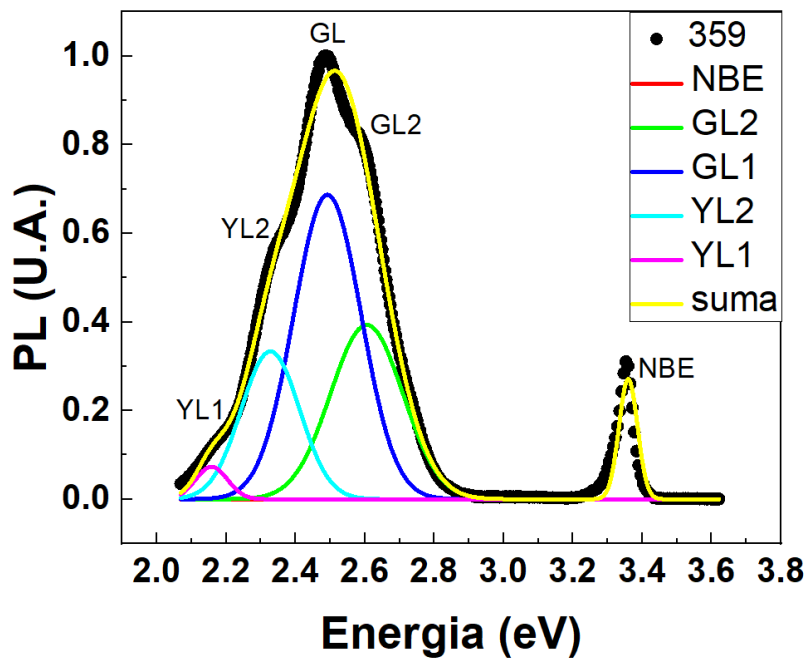


Figura V-44 Espectro PL medido con el PMT para la muestra 359, donde al ser una muestra sin dopaje muestra un espectro similar a la serie anterior.

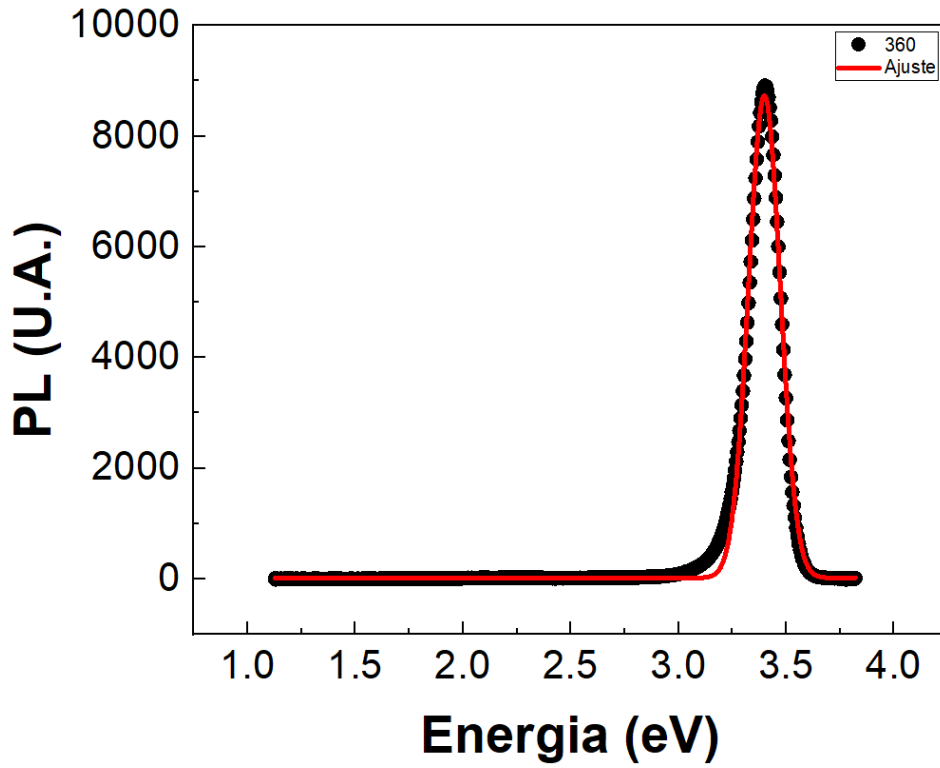


Figura V-45 Espectro PL medido con el MEF para la muestra 360, donde nos sorprende no ver la señal amarilla, pero al tener dopaje intencional se esperaba que cambiase.

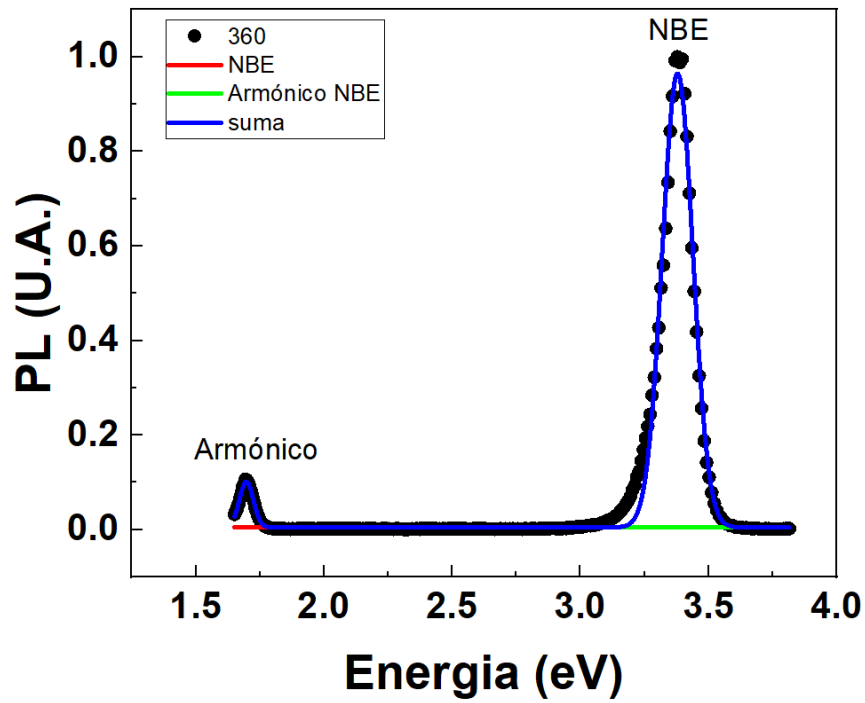


Figura V-46 Espectro PL medido con el PMT para la muestra 360, donde nos sorprende no ver la señal amarilla, en su lugar lo que tenemos es el armónico de la señal cercana al band gap.

En el espectro de la muestra 465 de dopaje medio , claramente se ve la señal amarilla, la cual en un espectro simple no es posible distinguir debido a que la señal cerca es tan alta que satura el detector, así que decidimos colocar un filtro pasa altas en 400 nm para bloquear la señal cercana al gap y de esa forma ver si la señal amarilla seguía ahí., en la Figura V-47 mostramos el espectro de la muestra con mayor dopaje con y sin filtro, la señal amarilla es claramente visible en el espectro con filtro.

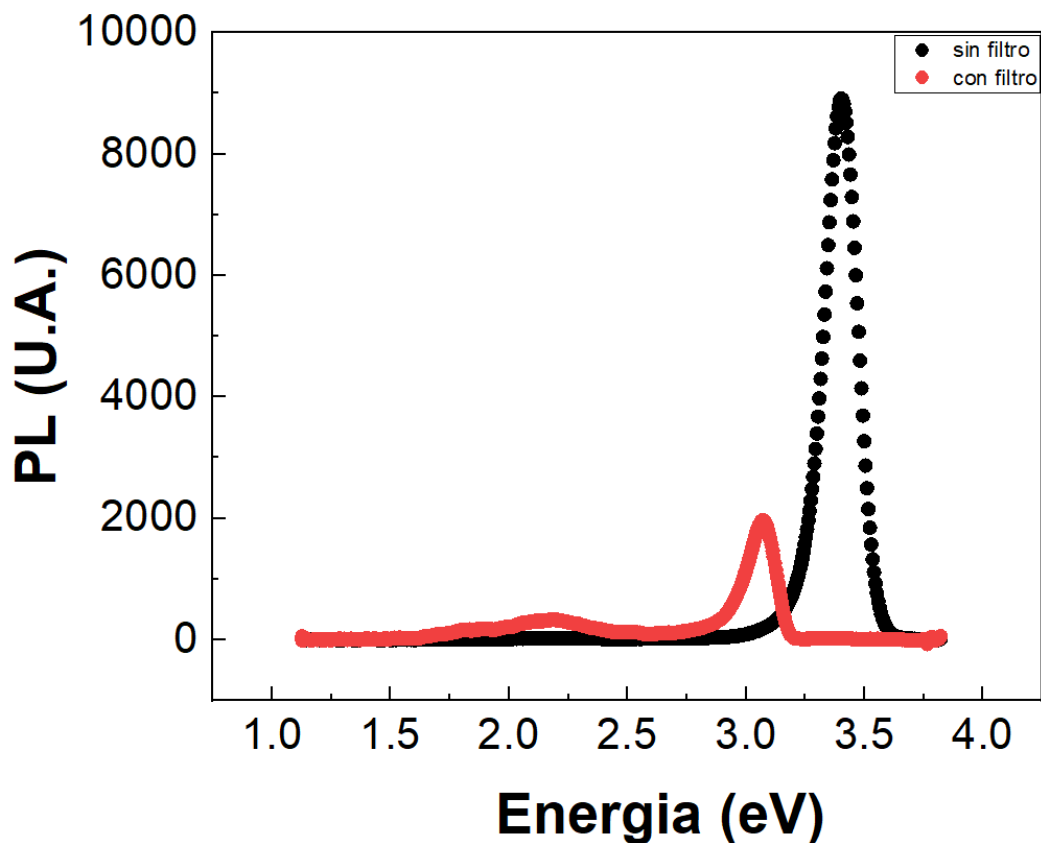


Figura V-47 comparación del espectro de PL medido con MEF, para la muestra 360 con filtro y sin filtro, la cual aun con filtro la señal amarilla es muy pobre a un lado de la cercana al band gap.

Así para una comparación de la tendencia de la señal de PL respecto al dopaje, se tienen las Figura V-53 y Figura V-54 para el arreglo con el MEF y el de PMT respectivamente.

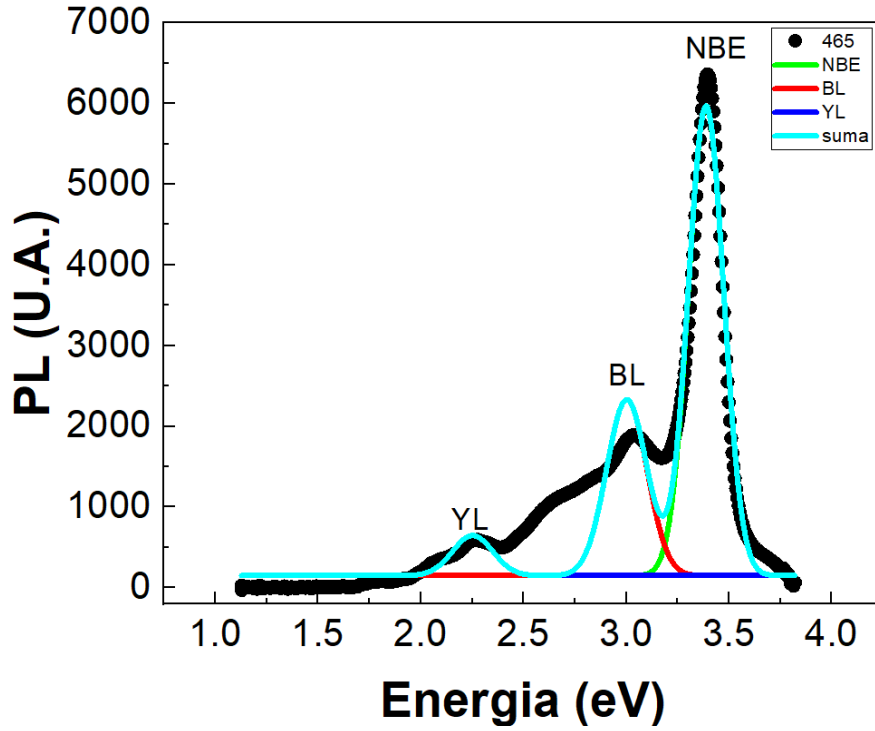


Figura V-48 Espectro de PL con ajuste gaussiano para la muestra 465 hecho con el mini espectrofotómetro, donde se observan la señal cercana al gap, la amarilla y azul.

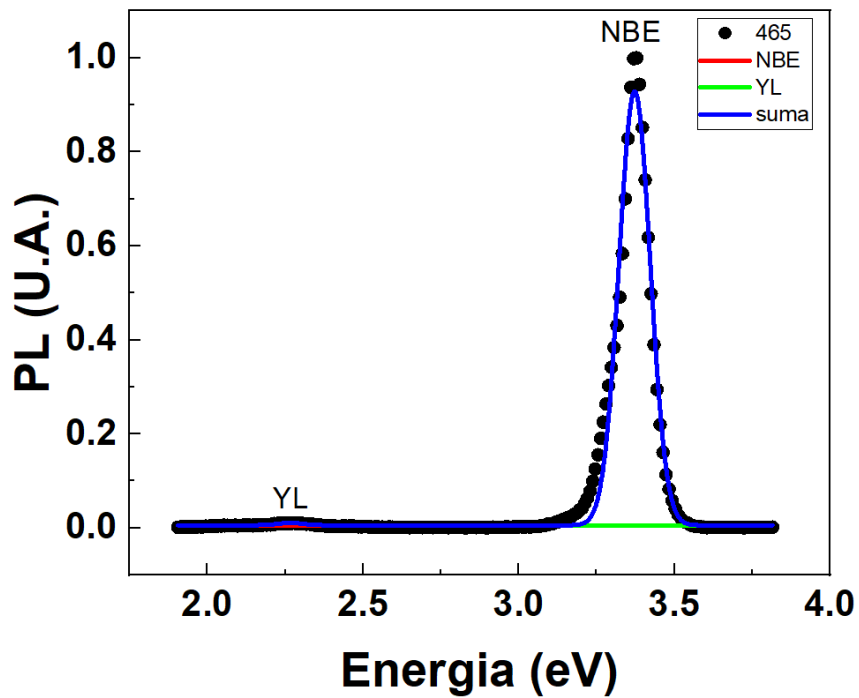


Figura V-49 Espectro de PL con ajuste gaussiano para la muestra 465 hecho con el PMT donde se observan la señal cercana al gap y la señal amarilla.

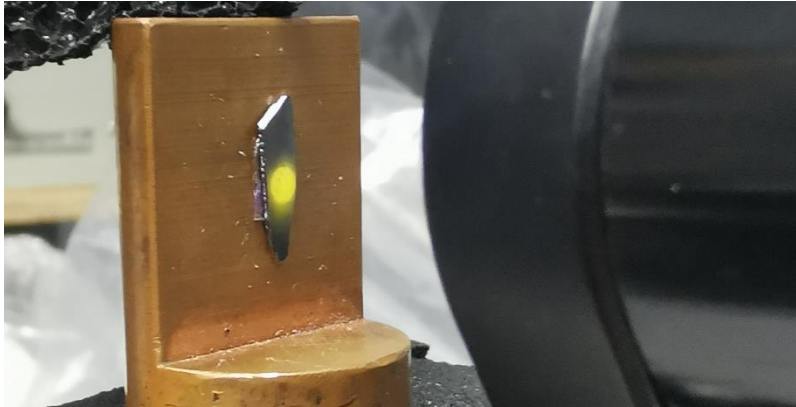


Figura V-50 fotografía de la luminiscencia de la muestra 359.

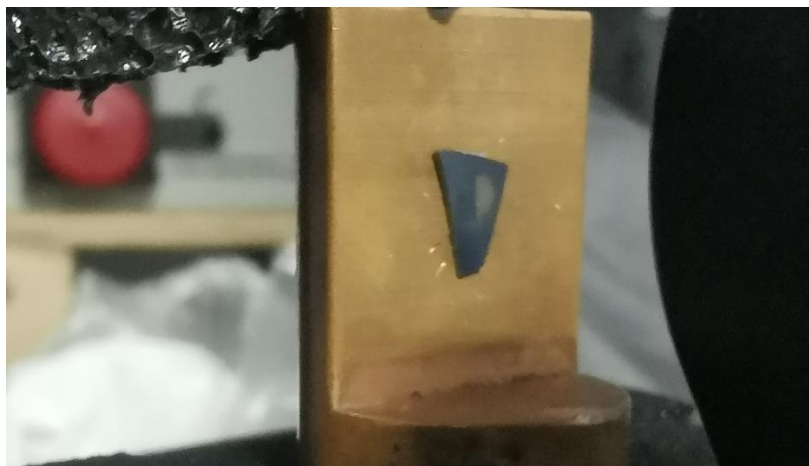


Figura V-51 fotografía de la luminiscencia de la muestra 465.



Figura V-52 fotografía de la luminiscencia de la muestra 360.

$T_{Si}=0^{\circ}C$
 $t=1350\text{ nm}$

$T_{Si}=1210^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$

$T_{Si}=1240^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$

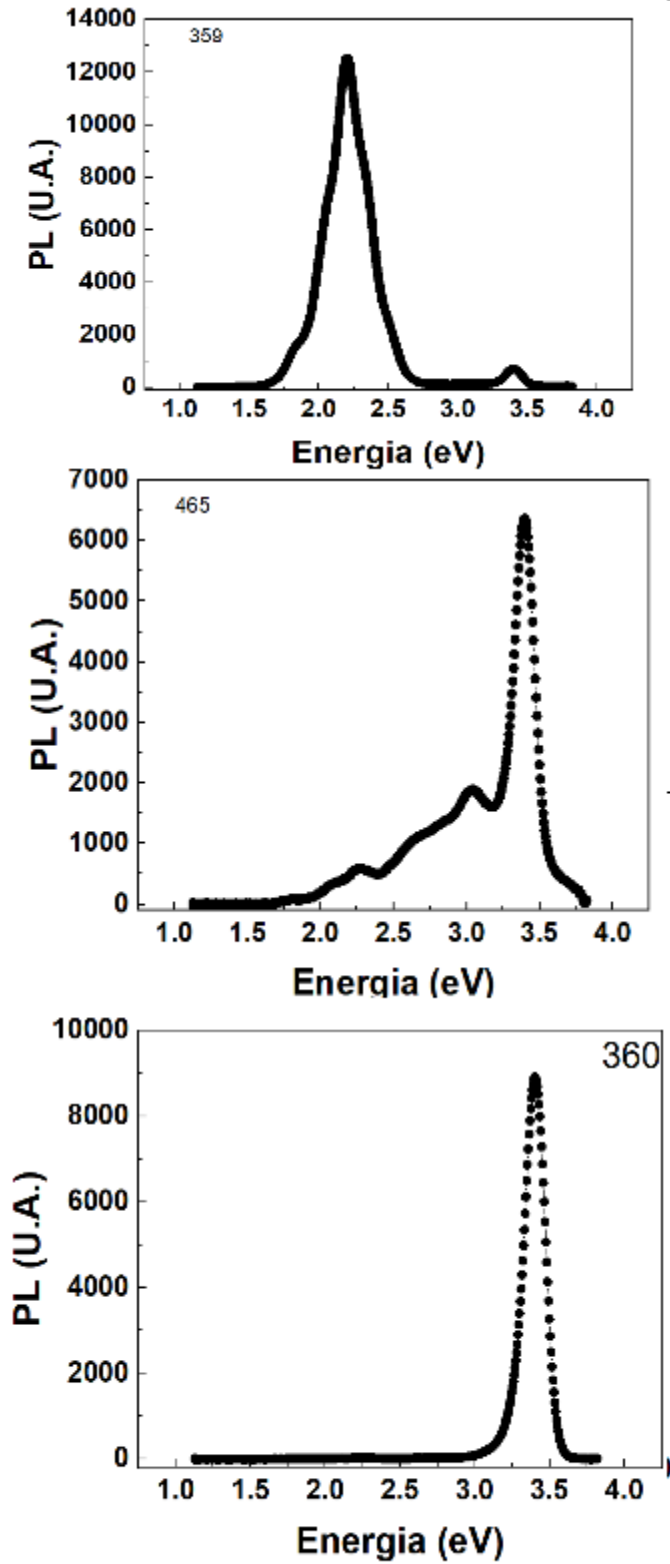
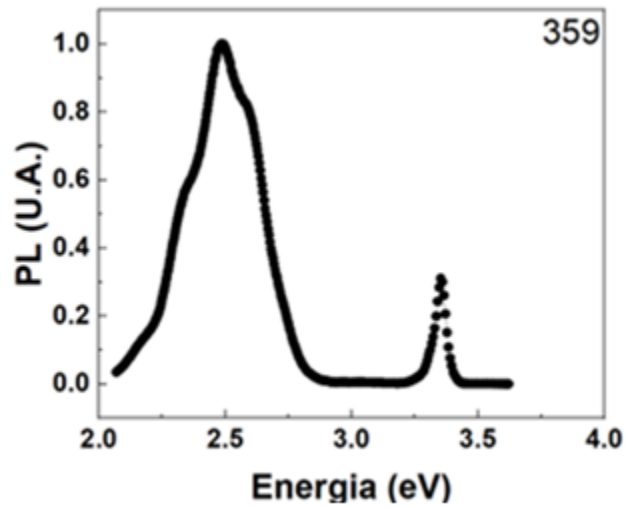
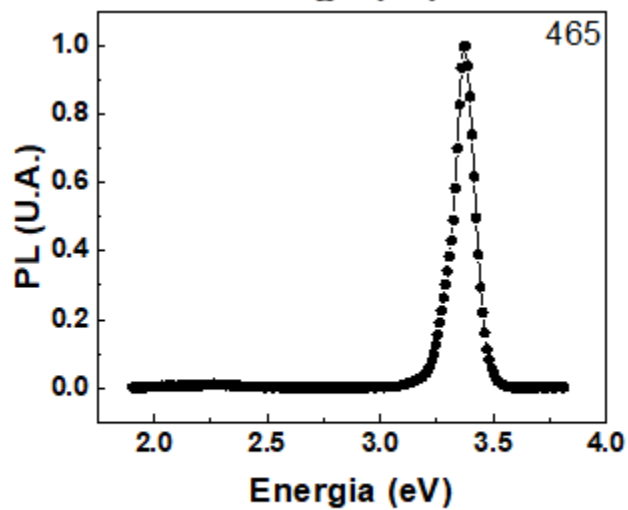


Figura V-53 fotoluminiscencia para cada una de las muestras de la serie dopada medidas con el MEF.

$T_{Si}=0^{\circ}C$
 $t=1350\text{ nm}$



$T_{Si}=1210^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$



$T_{Si}=1240^{\circ}C$
 $t=1440\text{ nm}$

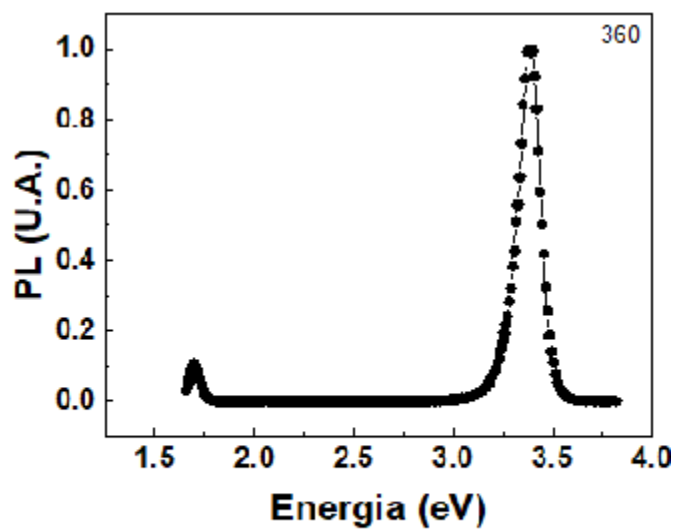


Figura V-54 Fotoluminiscencia para cada una de las muestras de la serie dopada medidas con el PMT.

Empleando las señales de mayor resolución del PMT, se llevan a cabo los ajustes correspondientes empleando una línea gaussiana para el pico cercano al gap los resultados se muestran en la tabla 5-4.

Tabla V-7 Comparación entre los anchos de picos de la señal cercana band gap para la serie dopada.

Nombre	Pico de luminiscencia (eV)	Ancho del pico (meV)
M359	3.3917	59±3
M465	3.3787	85±5
M360	3.3793	103±5

Esto refuerza nuestra sospecha de que el dopaje ensancha la señal cercana al gap, esto ya había sido observado en GaN sobre zafiro [51], esta vez lo estamos observando en GaN sobre sustratos de silicio. además de que lo vemos a temperatura ambiente, incluso en la muestra 360 se puede observar el armónico de la señal cercana al gap y prácticamente nada de presencia de la señal amarilla, además, cuando hay dopaje de silicio intencional, tenemos que la señal amarilla disminuye su intensidad en cuanto su concentración [52] porque lo explica el hecho de que las muestras dopadas, entre mayor el dopaje de silicio hay menor señal amarilla. Otra cosa que cabe recalcar hay muchos estudios de PL para GaN donde se observa una evidente señal azul, pero porque no la observamos en ninguna de nuestras muestras lo que se atribuye es que esta señal azul para GaN se observa principalmente en GaN crecido por MOCVD, en los casos donde se sintetiza mediante MBE, no es común el encontrar esta señal azul, esa es la razón de porque no se observó la señal azul en nuestras series de muestras.

El mecanismo de la señal amarilla en la muestras de GaN este mecanismo es un acertijo sin resolver debido a que el origen de la luminiscencia amarilla como tal, aún se encuentra en discusión, ya que al tener distintos métodos de crecimientos para las películas de GaN, cada una con sus peculiaridades, dependiendo de estas se obtienen posibles responsables para estas, como se mencionó anteriormente Reshchikov [53], señala que actualmente el culpable más acertado es carbono en el sitio de un nitrógeno en la red del cristal, tomando este como

responsable ahora ¿qué mecanismo es el que provoca esta luminiscencia? este problema ha sido estudiado principalmente a bajas temperaturas, donde se tienen dos posibles mecanismos los cuales son el par donador aceptor (DAP) y la transición de unión libre (eA) la cual consiste en la captura de un electrón libre por un ion.

Lo que ocurre en nuestro caso, es que tenemos temperaturas ambientes (RT) por lo que en nuestro caso es algo diferente a los estudios de bajas temperaturas, cuando se tiene este caso el proceso que provoca este mecanismo es el par donador aceptor (DAP), gracias al modelo propuesto por Matys [54] el cual consiste en considerar la interacción de coulomb entre el momento dipolar del DAP ionizado y el campo eléctrico de la región de agotamiento, su modelo da un acercamiento al mecanismo físico bajo estas condiciones, lo que nos lleva considerar este modelo y no otro, es que es totalmente compatible con las consideraciones hechas anteriormente en el análisis de la señal de fotoluminiscencia.

La posición del pico de luminiscencia, tanto en las dopadas como en las intrínsecas, está localizada en aproximadamente la misma energía, por lo que es de suponer que este está asociado a una presencia residual de Silicio en la cámara de crecimiento que se incorporan en los crecimientos intrínsecos.

V.4 ORIGEN DE LAS OSCILACIONES DEBAJO DEL GAP

Habiendo obtenido la respuesta óptica como función de las condiciones de crecimiento y del dopaje, atendemos una característica muy notoria de las mediciones de PR que se tienen para el caso del GaN, que es el hecho de que la señal de PR muestra oscilaciones por debajo del gap y que creemos es producto de la modulación del índice de refracción por medio del efecto lineal electro-óptico. Para ello exploremos lo que se tiene sobre oscilaciones en la señal de PR para regiones por debajo del bandgap óptico del material estudiado.

La señal de reflectancia nos provee información valiosa ya nos permite tener una explicación de las oscilaciones que tienen también las señales de PR, las oscilaciones en reflectancia nos sirvieron para estimar el grosor de las películas. En la señal de reflectancia se puede también ver una atenuación que es más notoria en las muestras dopadas, lo cual también se observa en las señales PR de esta serie de muestras.

Se tiene que la región por debajo del gap del GaN en el espectro de fotorreflectancia, se puede reproducir empleando la derivada de la señal de reflectancia, cuya amplitud se atenúa como función de la energía más la señal producto del band gap óptico. Así para reproducir las curvas experimentales se siguió el siguiente proceso: mediante el ajuste de Aspnes se ajusta la zona cercana al band gap, posteriormente sumaremos a esta señal una señal que es el producto de la derivada de la reflectancia multiplicada por una envolvente que nos reproduce el efecto de la atenuación en las oscilaciones. Así, la expresión para la señal medida de PR se puede expresar como:

$$\frac{\Delta R}{R} \cong \alpha \frac{d^3(E^2 \varepsilon_1(E, 0, \Gamma))}{dE^3} + f_R(E) \quad 5.1$$

donde la primera derivada de reflectancia es quien contempla las oscilaciones de nuestra señal, si hacemos este nuevo ajuste donde el termino $f_R(E)$ corresponde a la primera derivada modulada por una envolvente.

Lo que se tiene es que se propone tiene la siguiente forma funcional para la oscilación debajo del gap.

$$f(x) = G(x) \cdot \frac{dR}{dE}$$

$$f(x) = G(x) \cdot \frac{dR}{dE} \quad 5.2$$

donde $G(x)$ es nuestra función envolvente, estas funciones son muy utilizadas en el análisis de ondas en específico acústicas, estas funciones su cómo su nombre lo dice, es envolver la función afectando principalmente su amplitud y no cambiando su forma, la definición de una envolvente visto del punto de vista geométrico es el siguiente: una envolvente de una familia de curvas en el plano, es una curva que es tangente a cada miembro de la familia en algún punto, y estos puntos de tangencia juntos forman la envolvente completa. Clásicamente, un punto en la envolvente se puede considerar como la intersección de dos curvas "infinitesimalmente adyacentes", es decir, el límite de la intersección de dos curvas cuya separación tiende a cero. Esta idea se puede generalizar a una envolvente de superficies en el espacio, y así sucesivamente a dimensiones más altas [55]. Para nuestro caso es una curva suave que describe los extremos de nuestra señal oscilante para el ajuste de señal de fotorreflectancia. La envolvente generaliza el concepto de la amplitud constante en amplitud instantánea.

En las figuras siguientes mostramos las envolventes correspondientes a la muestra 359 y 465, para ejemplificar el hecho de lo que provoco el dopaje.

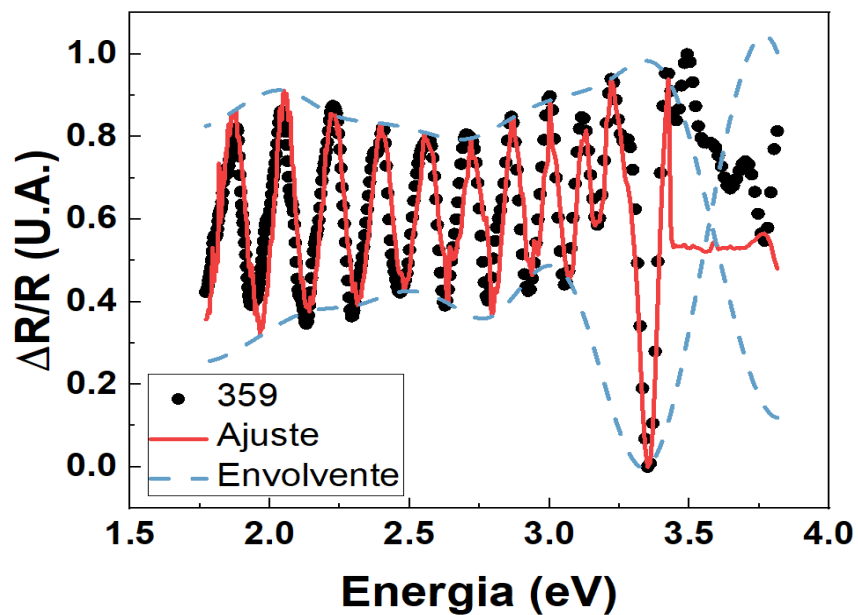


Figura V-55 Señal PR para la muestra 359, donde se observa la curva de la envolvente donde delimita el ajuste.

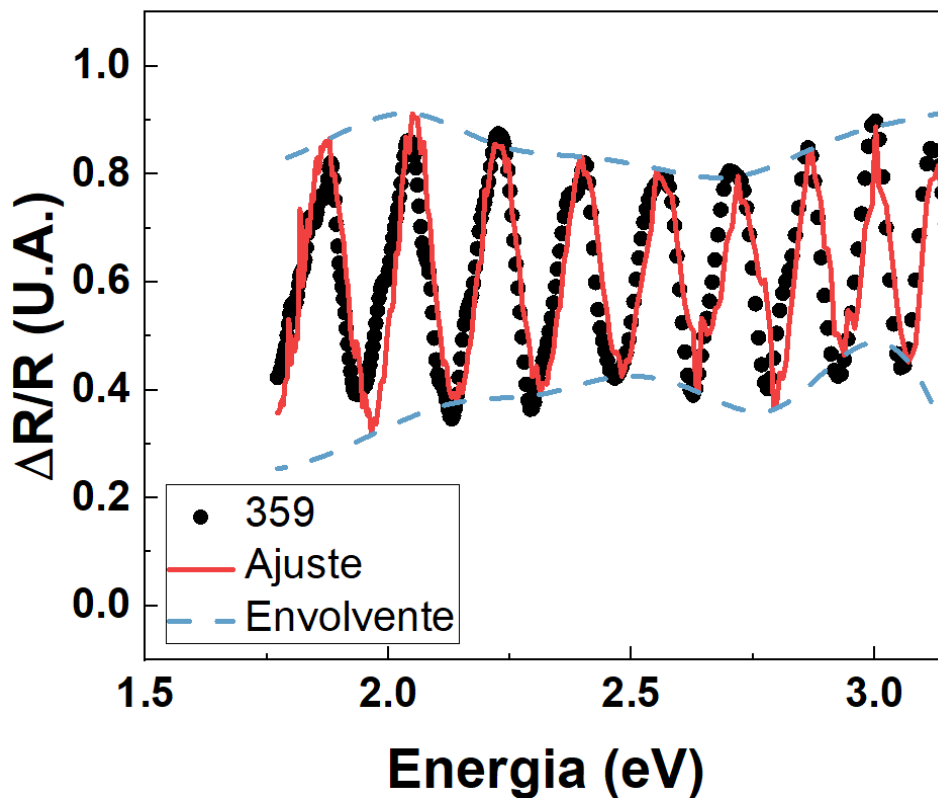


Figura V-56 Señal PR para la muestra 359, donde se observa la curva de la envolvente en la zona donde se encuentra únicamente la señal de las oscilaciones correspondiente a la señal de la primera derivada.

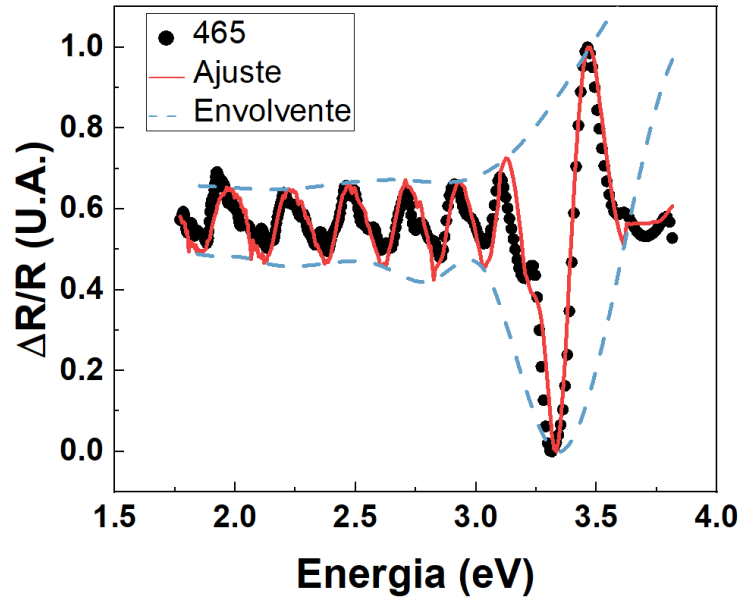


Figura V-57 Señal PR para la muestra 465, donde se observa la curva de la envolvente donde delimita el ajuste.

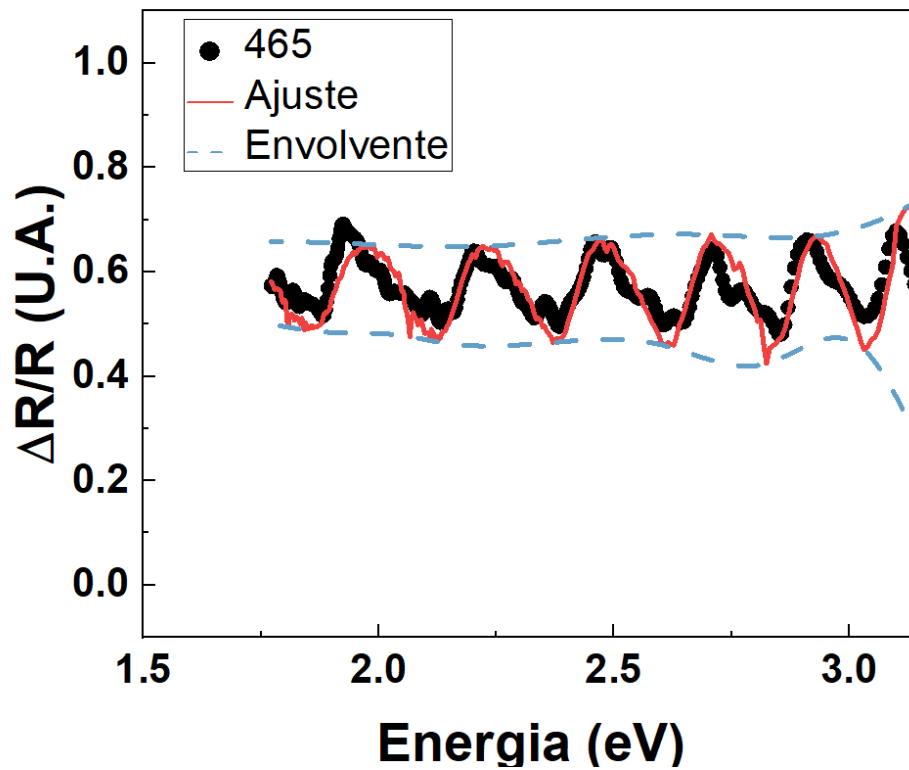


Figura V-58 Señal PR para la muestra 465, donde se observa la curva de la envolvente en la zona donde se encuentra únicamente la señal de las oscilaciones correspondiente a la señal de la primera derivada.

Este procedimiento se empleó para todas las muestras y explicaremos brevemente el proceso con la muestra 230. El ajuste de la línea de Aspnes ya lo mostramos anteriormente, ahora lo que nos interesa son las oscilaciones de la señal para esta muestra, véase la Figura V-59

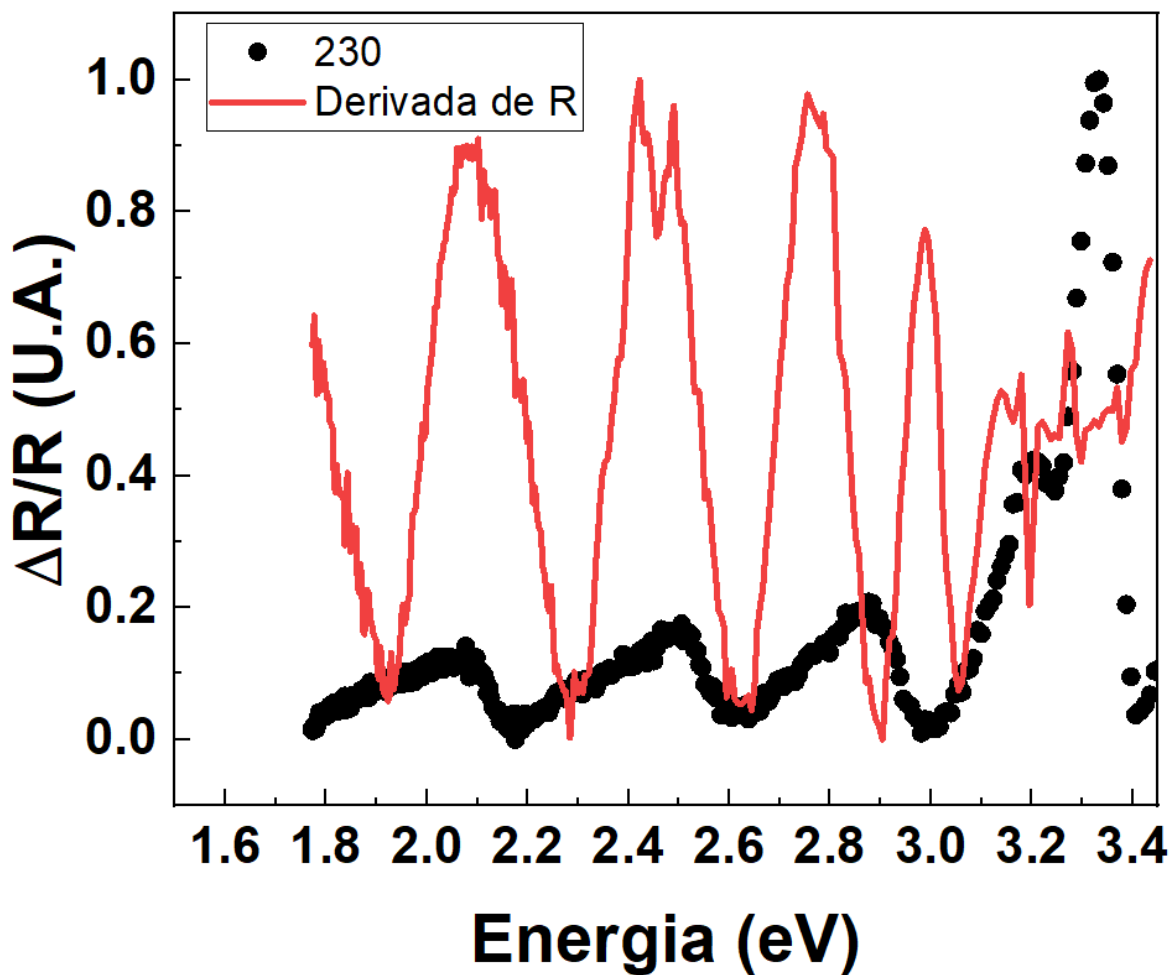


Figura V-59 comparación de la primera derivada de reflectancia a la señal PR en la muestra 230

entonces lo que hacemos es unir esta señal junto el ajuste de Aspnes que se mostró en la figura 5-13, ya con los factores obtenidos mediante un análisis de envolvente tenemos la Figura V-60, donde ya al hacer la suma de esta derivada más el ajuste de Aspnes obtenemos la Figura V-61.

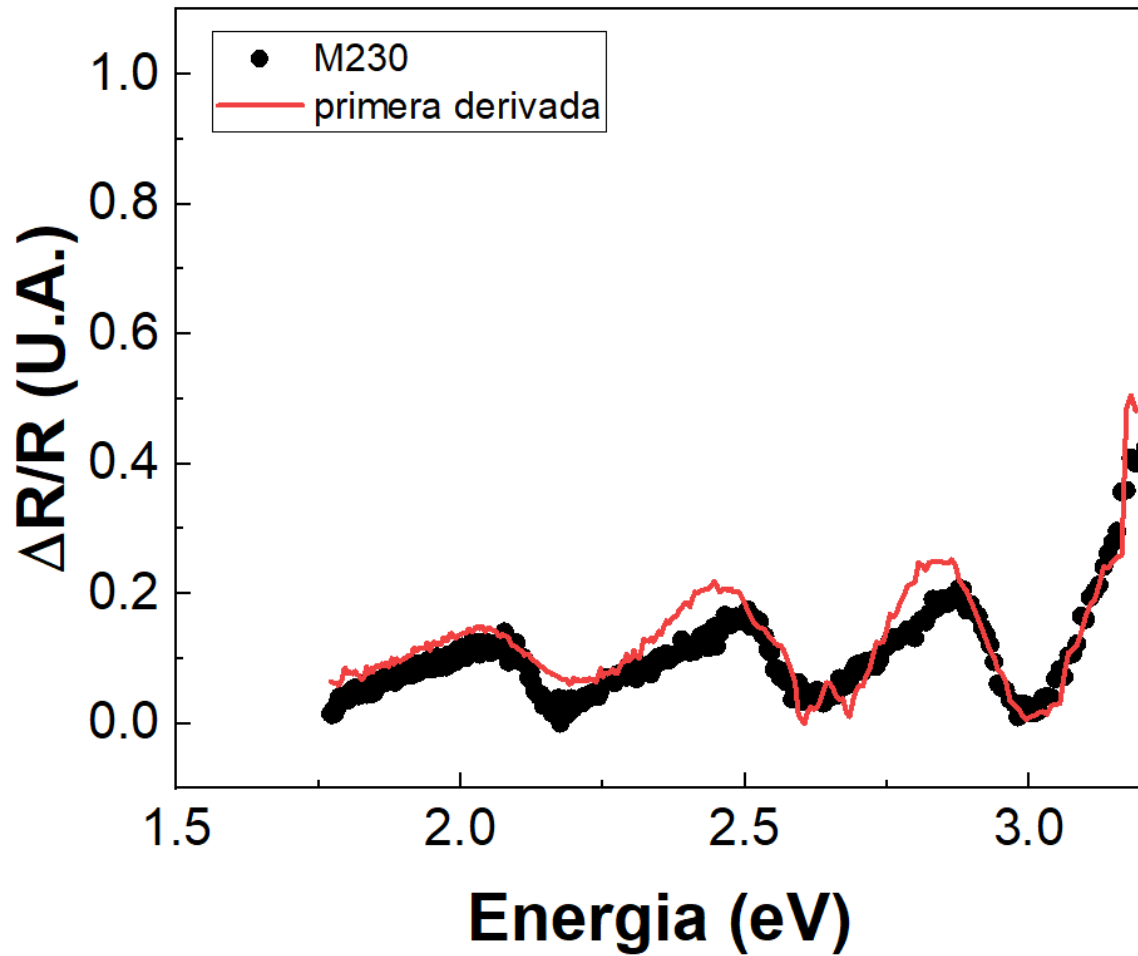


Figura V-60 Primera derivada con sus factores correspondientes a la atenuación de señal PR para la muestra 230.

Cómo podemos observar, obtenemos un ajuste muy bueno de la señal PR experimental, lo que quiere decir que bajo las condiciones en las que se tomaron la señal con este tipo de muestras, obtenemos oscilaciones que van como la primera derivada de la reflectancia, lo cual indica que esta señal tiene su origen en la interferencia, en la literatura se encuentra que la primera derivada de la reflectancia es también conocida como reflectancia difusa [56].

Este mismo procedimiento aplica al resto de las muestras, lo cual se reporta en las figuras Figura V-62 a la Figura V-67.

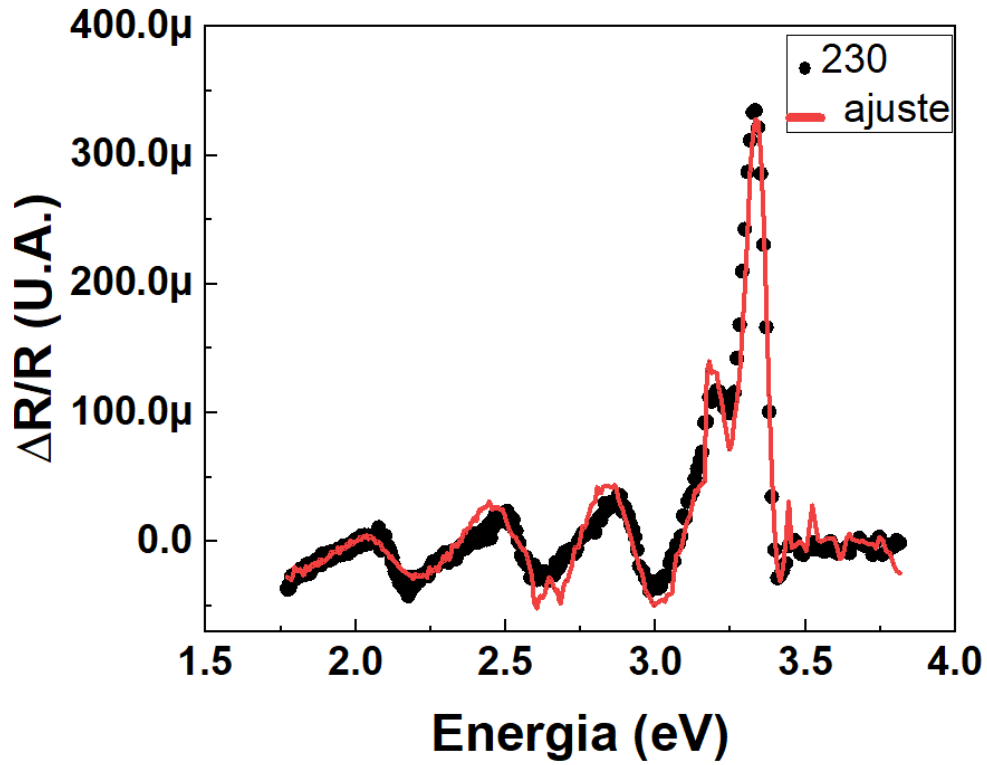


Figura V-61 Ajuste considerando la parte de la derivada de la reflectancia junto al de Aspnes para la muestra 230.

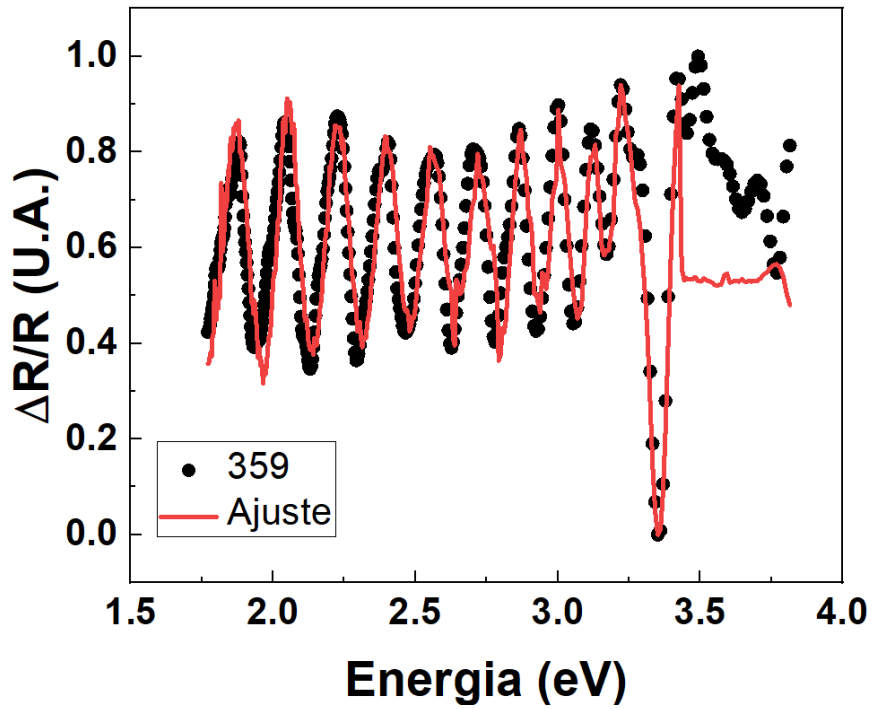


Figura V-62 Ajuste considerando la primera derivada de la curva de reflectancia junto al ajuste Aspnes para la muestra 359.

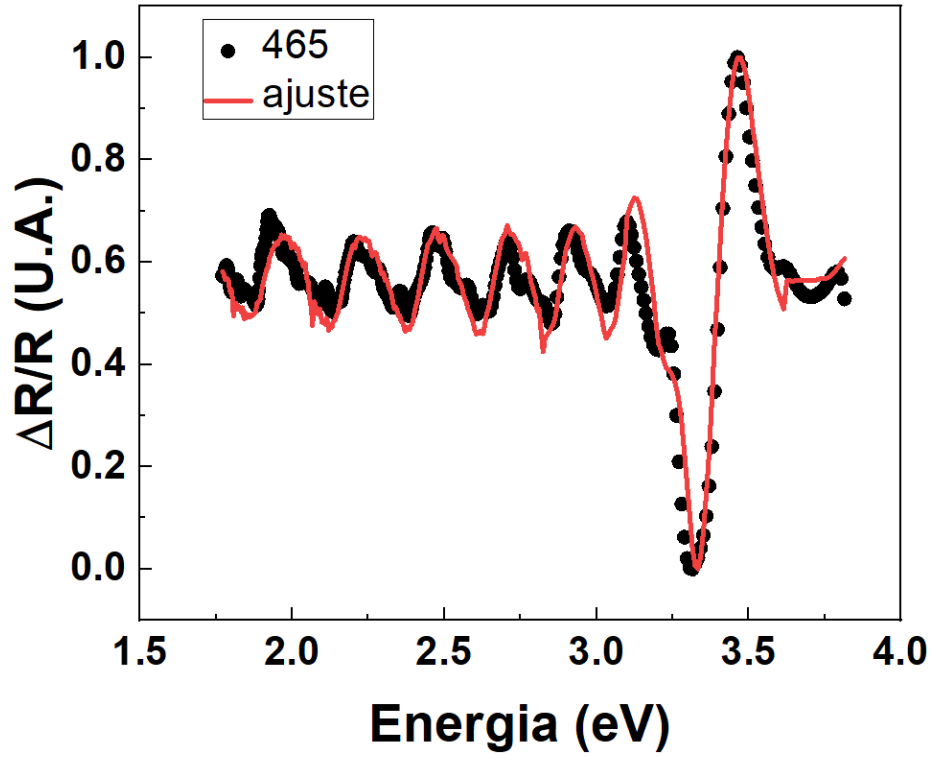


Figura V-63 Ajuste considerando la primera derivada de la curva de reflectancia junto al ajuste de Aspnes para la muestra 465.

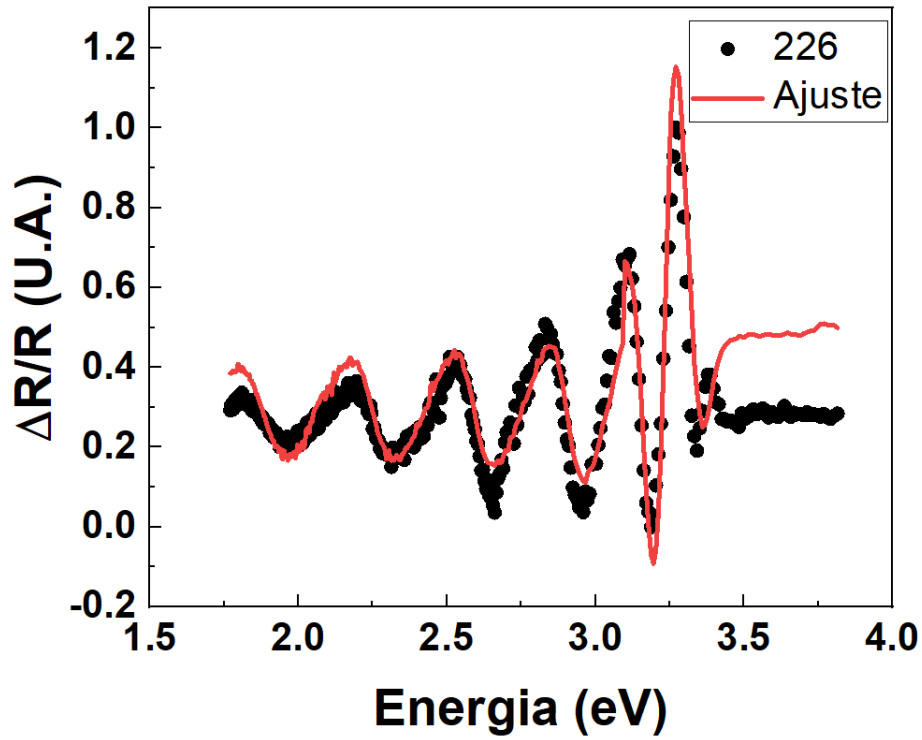


Figura V-64 Ajuste considerando la primera derivada de la curva de reflectancia junto al ajuste de Aspnes para la muestra 226.

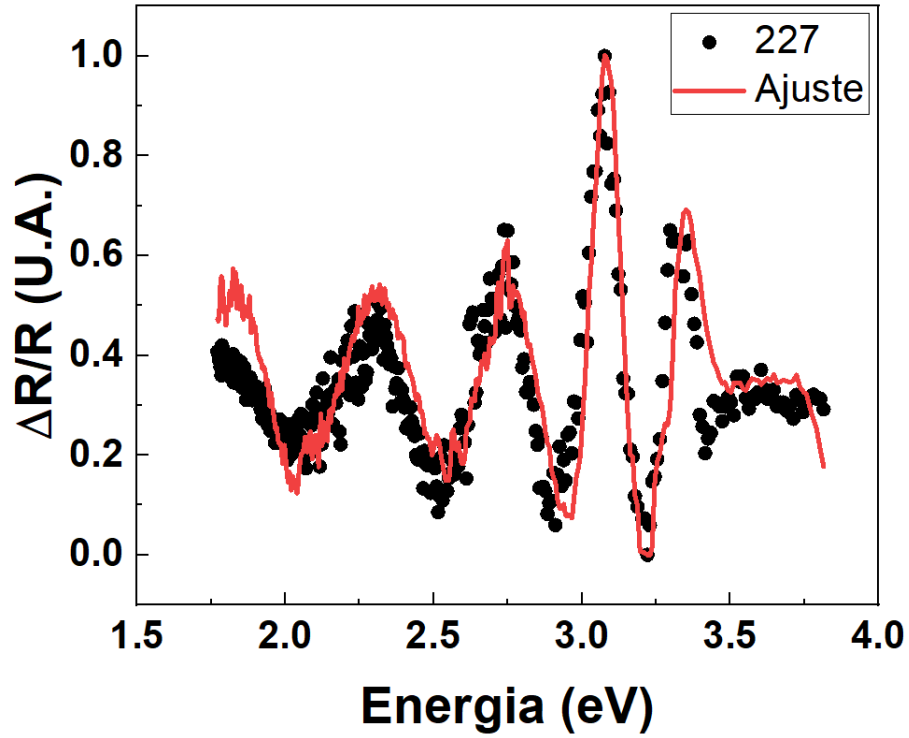


Figura V-65 Ajuste considerando la primera derivada de la curva de reflectancia junto al ajuste de Aspnes para la muestra 227.

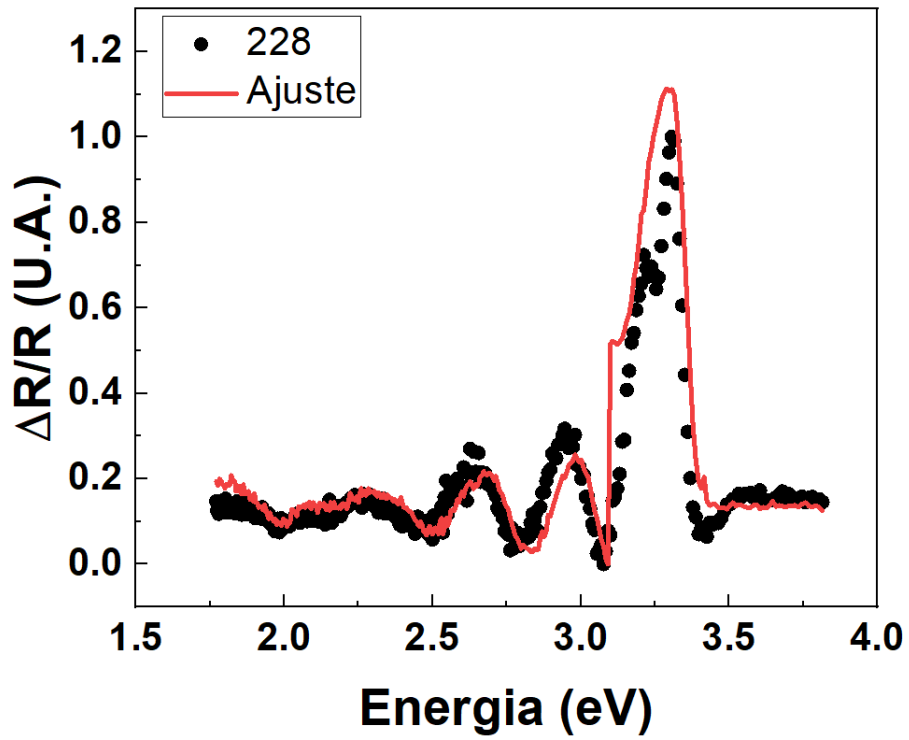


Figura V-66 Ajuste considerando la primera derivada de la curva de reflectancia junto al ajuste de Aspnes para la muestra 228

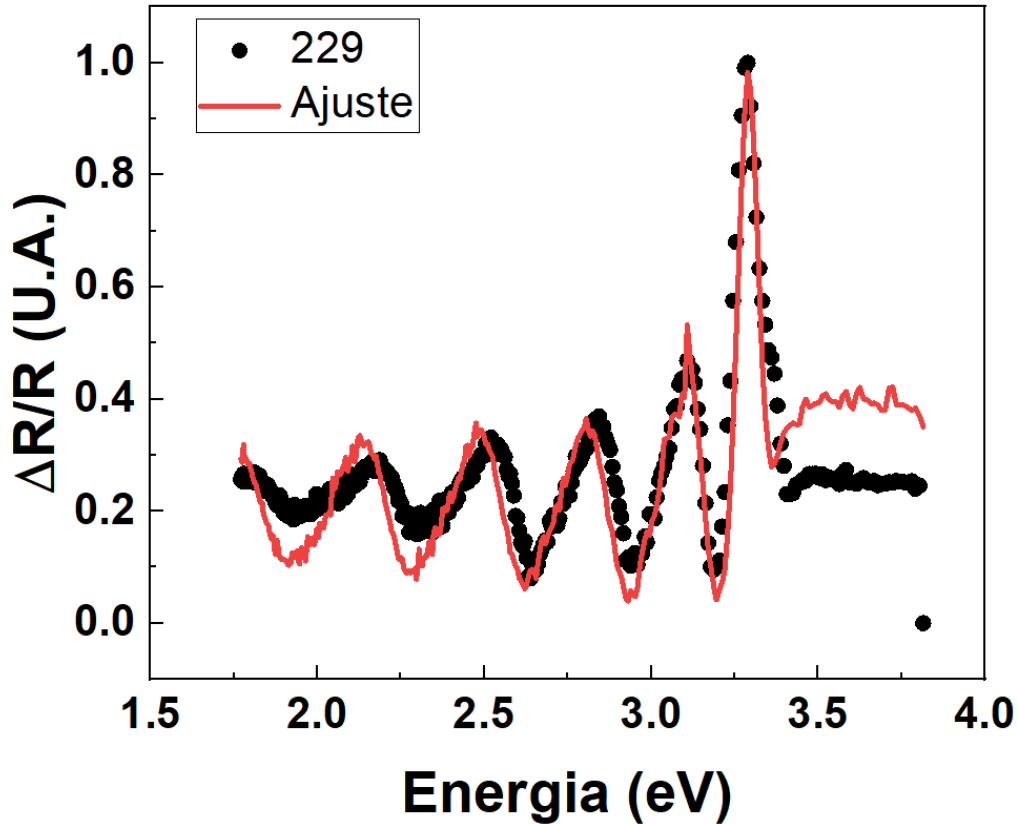


Figura V-67 Ajuste considerando la primera derivada de la curva de reflectancia junto al ajuste de Aspnes para la muestra 229.

Así, en todas las muestras se tiene que el espectro se puede ajustar empleando una línea de Aspnes para el gap del GaN y una primera derivada de la reflectancia modulada por una envolvente. Comúnmente se tiene varias hipótesis de que puede causar estas oscilaciones por debajo del gap. Lo que es claro es que estas oscilaciones son proporcionales a la primera derivada de la reflectancia.

Hay varios trabajos que se reportan sobre la presencia de oscilaciones por debajo del gap en la señal de fotorreflectancia, uno de los trabajos iniciales realizado por a Huang et al [57], reportó las oscilaciones en el espectro PR para GaAs, donde se propuso como principal causante de estas oscilaciones a la interferencia de dos haces de luz reflejados desde diferentes interfaces de la muestra. Mostraron que la interferencia distorsiona la forma de línea de los espectros PR asociados con pozos cuánticos y el borde de la banda de los semiconductores en bulto, especialmente en bajas energías. En este reporte también se dice que hay una ligera variación del índice de refracción que provoca este efecto. En general

cambios en el índice de refracción provocan cambios en la reflectancia. Hay un reporte de Lipsanen, Harri & Airaksinen [58] en el cual sospechaban que reportes anteriores como el citado anteriormente no ocurrían cuando el sustrato era semi-aislante, pero en sus resultados observaron que también sucedía en sustratos intrínsecos, lo que observaron fue que un cambio en la fase del lock-in podía atenuar un poco estas oscilaciones en su caso, además que la temperatura afectaba con un corrimiento en la señal y un efecto de iluminación de onda continua donde la modulación la provocaba electrones que pasaban de la superficie del material hacia la interfaz de este. Años posteriores se publicó otro reporte [59] donde sus sospechas eran efecto Franz-Keldysh y estados no confinados en pozos cuánticos, volviendo a lo mismo tienen efecto de interferencia en la señal PR, ellos analizaron CdTe en sustrato de silicio, donde observaron oscilaciones por debajo del band gap del material que era prácticamente independiente de la energía del fotón, las oscilaciones en el espectro de reflectancia en su caso la asociaron a interferencia óptica, donde la interfaces Aire/CdTe así como CdTe/Si provocaba tener dos haces de luz para energías bajas, dando como resultado las oscilaciones por debajo del band gap, debido a la independencia de la longitud de onda se concluye que no puede ser efecto Franz-Keldysh, de modificar la función dieléctrica en la superficie, ni tampoco por un cambio en la ocupación de estado de defectos en su banda ya que estos están muy próximo al borde de absorción del material, en el trabajo de Gosh et al concluyen que el responsable es una modulación del índice de refracción debido a el coeficiente termo-óptico. Mas recientemente se tiene un reporte de R. Kudrawiec et al [60] Donde se trató tanto PR como CER (Contactless electroreflectance) para GaAs, ellos llegaron al resultado que el origen de las oscilaciones es el cambio de índice de refracción generando portadores adicionales a los que proporcionaba el haz de modulación, en pocas palabras tenía pares electrón-hueco extras por lo que provocaban las oscilaciones, pero que solo pasa con PR por cómo es la técnica, todos estos trabajos nos permiten entender que es lo que pasa con estas oscilaciones, el efecto es de interferencia el cual puede ser muy complicado si la muestra tiene muchas capas con distintos índices de refracción, por lo tanto no es descabellado suponer que el fenómeno físico que principalmente provoca este tipo de interferencia, proviene de la interfaz GaN/AlN o bien AlN/Si, ya que para obtener señal PR tenemos que hacer un cambio en el índice de refracción en dos capas vecinas. Esto es posible si las dos capas tienen distintas concentraciones de portadores (que es lo que pasa comúnmente)

entonces el comportamiento de la oscilación tiene que ser proporcional a los portadores fotogenerados.

Las hipótesis que se examinaron en el presente estudio son las siguientes:

1. Modulación directa de la interfaz GaN/AlN/Si.
2. Cambio del índice de refracción por llenado de bandas de defectos en la interfaz lo que cambia la absorción y por lo tanto el índice de refracción (Relaciones de Kramers-Kronig).
3. Efecto termo-óptico (al absorber el haz de modulación el material eleva su temperatura provocando un cambio el índice de refracción y por lo tanto cambia la reflexión, se espera un aumento lineal de la amplitud de la oscilación.)
4. Portadores generados en la superficie que se mueven a la interfaz cambiando la densidad en la misma y por lo tanto la absorción y de ahí el índice de refracción
5. Efecto electro-óptico lineal, cambio del índice de refracción como consecuencia de campo eléctrico.

V.4.1 Modulación directa de la interfaz entre capas

Aquí se plantea ver si una modulación de las interfaces nos permite reproducir las oscilaciones que se presentan experimentalmente en PR. Que sea la modulación directa del sustrato en particular. Se realizaron más experimentos realizados con distintos laser de excitación para fotorreflectancia, esto porque nos es de interés encontrar el origen de dichas oscilaciones, en la Figura V-68 se muestra la señal de fotorreflectancia siendo modulada por 6 longitudes distintas, esta señal se compara directamente con la derivada de la reflectancia para ver a que longitud de onda la señal de modulación esta son presentes las oscilaciones.

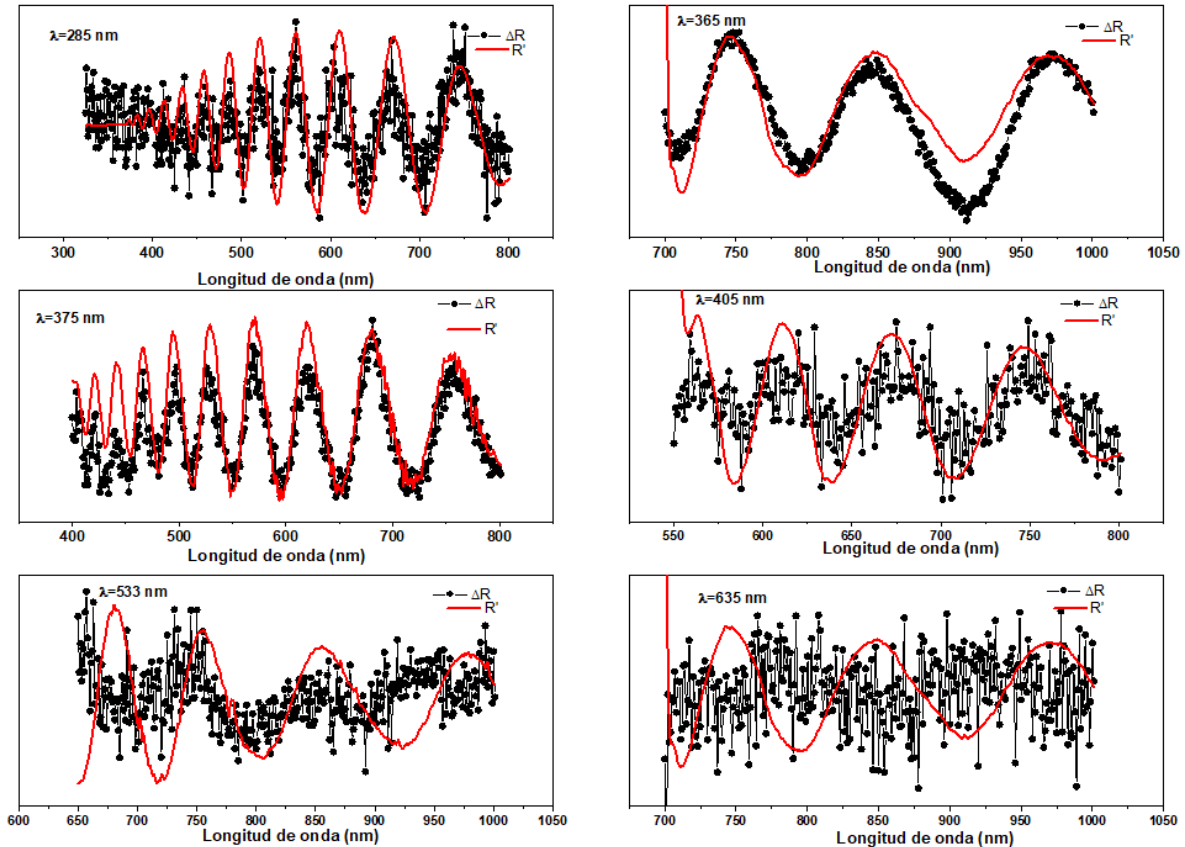


Figura V-68 Comparación de señales ΔR y la derivada de la reflectancia, donde podemos ver en que rango tenemos las oscilaciones para la muestra 359.

Como podemos ver las oscilaciones son comparables especialmente en el rango de 285 – 375 nm, este rango dado que a partir de 405 nm ya se pierde la señal, esto quiere decir que los láseres no son capaces de mostrar la señal de las oscilaciones, estos resultados son de suma importancia dado que demuestran que las oscilaciones son en el material y la interfaz GaN/AlN, no en la interfaz del AlN con el sustrato ya que las longitudes de onda mayores llegan hasta el sustrato pero los portadores de carga que se pueda genera en el sustrato no alcanzan a llegar a la interfaz GaN/AlN debido a la barrera de potencial que genera el AlN, por lo tanto, estas longitudes de onda larga no presentan esta interferencia, por lo que esta se debe solo cuando el GaN absorbe, este resultado nos acota aún más la región que origina de estas oscilaciones.

V.4.2 Llenado de defecto en la interfaz

Si bien este efecto está prácticamente descartado desde el principio ya que lo que hace es cambiar la absorción en lo que se denomina band-tail y por lo tanto el cambio es muy cercano al gap y no explicaría el hecho de que estas oscilaciones son prácticamente independientes de la longitud de onda decidimos llevarlo a cabo, la razón principal es para poder descartar que sea también el efecto termo-óptico ya que se espera que hay una dependencia de la frecuencia de la señal ya que en este efecto el cambio de la temperatura depende de la frecuencia de la modulación y su amplitud relativa con la señal del gap tiene que cambiar. así se examinó cambiar la frecuencia del obturador mecánico de esta manera modulamos más rápidamente las muestras tanto intrínsecas como dopadas, obtuvimos resultados interesantes como se observa en la Figura V-69 para la muestra intrínseca 359.

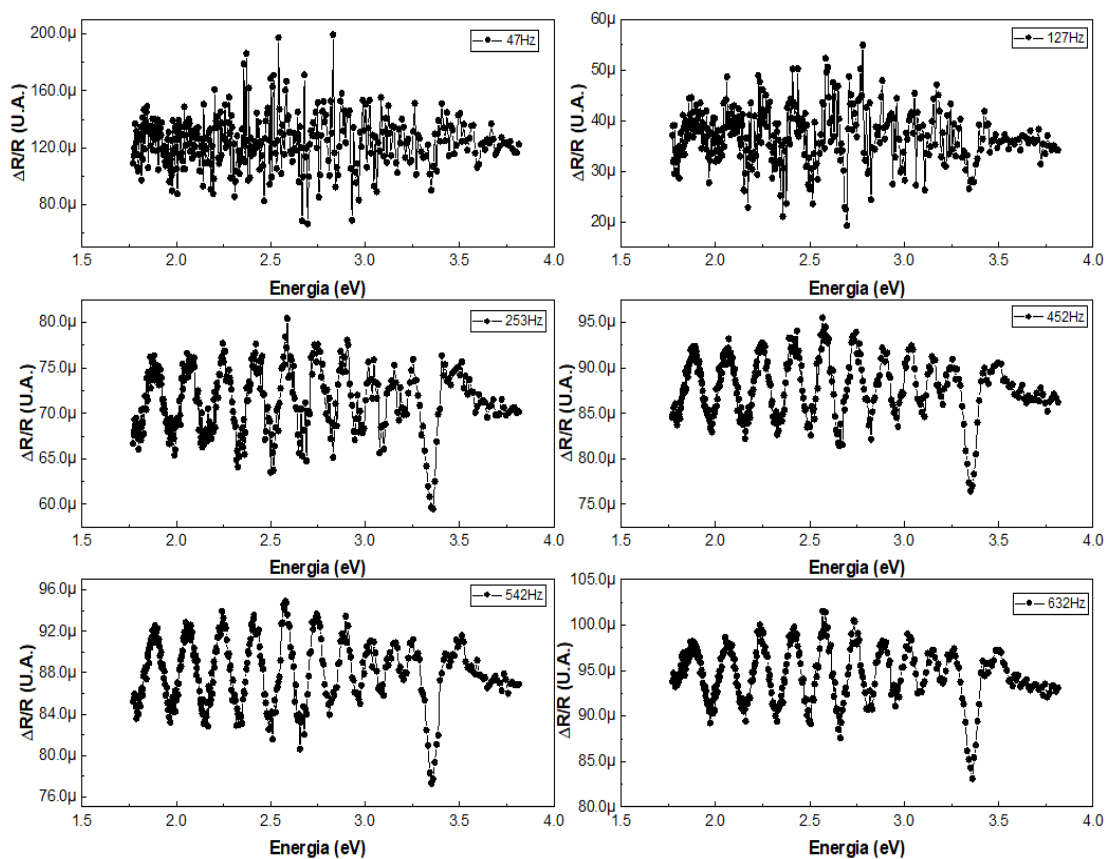


Figura V-69 Señal PR de la muestra 359 variando la frecuencia de modulación en la cual se observa que una mayor frecuencia describe mejor la señal cercana al band gap.

Notamos que el tamaño de las oscilaciones no disminuye con la frecuencia ni tampoco parece cambiar significativamente respecto a la señal del gap, razón por la cual al menos en esta muestra no parece ser un factor la frecuencia del chopper. Para la muestra 465 que es dopada también se hizo el mismo procedimiento como puede verse en la Figura V-70, donde al hacer el proceso de ir aumentando la frecuencia se podría decir que se limpió la señal, sin embargo, también podemos ver que hay un punto donde la calidad de la señal no cambia. Como se puede observar en la figura 5.70, tampoco se ve un cambio significativo en la oscilación respecto a la señal cercana al gap. Ni tampoco una disminución significativa. En el caso de la muestra sin dopar M359 se aumentó la frecuencia hasta 2kHz, pero no se encontró cambio significativo, por lo que podemos concluir de esta medición es que no se tiene una señal por causa del llenado de trampas y que al no haber un cambio en la amplitud relativa de las oscilaciones debajo del gap con la señal cercana al gap apuntan a

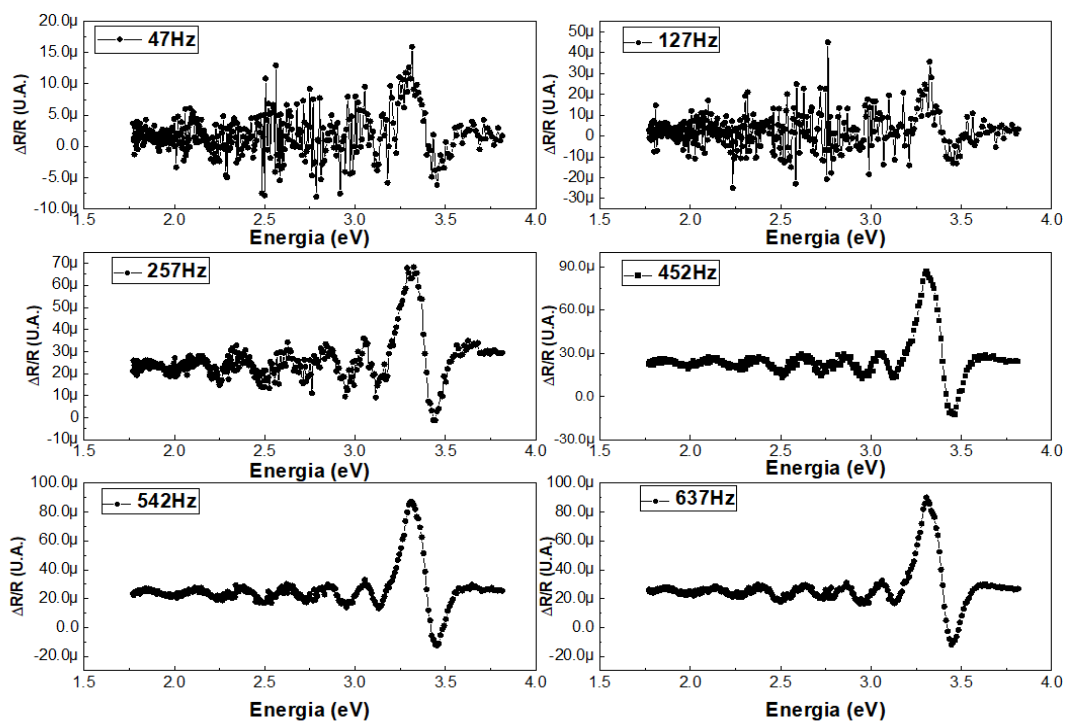


Figura V-70 Comparación de la señal PR de la muestra 465 variando las frecuencias de modulación

Que el efecto foto-térmico no es tan relevante, aunque la prueba más relevante de este efecto se tiene con el siguiente experimento que es cambiar la potencia de la modulación.

V.4.3 Efecto Termo-óptico

Ese efecto se consideró como un candidato para el origen de las oscilaciones, ya que para que se dé el proceso de interferencia se tiene que la manera más simple es que varíe el índice de refracción o bien la longitud o espesor de la capa transparente, tal como se reportó en un trabajo de grupo de investigación [61] el cambio esperado ante la modulación es pequeño comparado con el cambio de índice de refracción

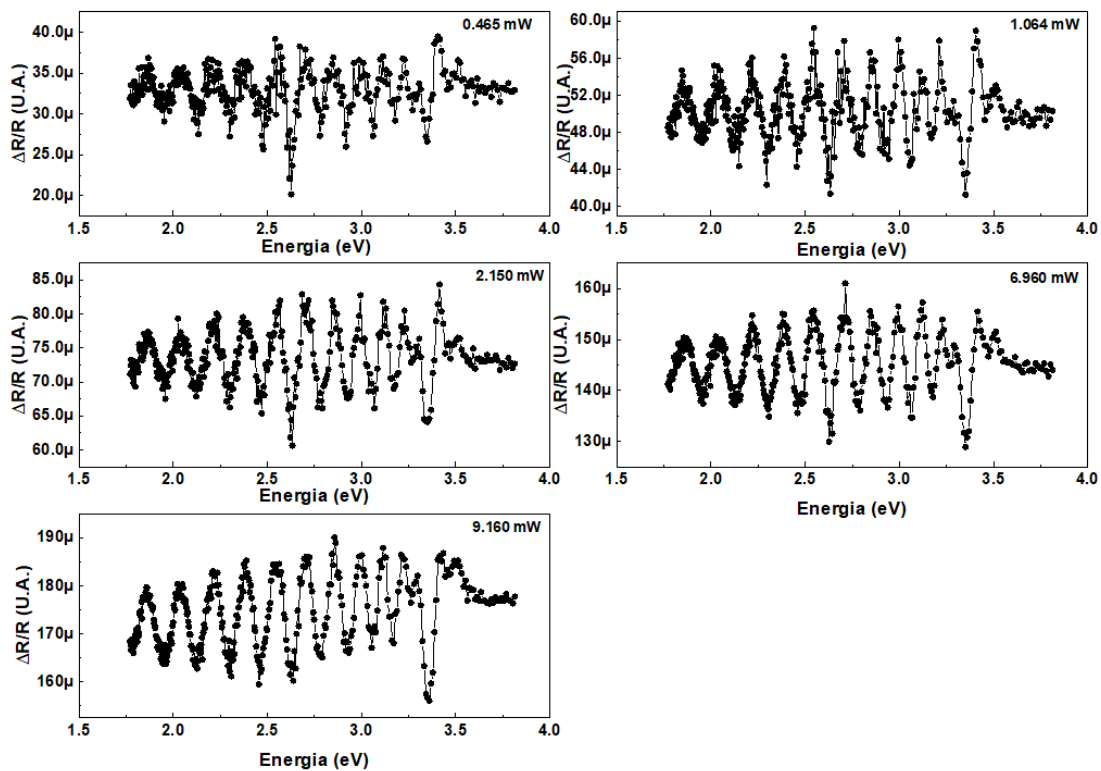


Figura V-71 Comparación de la señal PR de la muestra 359 variando la potencia de excitación donde no se observa un cambio en las oscilaciones.

Así en una primera propuesta el efecto termo-óptico es un candidato viable como el origen de estas oscilaciones. Sin embargo, para nuestro caso donde se tiene GaN en fase hexagonal

se tiene que la amplitud de la oscilación no varía de manera lineal con la potencia tal como sería el caso para este efecto. Esto se muestra en la Figura V-71. Se nota que la variación es aproximadamente la misma que la de la señal asociada al gap que como se sabe varia logarítmicamente con la potencia de la modulación. Las mediciones en Figura V-71 fue en una secuencia donde solo se aumentó la potencia, quedando los demás parámetros fijos, además de la variación de la amplitud del espectro lo único que cambio fue el offset de la señal de PR, que como ya se mencionó anteriormente se asocia a una señal de luminiscencia de la muestra. Así el hecho de que la amplitud no varíe linealmente con la potencia y el hecho que la razón de las amplitudes de las oscilaciones debajo del gap y la señal cercana al gap no cambie con la frecuencia, nos lleva a descartar al efecto termo-óptico como la principal contribución a las oscilaciones que se presentan en la señal de PR en muestras de GaN hexagonal sobre AlN/Si.

V.4.4 Modulación del índice de refracción por migración de portadores a la interfaz del GaN

Esta hipótesis es de entrada poco probable ya que como se menciona no explica anteriormente el hecho de que para longitudes de onda lejanas al gap se tenga todavía una modulación del índice de refracción. En este mecanismo se tiene la hipótesis de que la señal son portadores fotogenerados que se mueven hacia las interfases. Así se planea el siguiente experimento que consiste en modificar el potencial superficial al hacer incidir una iluminación contante de manera que cambiando la intensidad se cambia el potencial superficial sin modular. Esta hipótesis se pone a prueba en Figura V-72, este es un experimento que consistía en tener 3 fuentes de iluminación las dos correspondientes para la fotorreflectancia y un señal DC extra cuya función era intentar cambiar el potencial superficial de manera que esto hiciera más difícil que los portadores generados escapen hasta la región de la interfaz GaN/AlN, esto haría que las oscilaciones disminuyeran al aumentar la intensidad DC , para esto se empleó una longitud de 365 nm .

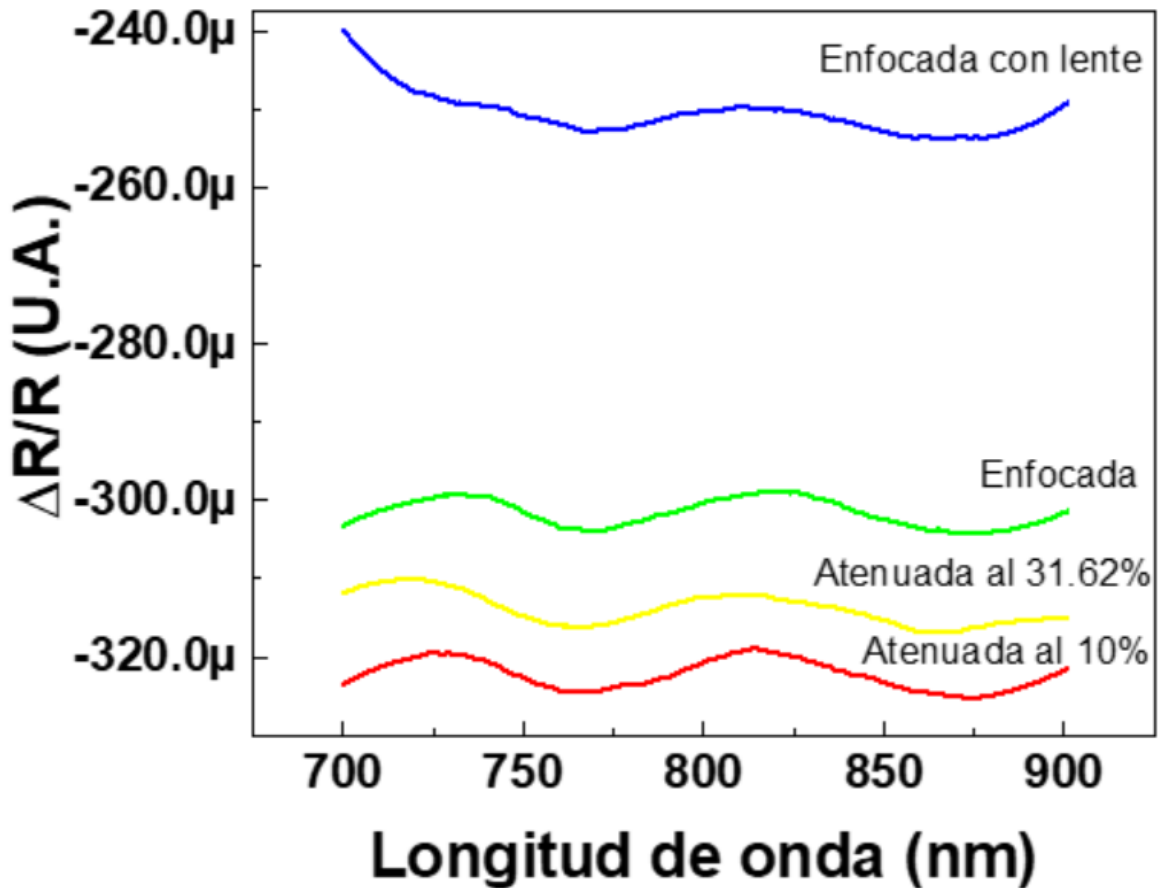


Figura V-72 Comparación de cómo la potencia afecta la potencia a las oscilaciones en la muestra 359.

Como podemos ver la señal solo cambia el offset, la oscilación no parece cambiar su forma con la iluminación constante DC; es decir, no cambia cuando se modifica el potencial superficial de la misma, tal como se aprecia en la región de 700 – 780 nm, esta región se empleó para intentar minimizar la señal offset que es producto de la señal PL de la muestra y que puede hacer que sea más complicada medir la señal de PR, lo importante aquí es que la oscilaciones son prácticamente de igual amplitud lo que indica que el desplazamiento de portadores fotogenerados no es la causa principal de estas oscilaciones

V.4.5 Efecto electro-óptico lineal

Se tiene que el efecto electro-óptico lineal es el cambio del índice de refracción como consecuencia de la aplicación de un campo de eléctrico. Para el caso del GaN en fase hexagonal se tiene que es no centro-simétrica, por lo que se espera que tanto el efecto lineal

(Efecto Pockel) como el electro-óptico cuadrático (Efecto Kerr) esté presente, para el caso de la fase cubica del GaN, el tener un punto de inversión se tiene que el efecto dominante es el cuadrático.

De nuestros espectros se tiene que las oscilaciones por debajo del gap las asociamos con un cambio en el índice de refracción que produce un cambio en la reflectancia cuando el haz de modulación incide sobre la muestra.

Se puede pensar que, en las muestras sin dopar, el campo eléctrico depende de las cargas que se pueden acumular en la superficie debido a los defectos superficiales y la interfaz con el AlN. El haz de modulación empleado en el experimento, que es de 285 nm, tiene una longitud de penetración de aproximadamente 50 nm, por lo que es muy superficial a la muestra. En esa región genera un electrón y un hueco. El GaN crecido de manera no intencional tiende a ser de tipo n. Por lo que en la superficie se localizan una región de agotamiento en donde los portadores minoritarios serían los huecos, estos se desplazan a la superficie en donde neutralizan los defectos que acumular carga negativa lo que disminuye el potencial superficial. Así en las muestras intrínsecas tenemos que el campo eléctrico cambia al cambiar el nivel de ocupación de los defectos en la superficie, esto finalmente produce un campo eléctrico que es uniforme dentro del material intrínseco. Esto explica por qué se tiene en las muestras intrínsecas una señal que es proporcional a la derivada de la curva de reflectancia, ya que podemos expresar la reflectancia en término del índice de refracción del GaN como:

$$R(\lambda, n_{\text{GaN}}, \dots) \quad 5.3$$

de este modo tenemos que un cambio en la reflectancia al cambiar el índice de refracción esta dado por:

$$\Delta R = \frac{\partial R}{\partial n_{\text{GaN}}} \Delta n \quad 5.4$$

en adelante solo consideraremos el índice de refracción del GaN. Por otro lado, se encuentra la derivada numérica de la reflectancia:

$$\Delta R' = \frac{\partial R}{\partial \lambda} \Delta \lambda \quad 5.5$$

así nosotros en general podemos decir que el índice de refracción del GaN depende tanto del campo eléctrico (F) como de la longitud de onda así tenemos que

$$\Delta n = \frac{\partial n}{\partial F} \Delta F + \frac{\partial n}{\partial \lambda} \Delta \lambda \quad 5.6$$

en nuestro experimento, al modular la excitación solo cambiamos el campo eléctrico por lo que tenemos que en nuestro experimento:

$$\Delta n = \frac{\partial n}{\partial F} \Delta F \quad 5.7$$

aquí empleamos la relación que se da entre el coeficiente electro-óptico lineal y el índice de refracción el cual está dada por [62]:

$$n = \frac{n_0}{(1 + n_0^2 r_{13} F)^{1/2}} \quad 5.8$$

aquí r_{13} es el coeficiente electro-óptico lineal. Así el cambio de la reflectancia experimental esta dado por:

$$\Delta R = \frac{\partial R}{\partial n} \left[-\frac{1}{2} r_{13} n^3 \right] \Delta F \quad 5.9$$

por otro lado, se tiene que la derivada numérica se puede expresar como

$$\Delta R' = \frac{\partial R}{\partial \lambda} \Delta \lambda = \frac{\partial R}{\partial n} \frac{\partial n}{\partial \lambda} \Delta \lambda = \frac{\partial R}{\partial n} \left(\frac{-2B}{\lambda^3} \right) \Delta \lambda \quad 5.10$$

aquí se emplea la relación de Cauchy que es expresar el índice de refracción en términos de los inversos de la longitud de onda, aquí el modelo es:

$$n = A + \frac{B}{\lambda^2} \quad 5.11$$

este modelo se puede obtener del ajuste de los datos, para el caso del GaN se toman los valores reportados por [63], el ajuste de estos datos se muestra en la Figura V-73.

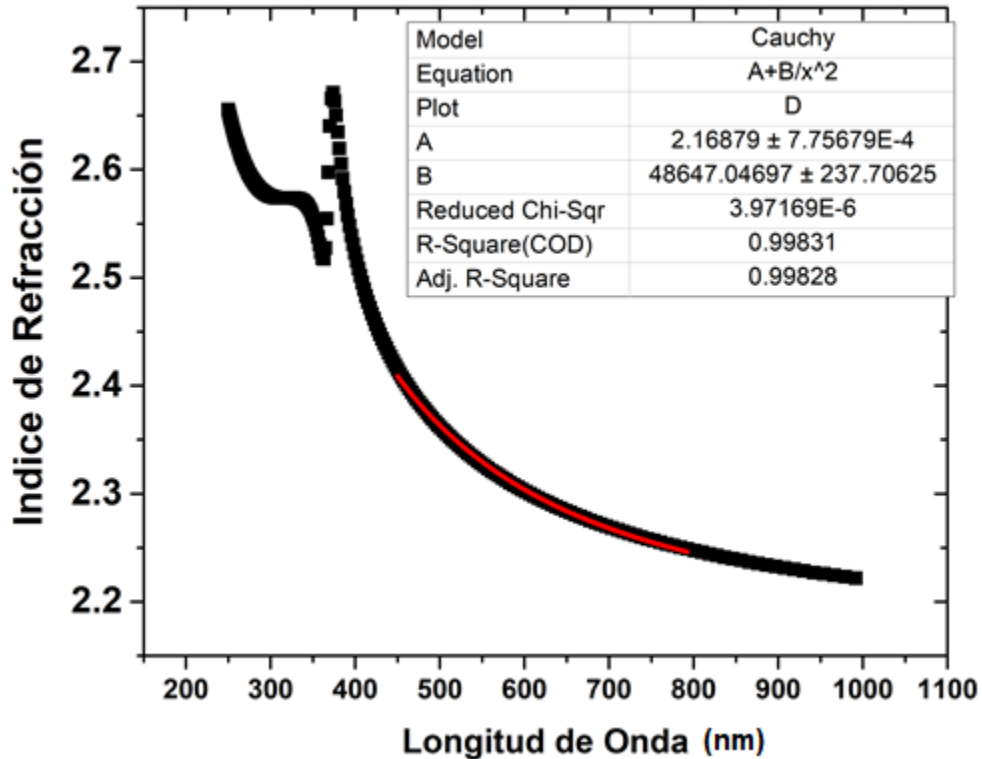


Figura V-73 Ajuste de la expresión de Cauchy empleando los datos reportados en la literatura [63]

De esta manera se quiere relacionar la derivada experimental con la calculada numéricamente de la curva de reflectancia, ya que se tiene que ambas son proporcionales, es decir:

$$\Delta R \propto \Delta R_{exp} \quad 5.12$$

así en principio se puede estimar la variación del campo eléctrico en la región intrínseca si se conoce el coeficiente electro-óptico.

Lo relevante es que la señal experimental que se espera con el efecto electro-óptico lineal sea proporcional a la derivada numérica del espectro de reflectancia.

Ahora bien, en el caso de las muestras dopadas, tenemos que la carga libre que generan los donores apantalla el campo eléctrico que se produce desde la superficie, por lo que el campo eléctrico disminuye rápidamente dentro de la capa que es dopada, razón por la cual no se obtiene la modulación de la reflectancia que produce las oscilaciones debajo de bandgap óptico. Otro proceso que creemos pueda estar pasando en el caso de muestras con dopaje, es el hecho de que el dopaje afecta la tensión que se tiene en la capa de GaN haciendo que se tengan más defectos en la interfaz, estos defectos atrapan carga que hace que la señal que se refleja en ese punto sea atenuada más intensamente, lo que también contribuye a una disminución de la interferencia, tanto en la reflexión como en la de fotorreflectancia.

V.5 LUMINISCENCIA AMARILLA, OSCILACIONES DEBAJO DEL GAP Y DOPAJE

Se tiene que el fenómeno de luminiscencia amarilla está presente en los dos conjuntos de muestras y son las que dominan en el caso de las muestras intrínsecas. Si bien se tiene que el haz de modulación penetra alrededor de 50 nm en el GaN, aún así es capaz de cambiar el potencial en la superficie y por lo tanto el campo eléctrico, que en el caso de las muestras intrínsecas es uniforme dentro de estas. El cambio del potencial da origen a un cambio en el campo eléctrico y que por medio del efecto electro-óptico lineal cambia el índice de reflexión, produciendo una derivada de la reflectancia que se manifiesta como una oscilación por debajo del gap en el espectro de PR, aunque no es el único mecanismo que puede producir esto en el conjunto de muestras que se tiene, es el candidato más sólido.

Al dopar las muestras se espera que este apantalle el campo eléctrico dentro de la capa del GaN lo que da como resultado una menor variación del índice de refracción del GaN produciendo una atenuación en las oscilaciones debajo del gap. A su vez el dopaje hace que se incremente la transición Dh o bien un DAP que son los que dominan la recombinación a temperatura ambiente en el GAN, la mayor cercanía de los niveles del donador a la banda de conducción hace que sea más fácil capturar los electrones que se producen por la absorción del haz UV y de ahí se recombinen a un aceptor superficial residual presente en el GaN (DAP) o bien la banda de valencia (Dh). De acuerdo con Reshchikov [53] que da evidencia que es

el C_N (Un átomo de carbono en el lugar de un nitrógeno) el responsable de la luminiscencia amarilla, se propone un mecanismo de 3 estados en el diagrama de configuración de coordenadas, en donde un punto vital es la captura por parte del defecto del hueco generado por la excitación, que después se recombina. Este proceso es típicamente es un proceso rápido del orden de $10E-10s$, con un dopaje alto tipo n podría esperarse que este tiempo sea más mayor lo que permitiría una recombinación con el donador. La segunda opción es que simplemente el dopaje de Silicio haga más difícil la formación de la sustitución C_N por competencia ya que se reporta que para GaN tipo n o sin dopar la energía que es muy alta para tipo p, disminuyen sensiblemente y se espera una formación eficiente de este tipo de defectos [64].

Así se tiene que ambos fenómenos están relacionados la luminiscencia amarilla y las oscilaciones debajo del bandgap, disminuyen con el dopaje de Silicio.

VI CONCLUSIONES

Se obtuvieron las transiciones ópticas de películas de GaN hexagonal-estable sin dopaje y con dopaje intencional de Si, crecidas sobre sustratos de silicio (111). Se consiguió observar el efecto del dopaje en las muestras de GaN dopadas con Si, mediante las técnicas de PL, PR y reflectancia. Además de la disminución de las señales intrínsecas que mostraron las muestras sin dopaje intencional, permitieron ver como ciertos parámetros de crecimiento favorecen de manera muy visible la luminiscencia cercana al band gap del material.

El estudio de las propiedades ópticas de las muestras sin dopar y dopadas intencionalmente es de gran interés, ya que para cada tipo de muestras obtuvimos tanto la relación de las transiciones ópticas entre cada una de las señales con el dopaje tanto de los parámetros de crecimiento como la temperatura del sustrato, la temperatura de Ga, por lo que podemos diseñar un proceso de síntesis que promueva tanto la luminiscencia cerca al band gap o en caso de que se quiera podemos promover la señal amarilla, todo en cuestión de lo que se esté buscando. Además, que la forma en que observamos como afecto a la señal de PL, es muy similar a como se observa como GaN sobre zafiro. Cabe aclarar que nuestros espectros fueron medidos a temperatura ambiente, lo que evidencia de la buena calidad de estas muestras. Por PR nos arrojó una señal que asociamos al gap del GaN, además de oscilaciones por debajo del gap que son proporcionales a la primera derivada de los datos experimentales.

Se examinaron distintos procesos que pueden producir las oscilaciones quedando como principal causa el efecto electro-óptico lineal que está presente en el GaN hexagonal. Respecto a las muestras, se espera realizar estudios más detallados de difracción de rayos x, el cual nos expondrá cuales son los porcentajes de dopaje de las muestras y así compararlos con las condiciones de crecimientos de estos que ayudaran a reportar estos resultados en un trabajo de investigación.

VII APÉNDICES

VII.1 AJUSTE DE LÍNEA DE ASPNES UTILIZANDO MATLAB

Para los ajustes de utilizó la siguiente ecuación:

$$f(x) = Level + Real\left(\frac{C \cdot e^{i\theta}}{(x - E_g + i\Gamma)^n}\right)$$

Donde se utilizó $n = 2.5$ para materiales en bulto que en nuestro caso.

Se mostrará el procedimiento que se utilizó para conseguir el ajuste de la muestra 226, para las demás muestras fue de manera similar siguiendo exactamente el mismo procedimiento, sin embargo, algunas muestras mostraron más oscilaciones por lo que puede llevar más pasos el ajuste de estas para obtener un ajuste aceptable comparada a la obtenida experimentalmente.

Se toman los datos obtenidos de manera experimental y se busca hacer el primer ajuste mediante la función de MATLAB *Curve Fitting* esta función nos permite ajustar a una curva personalizada la cual es la anteriormente mencionada, la interfaz gráfica se ve la de la siguiente manera

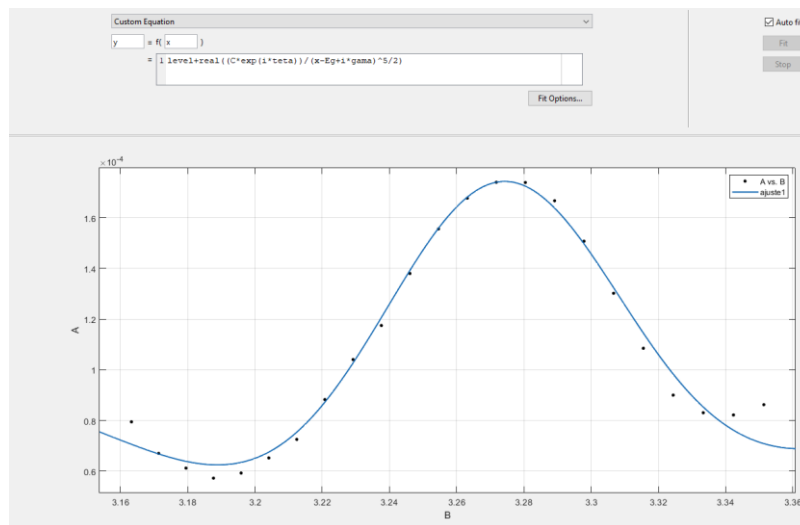


Figura VII-1 Interfaz gráfica de la función ajuste de MATLAB.

Posteriormente en la interfaz gráfica se varían los datos de la función que hemos colocado hasta obtener un ajuste aceptable en la región de interés, la forma en que se varían es la siguiente.

General model:
 $f(x) = \text{level} + \text{real}((C * \exp(i * \text{teta})) / (x - \text{Eg} + i * \text{gama})^5 / 2)$
 Coefficients (with 95% confidence bounds):
 C = 1.175e-08 (7.675e-10, 2.273e-08)
 Eg = 3.27 (3.247, 3.293)
 gama = 0.1503 (0.123, 0.1776)
 level = 9.799e-05 (8.71e-05, 0.0001089)
 teta = 1.401 (0.6757, 2.126)

Goodness of fit:
 SSE: 4.372e-09
 R-square: 0.8803
 Adjusted R-square: 0.8537
 RMSE: 1.559e-05

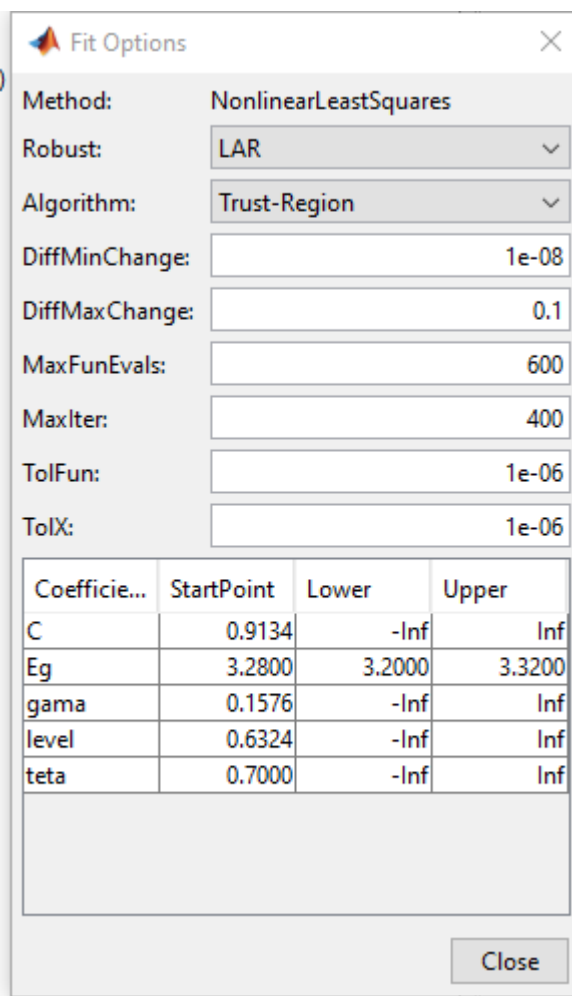


Figura VII-2 Interfaz para la variación de los parámetros de ajuste de la función.

Al tener un ajuste aceptable con dicha función, lo que vamos a hacer es utilizar la función *tdshape2d*, esta función arrojará los datos para poder comparar el pico ajustado obtenido en esta función de Matlab para usarse en Origin LAB.

```

tdshape2d.m
1 function [PR]=tdshape2d(Eg,C,teta,gama,level,xdata,ydata)
2     n=length(xdata);
3     PR=zeros(n,3);
4     for k=1:n
5         PR(k,1)=xdata(k);
6         PR(k,2)=ydata(k);
7         PR(k,3)=level+real((C*exp(i*teta))/(xdata(k)-Eg+i*gama)^5/2);
8         fprintf('en el paso %d el valor la energia es %f del ajuste es %f \n',k,xdata(k), PR(k,3));
9     end
10 end
11
  
```

Figura VII-3 Programa para comparar los datos de ajuste con resultados experimentales.

Luego restando los valores obtenidos en el primer ajuste a los valores experimentales, obtenemos una nueva curva para ajustar, la cual nos permitirá ajustar el siguiente pico de la señal obteniendo el segundo ajuste. Y hacemos esto sucesivamente hasta ajustar todos los picos que sospechamos que es señal PR, al terminar estos ajustes los graficamos en Origin LAB, esto se tendrá que sumar cada pico en la señal obteniendo una gráfica como la siguiente figura.

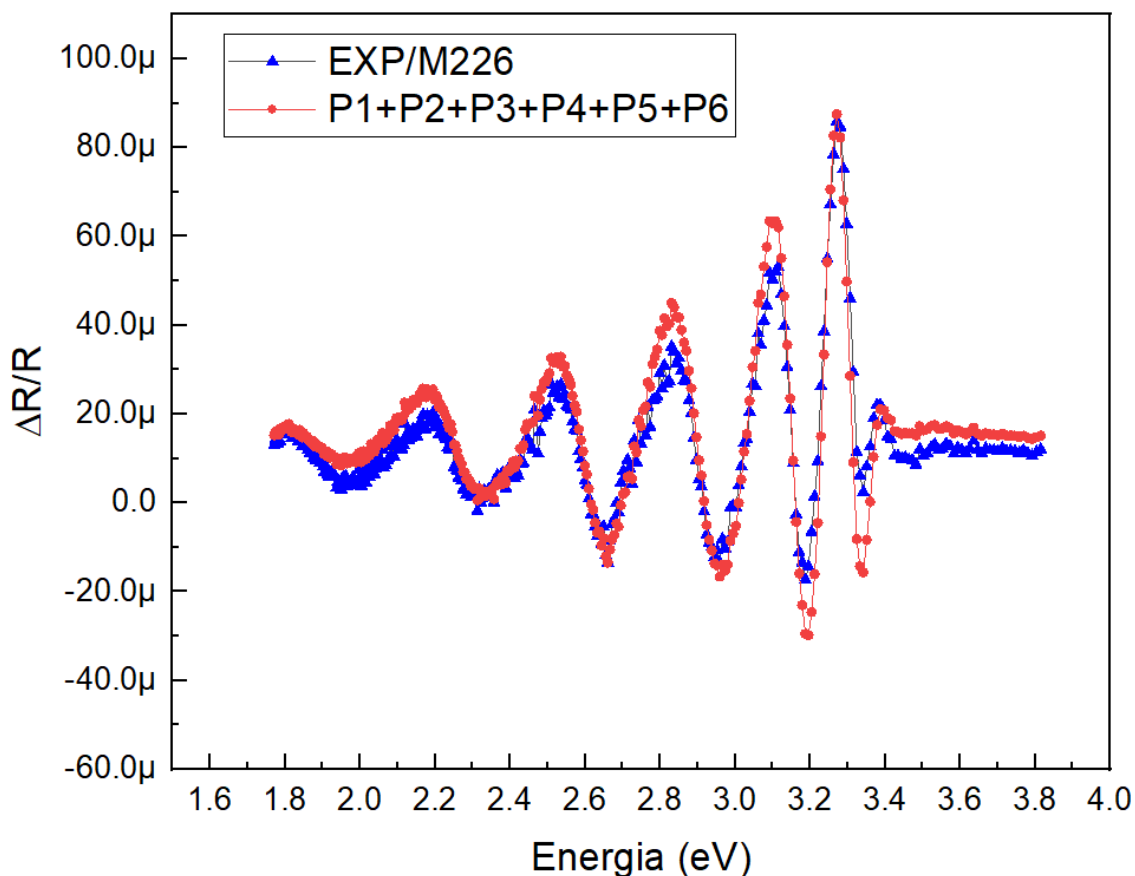


Figura VII-4 Gráfica de los ajustes obtenidos mediante Matlab comparados a los valores experimentales.

Pero esto no es una gráfica presentable en el sentido que para presentar este tipo de resultados es más elegante y agradable, normalizar la señal de 0 a 1, usando unidades arbitrarias para normalizar estos valores existen muchas formas, la que se uso fue mediante un programa sencillísimo de Matlab como se muestra enseguida.

```

1  function[Normie]=Normie(ydata)
2  Min_v=min(ydata); %valor minimo de la entrada
3
4  Pos_v= ydata-Min_v; %Restadmos el valor minimo de la entrada
5
6  Max_v= max(Pos_v);
7
8  Norm_v= Pos_v/Max_v; %normalizacion
9
10 subplot (1,2,1)
11 plot(ydata)
12 title('Original')
13
14 subplot (1,2,2)
15 plot(Norm_v)
16 title('normalizada')
17 Normie=Norm_v;
18 end

```

Figura VII-5 Programa para normalizar datos en Matlab.

al normalizar cada uno de estos datos obtenemos la siguiente gráfica.

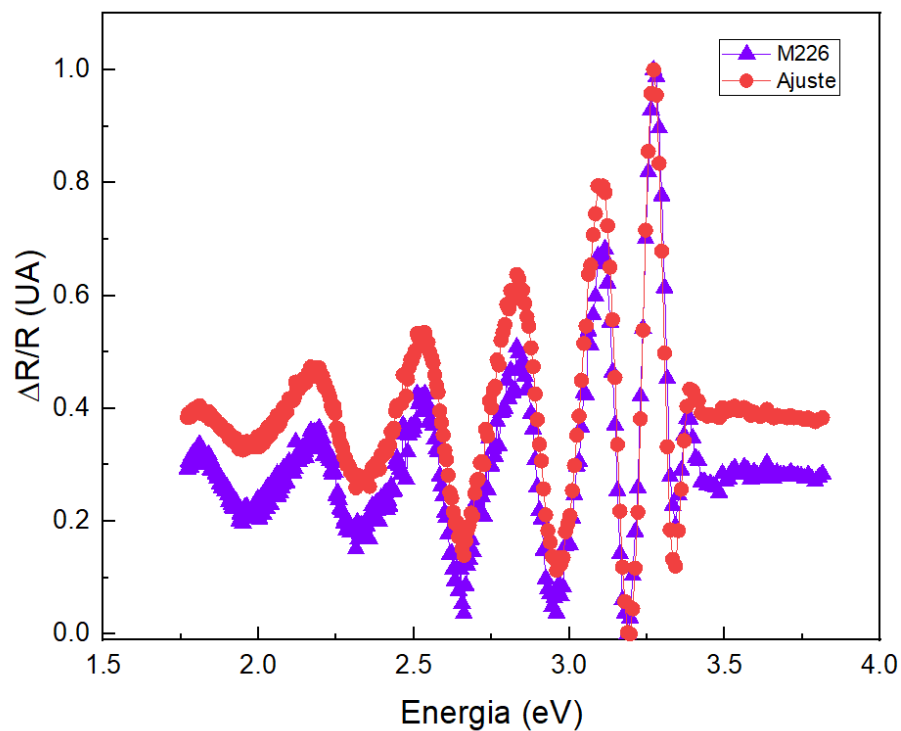


Figura VII-6 Resultados del proceso de ajuste de línea de Aspnes para la muestra 226.

VII.2 OSCILACIONES POR DEBAJO DEL BAND GAP

VII.2.1 Problema de doble interfaz solucionado mediante los coeficientes de Fresnel

Considera una losa de material siendo aplastada entre dos materiales como se ve en la figura 7.7

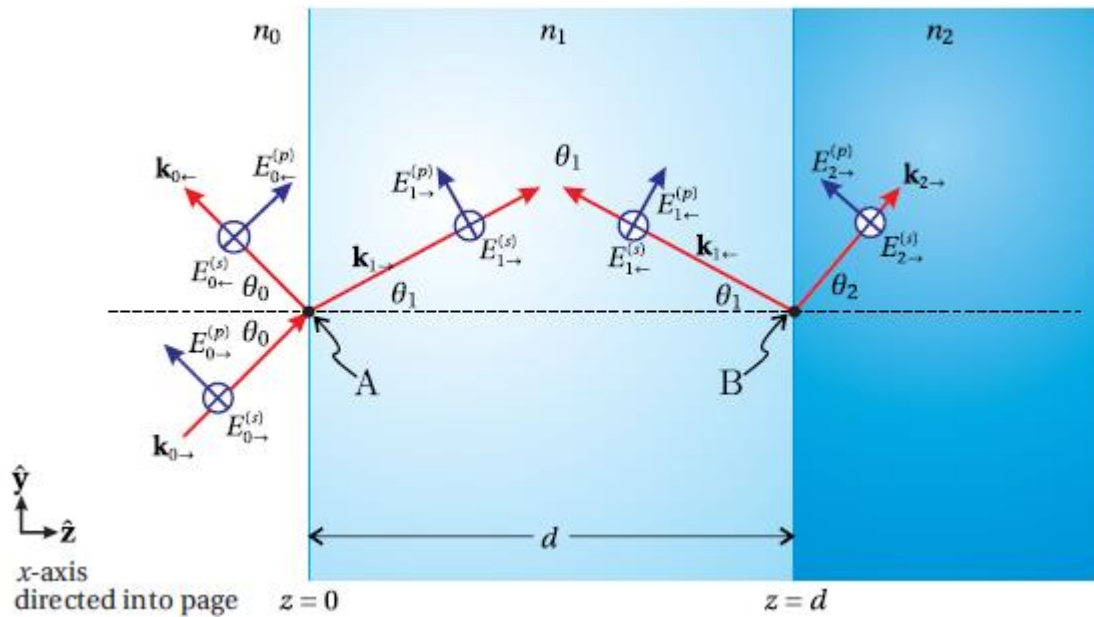


Figura VII-7 Ondas propagadas a través de la interfaz del semiconductor del problema.

debido a que hay múltiples reflexiones dentro de la capa del medio del sándwich de material, usaremos las flechas para indicar la dirección de estas ondas, sea n_1 el índice de refracción del material del medio, por lo tanto, el primer material será n_0 y el segundo n_2 . Por simplicidad se tomará que estos índices de refracción son reales, nos interesa encontrar la transmisión general de los campos $E_{2\rightarrow}^{(p)}$ y $E_{2\rightarrow}^{(s)}$ y reflectancia de $E_{0\leftarrow}^{(p)}$ y $E_{0\leftarrow}^{(s)}$ en términos del campo incidentes $E_{0\rightarrow}^{(p)}$ y $E_{0\rightarrow}^{(s)}$.

En la región media existen ondas planas que viajan hacia adelante y hacia atrás. Nuestra intuición nos dice con razón que en esta región hay muchos reflejos, rebotando tanto hacia adelante como hacia atrás entre las dos superficies. Por lo tanto, podría parecer que

necesitamos realizar un seguimiento de un número infinito de ondas planas, cada una de las cuales corresponde a un número diferente de rebotes. Afortunadamente, las muchas componentes que viajan hacia adelante las ondas planas viajan todas en la misma dirección.

De manera similar, las ondas planas que viajan hacia atrás son todas paralelas. Estos campos de ondas planas luego se unen nítidamente en una sola onda plana neta que se mueve hacia adelante y una sola onda plana que se mueve hacia atrás dentro de la región del medio.

Hasta el momento, no conocemos las amplitudes y fases de las ondas planas netas que viajan hacia adelante y hacia atrás en la capa del medio. Vamos a denotar al campo eléctrico de la manera que se observa en la figura 7.7, como es la costumbre.

Hacemos uso de los coeficientes de Fresnel para una capa ya que estos nos serán útiles para conectar este problema de multi capas:

$$r_s^{0 \rightarrow 1} \equiv \frac{\text{sen}\theta_1 \cos \theta_0 - \text{sen}\theta_0 \cos \theta_1}{\text{sen}\theta_1 \cos \theta_0 + \text{sen}\theta_0 \cos \theta_1}$$

$$r_p^{0 \rightarrow 1} \equiv \frac{\text{sen}\theta_1 \cos \theta_1 - \text{sen}\theta_0 \cos \theta_0}{\text{sen}\theta_1 \cos \theta_1 + \text{sen}\theta_0 \cos \theta_0}$$

$$t_s^{0 \rightarrow 1} \equiv \frac{2 \text{sen}\theta_1 \cos \theta_0}{\text{sen}\theta_1 \cos \theta_0 + \text{sen}\theta_0 \cos \theta_1}$$

$$t_p^{0 \rightarrow 1} \equiv \frac{2 \text{sen}\theta_1 \cos \theta_0}{\text{sen}\theta_1 \cos \theta_1 + \text{sen}\theta_0 \cos \theta_0}$$

la notación $0 \rightarrow 1$ nos referimos de hacia dónde se dirige ahora los coeficientes de Fresnel para la onda de luz que regresa son:

$$r_s^{0 \rightarrow 1} = -r_s^{0 \leftarrow 1}$$

$$r_p^{0 \leftarrow 1} = -r_p^{0 \rightarrow 1}$$

$$t_s^{0 \leftarrow 1} \equiv \frac{2 \text{sen}\theta_0 \cos \theta_1}{\text{sen}\theta_0 \cos \theta_1 + \text{sen}\theta_1 \cos \theta_0}$$

$$t_p^{0 \leftarrow 1} \equiv \frac{2 \text{sen}\theta_0 \cos \theta_1}{\text{sen}\theta_0 \cos \theta_0 + \text{sen}\theta_1 \cos \theta_1}$$

Ahora necesitamos los coeficientes de Fresnel en la capa del medio, serían de la siguiente forma:

$$r_s^{1 \rightarrow 2} \equiv \frac{\text{sen}\theta_2 \cos\theta_1 - \text{sen}\theta_1 \cos\theta_2}{\text{sen}\theta_2 \cos\theta_1 + \text{sen}\theta_1 \cos\theta_2}$$

$$r_p^{1 \rightarrow 2} \equiv \frac{\text{sen}\theta_2 \cos\theta_2 - \text{sen}\theta_1 \cos\theta_1}{\text{sen}\theta_2 \cos\theta_2 + \text{sen}\theta_1 \cos\theta_1}$$

$$t_s^{1 \rightarrow 2} \equiv \frac{2\text{sen}\theta_2 \cos\theta_1}{\text{sen}\theta_2 \cos\theta_1 + \text{sen}\theta_1 \cos\theta_2}$$

$$t_p^{1 \rightarrow 2} \equiv \frac{2\text{sen}\theta_2 \cos\theta_1}{\text{sen}\theta_2 \cos\theta_2 + \text{sen}\theta_1 \cos\theta_1}$$

Para resolver este sistema de ecuaciones necesitamos 4 ecuaciones para cada tipo de polarización de la luz, para simplificar las cosas solo tomaremos la polarización tipo s , para hacer el análisis para la polarización tipo p es un proceso análogo.

La onda que viaja hacia adelante en la región media surge tanto de una transmisión de la onda incidente como de un reflejo de la onda que viaja hacia atrás en la región media en la primera interfaz. Usando los coeficientes de Fresnel, podemos escribir $E_{1 \rightarrow}^s$ como la suma de los campos que surgen de $E_{0 \rightarrow}^s$ y $E_{1 \leftarrow}^s$ de la siguiente manera:

$$E_{1 \rightarrow}^s = t_s^{0 \rightarrow 1} E_{0 \rightarrow}^s + r_s^{0 \leftarrow 1} E_{1 \leftarrow}^s - (\mathbb{Q})$$

Los factores $t_s^{0 \rightarrow 1}$ y $r_s^{0 \leftarrow 1}$ son los coeficientes de Fresnel cuando solo hay una capa. Del mismo modo, el campo reflejado $E_{0 \leftarrow}^s$, viene dado por la reflexión del campo incidente y la transmisión del campo que viaja hacia atrás de la región del medio:

$$E_{0 \leftarrow}^s = r_s^{0 \rightarrow 1} E_{0 \rightarrow}^s + t_s^{0 \leftarrow 1} E_{1 \leftarrow}^s - \mathbb{C}$$

Ahora necesitamos dos conexiones más para poder resolver el problema.

Antes de continuar, necesitamos especificar un origen para poder calcular los cambios de fase asociados con la propagación en la región media. La propagación no fue un problema en el problema sencillo y es bastante estudiando en cursos de óptica básicos. Sin embargo, en el problema de límite doble, el grosor de la región media dicta variaciones de fase que

influyen fuertemente en el resultado. Tomamos el origen para ubicarlo en la primera interfaz, como se muestra en la figura 7.7, con las ecuaciones \mathbb{C} y \mathbb{Q} son evaluadas en el origen del sistema $(y, z) = (0, 0)$, donde los factores de la fase no son necesarios.

Conectaremos los campos de ondas planas a través de la segunda interfaz en el punto

$\mathbf{r} = \hat{\mathbf{z}}d$. Entonces hay que ajustar la fase en el punto $(y, z) = (0, d)$ es $E_{1 \rightarrow}^s e^{ik_1 \cdot \mathbf{r}} = E_{1 \rightarrow}^s e^{ik_1 d \cos \theta_1}$, como $E_{1 \rightarrow}^s$ es el campo en el origen.

El campo transmitido en la región del medio final surge solo del campo que viaja hacia adelante en la región del medio, y en nuestro punto seleccionado es

$$E_{2 \rightarrow}^s = t_s^{1 \rightarrow 2} E_{1 \rightarrow}^s e^{ik_1 d \cos \theta_1}$$

Nota para el campo $E_{2 \rightarrow}^s$, se mantiene que el campo transmitido está en el mundo $(y, z) = (0, d)$, su fase local puede incorporarse a su definición, por lo que no es necesario escribir una fase explícita.

La onda plana que viaja hacia atrás en la región del medio surge del reflejo de la onda plana que hacía adelante en dicha región

$$E_{1 \leftarrow}^s = E_{1 \rightarrow}^s r_s^{1 \rightarrow 2} e^{ik_1 d \cos \theta_1} e^{ik_1 d \cos \theta_1}$$

Se puso la fase en la derecha de esta ecuación para enfatizar que esta describe la transmisión a través de la región del medio, seguida por una reflexión de parte de la segunda interfaz, y otra transmisión a través de la primera interfaz.

A partir de estas relaciones podemos obtener la transmisión y reflexión total para la luz polarizada tipo s. El camino es bastante ingenuo de obtener aun así lo haremos para nuestro problema:

$$t_s^{tot} \equiv \frac{E_{2 \rightarrow}^s}{E_{0 \rightarrow}^s}$$

Ahora veamos que de acuerdo con esta relación podemos obtener el campo de la región del medio

$$E_{1\rightarrow}^s = \frac{E_{2\rightarrow}^s}{t_s^{1\rightarrow 2}} e^{-ik_1 d \cos \theta_1}$$

$$E_{1\leftarrow}^s = E_{2\rightarrow}^s \frac{r_s^{1\rightarrow 2}}{t_s^{1\rightarrow 2}} e^{ik_1 d \cos \theta_1}$$

Entonces tenemos que

$$\frac{E_{2\rightarrow}^s}{t_s^{1\rightarrow 2}} e^{-ik_1 d \cos \theta_1} = t_s^{0\rightarrow 1} E_{0\rightarrow}^s + r_s^{0\leftarrow 1} E_{2\rightarrow}^s \frac{r_s^{1\rightarrow 2}}{t_s^{1\rightarrow 2}} e^{ik_1 d \cos \theta_1}$$

$$t_s^{tot} \equiv \frac{E_{2\rightarrow}^s}{E_{0\rightarrow}^s} = \frac{t_s^{0\rightarrow 1} e^{ik_1 d \cos \theta_1} t_s^{1\rightarrow 2}}{1 - r_s^{0\leftarrow 1} r_s^{1\rightarrow 2} e^{2ik_1 d \cos \theta_1}}$$

Análogamente para la reflexión tenemos lo siguiente

$$r_s^{tot} \equiv \frac{E_{0\leftarrow}^s}{E_{0\rightarrow}^s} = r_s^{0\rightarrow 1} + \frac{t_s^{0\rightarrow 1} e^{ik_1 d \cos \theta_1} r_s^{1\rightarrow 2} e^{2ik_1 d \cos \theta_1} t_s^{0\leftarrow 1}}{1 - r_s^{0\leftarrow 1} r_s^{1\rightarrow 2} e^{2ik_1 d \cos \theta_1}}$$

Estos dos resultados se puede cambiar la polarización sin problemas.

Pero hay un resultado importante que se puede obtener de estos dos anteriores

$$T_s^{tot} + R_s^{tot} = 1$$

Cuando el ángulo θ_2 es real (es decir que θ_1 no es más grande que el ángulo crítico) podemos escribir la siguiente relación para la transmisión total.

$$T_s^{tot} = \frac{n_2 \cos(\theta_2)}{n_0 \cos(\theta_0)} |t_s^{tot}|^2 = \frac{n_2 \cos(\theta_2)}{n_0 \cos(\theta_0)} \frac{|t_s^{0\rightarrow 1}|^2 e^{ik_1 d \cos \theta_1} |t_s^{1\rightarrow 2}|^2}{|1 - r_s^{0\leftarrow 1} r_s^{1\rightarrow 2} e^{2ik_1 d \cos \theta_1}|^2}$$

Multiplicamos y dividimos por $e^{-ik_1 d \cos \theta_1}$

$$T_s^{tot} = \frac{n_2 \cos(\theta_2)}{n_0 \cos(\theta_0)} \frac{|t_s^{0\rightarrow 1}|^2 |t_s^{1\rightarrow 2}|^2}{|e^{-ik_1 d \cos \theta_1} - r_s^{0\leftarrow 1} r_s^{1\rightarrow 2} e^{ik_1 d \cos \theta_1}|^2}$$

Esto para ponerlo de una forma muy conveniente y de manera bastante explícita para nuestras intenciones. Pero cuando el ángulo θ_1 es real (es decir que θ_0 no excede el ángulo crítico) tenemos una forma curiosa para la transmisión total [65].

$$T_s^{tot} = \frac{T_s^{max}}{1 + F_s \text{sen}\left(\frac{\Phi_s}{2}\right)}$$

Donde:

$$\Phi_s = 2k_1 d \cos(\theta_1) + \phi_{r_s^{0 \leftarrow 1}} + \phi_{r_s^{1 \rightarrow 2}}$$

$$F_s = \frac{4\sqrt{R_s^{0 \leftarrow 1} R_s^{1 \rightarrow 2}}}{\left(1 - \sqrt{R_s^{0 \leftarrow 1} R_s^{1 \rightarrow 2}}\right)^2}$$

Este resultado nos será de mucha utilidad para el siguiente tema.

En 1890, Charles Fabry se dio cuenta que podría utilizar una interfaz doble para distinguir longitudes de onda que están muy juntas. Fabry y su colega experimental, Alfred Perot, construyeron un instrumento y comenzó a usarlo para realizar mediciones en varias fuentes espectrales. De esta manera crearon el instrumento ya bastante conocido como Fabry-Perot que consiste en dos superficies idénticas paralelas separadas una distancia d como se muestra en la figura 7.8

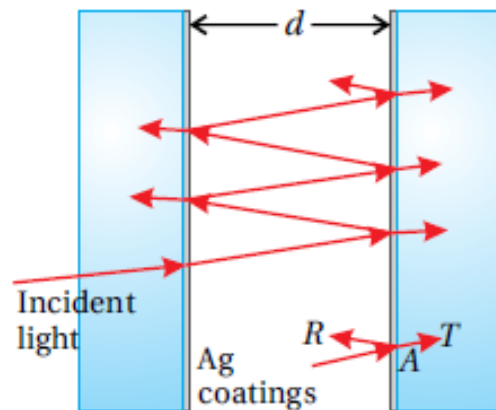


Figura VII-8 Instrumento Fabry-Perot

Para hacer un análisis simple consideraremos que el índice de refracción $n_0 = n_2$, suponemos que los ángulos son tales que se evita la reflexión interna total. La transmisión a través del dispositivo depende del espaciado entre las dos superficies, la reflectancia de las superficies, así como la longitud de onda de la luz.

El espaciado d entre las dos superficies es un parámetro ajustable, el nombre del instrumento descrito es interferómetro Fabry-Perot. Si el espaciado es fijo mientras que el ángulo de la luz varía, el instrumento se denomina etalón de Fabry-Perot. Por lo tanto, un etalón de Fabry-Perot puede ser tan simple como una pieza de vidrio con superficies paralelas. A veces, una fina membrana óptica llamada película se usa como etalón (En ocasiones se inserta en cavidades del láser para discriminar ciertas longitudes de onda). Sin embargo, para lograr una discriminación nítida entre longitudes de onda poco espaciadas, es deseable un espaciado d relativamente grande.

Como describimos anteriormente podemos hacer uso de la forma de la transmitancia en una doble interfaz

$$T_s^{tot} = \frac{T_s^{max}}{1 + F_s \operatorname{sen}^2\left(\frac{\Phi_s}{2}\right)}$$

En este caso que ambas interfaces son idénticas tenemos la siguiente idealización

$$T = T^{0 \rightarrow 1} = T^{1 \rightarrow 2} \text{ y } R = R^{0 \leftarrow 1} = R^{1 \rightarrow 2}$$

Por lo que tenemos la siguiente forma bastante simple

$$T^{max} = \frac{T^2}{(1 - R)^2}$$

$$F = \frac{4R}{(1 - R)^2}$$

En principio, estas ecuaciones tendrían que ser evaluadas tanto para polarización de la luz s o p . Sin embargo, un interferómetro de Fabry-Perot o etalon generalmente opera con una incidencia cercana a la normal, por lo que hay poca diferencia entre las dos polarizaciones.

Cuando se usa un instrumento de Fabry-Perot, se observa la transmitancia T^{tot} cuando se varía el parámetro Φ . El parámetro Φ se puede variar modificando d , θ_1 o mediante la siguiente relación

$$\Phi = \frac{4\pi n_1 d}{\lambda_{vac}} \cos(\theta_1) + 2\phi_r$$

Para aumentar la sensibilidad del instrumento, es deseable que la transmitancia T^{tot} varíe fuertemente en función de Φ . Como vemos en la relación del principio lo que tiene que suceder es que el coeficiente de finura F sea grande. Lo podemos lograr aumentando la reflectancia de la interfaz.

VII.2.2 Problema de multicapas

Ahora hablaremos del problema en específico que tenemos muestras las cuales son multicapas cristalinas, entonces veamos cómo se ve la reflectancia mediante el análisis anterior en esta parte se desarrolla por así decirlo “formalismo básico” para atacar el problema con un número N de interfaces todas paralelas, como se muestra en la figura 7.9

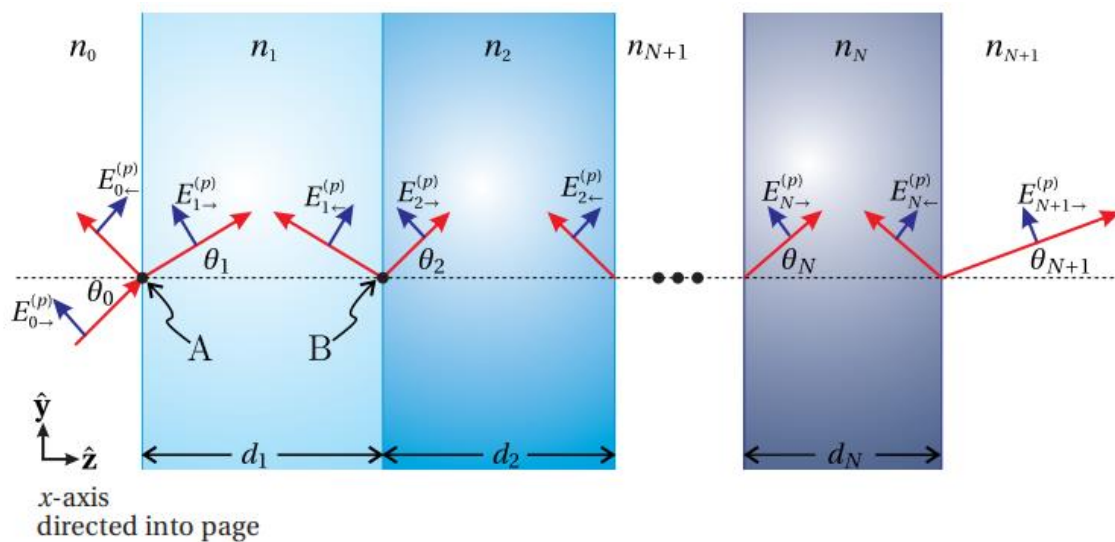


Figura VII-9 propagación de la luz a través de múltiples capas cristalinas.

aplicado la ley de Snell en cada capa obtenemos lo siguiente

$$n_0 \text{sen}(\theta_0) = n_1 \text{sen}(\theta_1) = \dots = n_N \text{sen}(\theta_N) = n_{N+1} \text{sen}(\theta_{N+1})$$

Donde N es el número de capas que tenemos en nuestro experimento, es importante entender que las capas cristalinas son con los índices $1 \rightarrow N$, la capa inicial es la interfaz del aire y la final de la misma manera que son la correspondientes a la 0 y $N + 1$.

En cada capa, solo existen dos ondas planas, cada una de las cuales está compuesta de luz que surge de los muchos posibles rebotes de varias interfaces de capa. Las flechas que apuntan hacia la derecha indican campos de ondas planas en cada capa individual que viajan aproximadamente en la dirección de avance (incidente), y las flechas que apuntan a la izquierda indican campos de ondas planas que viajan aproximadamente a la dirección de retroceso (reflejada). En la región final, solo hay una onda plana que viaja con una dirección de avance ($E_{N+1\rightarrow}^{(p)}$) que da el campo transmitido general. Aquí haremos uso de conocimiento obtenido en cursos de óptica básicos, los cuales analizan a profundidad los problemas de doble interfaz cuando hay un campo eléctrico \mathbf{E} las componentes paralelas tienen una condición de frontera que relaciona estas componentes y para las componentes paralelas del campo \mathbf{B} conducen a la siguiente relación

$$\cos\theta_0 \left(E_{0\rightarrow}^{(p)} + E_{0\leftarrow}^{(p)} \right) = \cos\theta_1 \left(E_{1\rightarrow}^{(p)} + E_{1\leftarrow}^{(p)} \right) \quad (1)$$

y

$$n_0 \left(E_{0\rightarrow}^{(p)} - E_{0\leftarrow}^{(p)} \right) = n_1 \left(E_{1\rightarrow}^{(p)} - E_{1\leftarrow}^{(p)} \right) \quad (2)$$

Para la polarización tipo s tenemos un resultado similar.

Entonces aplicamos estas condiciones de frontera solamente en el primer interfaz, claro que estamos conscientes de que hay muchas más interfaces en nuestro problema, pero la manera que se manejará esto será mediante el índice j^{th} como se ve esto es así

$$\cos\theta_j \left(E_{j\rightarrow}^{(p)} e^{ik_j d_j \cos\theta_j} + E_{j\leftarrow}^{(p)} e^{-ik_j d_j \cos\theta_j} \right) = \cos\theta_{j+1} \left(E_{j+1\rightarrow}^{(p)} + E_{j+1\leftarrow}^{(p)} \right) \quad (3)$$

Y

$$n_j \left(E_{j\rightarrow}^{(p)} e^{ik_j d_j \cos\theta_j} - E_{j\leftarrow}^{(p)} e^{-ik_j d_j \cos\theta_j} \right) = n_{j+1} \left(E_{j+1\rightarrow}^{(p)} - E_{j+1\leftarrow}^{(p)} \right) \quad (4)$$

Aquí hemos establecido el origen dentro de cada capa en la superficie izquierda. Luego, al hacer la conexión con la capa posterior en la superficie derecha, debemos tener en cuenta la fase $k_j \cdot (d_j \hat{z}) = k_j d_j \cos \theta_j$. Corresponde a la fase adquirida por el campo de ondas planas al atravesar la capa con espesor d_j . Donde más información tendremos es en las condiciones de frontera de la capa final las cuales son

$$\cos \theta_N \left(E_{N \rightarrow}^{(p)} e^{i k_N d_N \cos \theta_N} + E_{N \leftarrow}^{(p)} e^{-i k_N d_N \cos \theta_N} \right) = \cos \theta_{N+1} E_{N+1 \rightarrow}^{(p)} \quad (5)$$

Y

$$n_N \left(E_{N \rightarrow}^{(p)} e^{i k_N d_N \cos \theta_N} - E_{N \leftarrow}^{(p)} e^{-i k_N d_N \cos \theta_N} \right) = n_{N+1} \left(E_{N+1 \rightarrow}^{(p)} - E_{N+1 \leftarrow}^{(p)} \right) \quad (6)$$

Son de esta forma ya que no hay campo que retroceda en la capa final.

En este punto estamos preparados para resolver estas ecuaciones. Nos gustaría eliminar todos los campos además de $E_{0 \rightarrow}^{(p)}$, $E_{0 \leftarrow}^{(p)}$ y $E_{N+1}^{(p)}$. Entonces podremos encontrar la reflectancia y transmitancia general del material de multicapas. Al resolver este sistema de ecuaciones tenemos que proceder con sumo cuidado o el algebra puede salirse de control con rapidez, afortunadamente (asumiré que como lector haya recibido entrenamiento en algebra lineal, y si este un caso donde ese entrenamiento valió la pena, de no ser el caso te invito a hacerlo de la manera tradicional solo que te tomara un buen tiempo llegar al resultado).

Lo primero que haremos es escribir la matriz general que resume todas las ecuaciones que tenemos que resolver en este caso (1)-(5)

$$\begin{bmatrix} \cos \theta_j e^{i \beta_j} & \cos \theta_j e^{-i \beta_j} \\ n_j e^{i \beta_j} & -n_j e^{-i \beta_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{j \rightarrow}^{(p)} \\ E_{j \leftarrow}^{(p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta_{j+1} & \cos \theta_{j+1} \\ n_{j+1} & -n_{j+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{j+1 \rightarrow}^{(p)} \\ E_{j+1 \leftarrow}^{(p)} \end{bmatrix} \quad (7)$$

Donde

$$\beta \equiv \begin{cases} 0 & j = 0 \\ k_j d_j \cos \theta_j & 1 \leq j \leq N \end{cases} \quad (8)$$

Y

$$E_{N+1\leftarrow}^{(p)} \equiv 0 \quad (9)$$

Reescribimos la ecuación (7) de manera que tengamos los campos de la siguiente forma

$$\begin{bmatrix} E_{j\rightarrow}^{(p)} \\ E_{j\leftarrow}^{(p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta_j e^{i\beta_j} & \cos \theta_j e^{-i\beta_j} \\ n_j e^{i\beta_j} & -n_j e^{-i\beta_j} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \cos \theta_{j+1} & \cos \theta_{j+1} \\ n_{j+1} & -n_{j+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{j+1\rightarrow}^{(p)} \\ E_{j+1\leftarrow}^{(p)} \end{bmatrix} \quad (10)$$

Hay que tener en cuenta que la ecuación (10) representa una ecuación matricial distinta para cada j diferente. Podemos sustituir $j = 1$ en la ecuación de $j = 0$ para obtener

$$\begin{bmatrix} E_{0\rightarrow}^{(p)} \\ E_{0\leftarrow}^{(p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta_0 & \cos \theta_0 \\ n_0 & -n_0 \end{bmatrix}^{-1} M_1^{(p)} \begin{bmatrix} \cos \theta_2 & \cos \theta_2 \\ n_2 & -n_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{2\rightarrow}^{(p)} \\ E_{2\leftarrow}^{(p)} \end{bmatrix} \quad (11)$$

sí son cuidadosos podrán ver que agrupe las matrices con $j = 1$ en la matriz $M_1^{(p)}$

$$M_1^{(p)} \equiv \begin{bmatrix} \cos \theta_1 e^{i\beta_1} & \cos \theta_1 e^{-i\beta_1} \\ n_1 e^{i\beta_1} & -n_1 e^{-i\beta_1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \cos \theta_1 & \cos \theta_1 \\ n_1 & -n_1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

Ahora podemos ir sustituyendo progresivamente hasta el punto de llegar hasta el final de las interfaces y lo que se va a obtener es ya más que evidente que tendremos un producto de matrices M_j y teniendo como conexión la primera matriz y última.

$$\begin{bmatrix} E_{0\rightarrow}^{(p)} \\ E_{0\leftarrow}^{(p)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta_0 & \cos\theta_0 \\ n_0 & -n_0 \end{bmatrix}^{-1} \left(\prod_{j=1}^N M_J^{(p)} \right) \begin{bmatrix} \cos\theta_{N+1} & \cos\theta_{N+1} \\ n_{N+1} & -n_{N+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{N+1\rightarrow}^{(p)} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (13)$$

Donde la matriz de importancia se vuelve la del producto (el símbolo Π representa una multiplicación) de estas interfaces

$$M_J^{(p)} \equiv \begin{bmatrix} \cos\theta_j e^{i\beta_j} & \cos\theta_j e^{-i\beta_j} \\ n_j e^{i\beta_j} & -n_j e^{-i\beta_j} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \cos\theta_j & \cos\theta_j \\ n_j & -n_j \end{bmatrix} \quad (14)$$

$$M_J^{(p)} \equiv \begin{bmatrix} \cos\beta_j & -\frac{isen\beta_j \cos\theta_j}{n_j} \\ -\frac{in_j sen\beta_j}{\cos\theta_j} & \cos\beta_j \end{bmatrix} \quad (15)$$

Ahora como toque final, dividimos (13) por el campo incidente $E_{0\rightarrow}^{(p)}$, obteniendo la siguiente relación

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{E_0^{(p)}}{E_{0\rightarrow}^{(p)}} \\ \frac{E_0^{(p)}}{E_{0\rightarrow}^{(p)}} \end{bmatrix} = A^{(p)} \begin{bmatrix} E_{N+1}^{(p)} \\ \frac{E_{0\rightarrow}^{(p)}}{0} \end{bmatrix} \quad (16)$$

Donde

$$A^{(p)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(p)} & a_{12}^{(p)} \\ a_{21}^{(p)} & a_{22}^{(p)} \end{bmatrix} = \frac{1}{2n_0 \cos\theta_0} \begin{bmatrix} n_0 & \cos\theta_0 \\ n_0 & -\cos\theta_0 \end{bmatrix} \left(\prod_{j=1}^N M_J^{(p)} \right) \begin{bmatrix} \cos\theta_{N+1} & 0 \\ n_{N+1} & 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

En la matriz final (17) hemos remplazado las entradas en la columna derecha con ceros. Esto está permitido ya que opera como un vector columna con cero en el componente inferior.

La ecuación (16) representa dos ecuaciones, que deben resolverse simultáneamente para encontrar las razones entre los campos, una vez que calcula la matriz $A^{(p)}$, es una tarea bastante sencilla, obtenemos lo que buscábamos:

$$t_p^{tot} \equiv \frac{E_{N+1 \rightarrow}^{(p)}}{E_{0 \rightarrow}^{(p)}} = \frac{1}{a_{11}^{(p)}} \quad (18)$$

$$r_p^{tot} \equiv \frac{E_{0 \leftarrow}^{(p)}}{E_{0 \rightarrow}^{(p)}} = \frac{a_{21}^{(p)}}{a_{11}^{(p)}} \quad (19)$$

La conveniencia de esta notación radica en el hecho de que podemos tratar un número arbitrario de capas N con diferentes espesores e índices. La esencial de cada capa esta contenida en la matriz características de 2×2 pero en general podemos solo tomar el producto de estas matrices y resolver el sistema de la manera que lo hicimos, a partir de las cuales obtenemos el coeficiente de reflexión y transmisión.

Para el caso de polarización tipo s el procedimiento es análogo sin embargo en ese caso tendremos unas matrices

$$A^{(s)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(s)} & a_{12}^{(s)} \\ a_{21}^{(s)} & a_{22}^{(s)} \end{bmatrix} = \frac{1}{2n_0 \cos \theta_0} \begin{bmatrix} n_0 \cos \theta_0 & 1 \\ n_0 \cos \theta_0 & -1 \end{bmatrix} \left(\prod_{j=1}^N M_j^{(s)} \right) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ n_{N+1} \cos \theta_{N+1} & 0 \end{bmatrix} \quad (20)$$

$$M_j^{(s)} \equiv \begin{bmatrix} \cos \beta_j & -\frac{i \operatorname{sen} \beta_j}{n_j \cos \theta_j} \\ -i n_j \operatorname{sen} \beta_j \cos \theta_j & \cos \beta_j \end{bmatrix} \quad (21)$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{E_0^{(s)}}{E_{0 \rightarrow}^{(s)}} \\ \frac{E_{0 \rightarrow}^{(s)}}{0} \end{bmatrix} = A^{(s)} \begin{bmatrix} \frac{E_{N+1}^{(s)}}{E_{0 \rightarrow}^{(s)}} \\ \frac{E_{0 \rightarrow}^{(s)}}{0} \end{bmatrix} \quad (22)$$

Sin embargo, llegamos a los mismos coeficientes que se encontraron antes

$$t_s^{tot} \equiv \frac{E_{N+1 \rightarrow}^{(s)}}{E_{0 \rightarrow}^{(s)}} = \frac{1}{a_{11}^{(s)}} \quad (23)$$

$$r_s^{tot} \equiv \frac{E_{0\leftarrow}^{(s)}}{E_{0\rightarrow}^{(s)}} = \frac{a_{21}^{(s)}}{a_{11}^{(s)}} \quad (24)$$

Con ayuda de estos términos se hizo el cálculo teórico de reflectancia de las muestras.

VII.3 FOTORREFLECTANCIA (DESARROLLO ALTERNATIVO)

Desde los primeros días de la mecánica cuántica, el problema del efecto de un campo eléctrico sobre un cristal ha sido un reto para muchos físicos. Ya que matemáticamente la perturbación más simple no trivial es el cristal hamiltoniano (un potencial lineal con la posición), esto ha sido estudiado extensamente.

La primera investigación con enfoque principalmente, el fenómeno del transporte de la conducción en los sólidos fue en 1928 con un tratamiento semi-cuántico hecho por Bloch, posteriormente en 1940, Houston da el primer paso hacia el entendimiento actual de los efectos del campo eléctrico sobre los sólidos aislantes al obtener la primera aproximación precisa a las funciones de onda que describen los electrones de un cristal en un campo eléctrico. Pero no fue hasta 1958 que dicho cálculo del efecto del campo eléctrico sobre las propiedades ópticas de los sólidos fue estimado. Este retraso causado en parte porque la influencia extremadamente pequeña de campo sobre las propiedades ópticas, por lo cual se había escapado de la detección experimental. En dicho año Franz y Keldysh publicaron independientemente, los primeros cálculos del efecto del campo eléctrico sobre las propiedades ópticas aislantes en la región transparente o ancho prohibido.

En particular nuestro interés es el conocer el efecto de la modulación en la reflectancia, para ello veamos primero como obtener la reflectancia del material.

$$r = \frac{n + ik - 1}{n + ik + 1} \quad (1)$$

Pero sabemos que

$$N = n + ik = \sqrt{\varepsilon} \quad (2)$$

$$\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2 \quad (3)$$

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \varepsilon_2 = 2nk \quad (4)$$

Sustituyendo esto en (1) obtenemos:

$$r = \frac{n + ik - 1}{n + ik + 1} = \frac{\sqrt{\varepsilon} - 1}{\sqrt{\varepsilon} + 1} \quad (5)$$

Realizando La diferenciación respectiva de la ecuación anterior respecto al parámetro de perturbación externo ζ introducido en la fotorreflectancia puede obtenerse la diferencial total, además dividiendo entre R para normalizar se llega a:

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{1}{R} \frac{dR}{d\varepsilon_1} \frac{d\varepsilon_1}{d\zeta} + \frac{1}{R} \frac{dR}{d\varepsilon_2} \frac{d\varepsilon_2}{d\zeta} - (6)$$

Esta expresión se escribe más compactamente si se emplean los llamados coeficientes de Seraphin y viendo variaciones en la función dieléctrica podemos escribir esto de la siguiente manera;

$$\frac{\Delta R}{R} = \alpha \Delta\varepsilon_1 + \beta \Delta\varepsilon_2 - (7)$$

Donde $\Delta\varepsilon_1$ y $\Delta\varepsilon_2$ son cambios de la parte real e imaginaria de la función dieléctrica. En una vecindad cercana al band gap de material $\beta \approx 0$ [Aspnes D. E., Surface Sci. 37 (1973), 418.]

Hay que tener en cuenta que alrededor del borde fundamental solo α es significativo, por lo tanto, en esta región la forma de los espectros de modulación de reflectancia corresponde a la modulación de ε_1 .

Por lo que

$$\frac{\Delta R}{R} \approx \alpha \Delta\varepsilon_1 - (8)$$

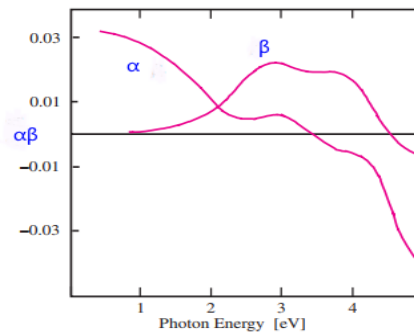


Figura VII-10 Dependencia espectral de los coeficientes de Seraphine para Ge a temperatura ambiente. [B. O. Seraphin, N. Bottka: Band structure analysis from electroreflectance studies. Phys. Rev. 145, 628–636 (1966)]

Como ya se ha mencionado anteriormente, la espectroscopía de fotorreflectancia es una de las técnicas de electromodulación y, por lo tanto, discutiremos las formas de línea de la respuesta PR en términos de mecanismos de electromodulación. La electromodulación es la más compleja forma de espectroscopia de modulación.

Primero tenemos un campo uniforme de magnitud \mathcal{E} a lo largo z , por lo tanto, el hamiltoniano de este campo es:

$$\mathcal{H}_{\mathcal{E}} = -e\mathcal{E}z - (9)$$

Obviamente, no es traslacionalmente invariante a lo largo de z . El efecto de $\mathcal{H}_{\mathcal{E}}$ es en el par electrón-hueco, por lo tanto, depende solamente de la separación relativa del electrón y el hueco, \mathbf{r} y no de la ubicación del centro de masa, en el caso de los excitones el centro de masa no es afectado por un campo eléctrico uniforme. En nuestro caso obtenemos la siguiente ecuación

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 - e\mathcal{E} - E_r \right) \phi(r) = 0 - (10)$$

Donde e es la carga (negativa) del electrón, la ecuación (10) puede ser separada en una ecuación para las componentes de r perpendiculares a \mathcal{E} , sin incluir \mathcal{E} y otra para la componente en z

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dz^2} - e\mathcal{E} - E_z \right) \phi(z) = 0 - (11)$$

La solución para la ecuación (11) tiene que ser multiplicada por una onda plana correspondiente a las componentes del plano xy :

$$\phi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp[-i(k_x x + k_y y)] - (12)$$

Donde N es una constante de normalización y la energía E_z tiene que ser sumada a la energía cinética del plano xy para obtener la energía total:

$$E_r = E_0 + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2\mu} + E_z - (13)$$

La ecuación (11) la podemos reescribir de una forma más sencilla:

$$\frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} = -\xi\phi(\xi) - (14)$$

Donde:

$$\xi = \frac{E_z}{\Theta} - z \left(2 \frac{\mu|e|\mathcal{E}}{\hbar} \mathcal{E} \right)^{\frac{1}{3}} - (15)$$

Y esta nueva variable se llama energía electroóptica:

$$\Theta = \left(\frac{e^2 \mathcal{E}^2 \hbar^2}{2\mu} \right)^{\frac{1}{3}} - (16)$$

Ahora las soluciones de la ecuación (10) que cumplan las condiciones de regularidad adecuadas para $z \rightarrow \infty$ se pueden escribir en términos de la función de Airy $Ai(\xi)$ como:

$$\phi_{E_z}(\xi) = \frac{(|e|\mathcal{E})^{\frac{1}{2}}}{\Theta} Ai(\xi) - (17)$$

Ya teniendo todo el terreno preparado lo que sigue es ir al caso de campo bajo, Comenzamos calculando la energía ganada por una partícula libre en un campo eléctrico. Esto se puede obtener reemplazando k por $k + q\mathcal{E}t/\hbar$. Siguiendo los pasos de Aspnes y Rowe [Aspnes D. E., Surface Sci. 37 (1973), 418. Y Aspnes D. E, Rowe J. E., Pyhs. Rev. B 5 (1972), 4022.] (sugiero acudir a estas referencias para tener un entendimiento mayor del desarrollo) encontramos que la energía ganada es:

$$E(\mathcal{E}) = \frac{q^2 \mathcal{E}^2 t^2}{2\mu} - (18)$$

Donde t es el tiempo, si consideramos que estamos cerca de un punto crítico (es decir una vecindad con el punto crítico), con energía E_g , la función dieléctrica tiene una forma general

$$\varepsilon = \varepsilon(E - E_g, \Gamma) - (19)$$

Donde E es la energía del foton.

El campo eléctrico induce un cambio en la función dieléctrica dado de la siguiente forma:

$$\Delta\varepsilon = \varepsilon(E - E_g + E(\mathcal{E})) - \varepsilon(E - E_g) - (20)$$

Si el campo es suficientemente pequeño podemos hacer una expansión en series de Taylor que nos da la siguiente relación:

$$\Delta\varepsilon = E(\mathcal{E}) \left(\frac{d}{dE} \right) \varepsilon(E - E_g, \Gamma) = \frac{q^2 \mathcal{E}^2 t^2}{2\mu} \left(\frac{d}{dE} \right) \varepsilon(E - E_g, \Gamma) - (21)$$

Ahora recordemos algo del conocimiento de nuestros cursos de mecánica cuántica, el tiempo es un operador

$$t = i\hbar \frac{d}{dE} - (22)$$

Por lo tanto, la ecuación (21) se vería de esta manera

$$\Delta\varepsilon = E(\mathcal{E}) \left(\frac{d}{dE} \right) \varepsilon(E - E_g, \Gamma) = \frac{q^2 \mathcal{E}^2}{2\mu} \left(\frac{d^3}{dE^3} \right) \varepsilon(E - E_g, \Gamma) - (23)$$

Y retomando la energía electr tica

$$\Delta\varepsilon = (\Theta\hbar)^3 \left(\frac{d^3}{dE^3} \right) \varepsilon(E - E_g, \Gamma) - (24)$$

Por lo tanto, a que llegamos con este desarrollo el cambio en la funci n diel ctrica es proporcional al cuadrado del campo \mathcal{E}^2 , inversamente proporcional a la masa reducida y tiene una forma de l nea de tercera derivada de la funci n sin perturbar. Nota la condici n que $E(\mathcal{E}) \leq \Gamma$ es equivalente a $\hbar\Theta \leq \Gamma$, y si tomamos el igual $\tau\Gamma = \hbar$, seria el tiempo de vida de la transici n.

Ahora para evaluar la ecuación (23) necesitamos saber la función dieléctrica y el tipo de punto crítico. Para este caso con un ensanchamiento homogéneo la función dieléctrica toma una forma generalizada de Lorentziana. Para esta función dieléctrica, el cambio de la reflectividad se puede escribir en general como

$$\frac{\Delta R}{R} = \Re[C e^{i\theta} (E - E_g + i\Gamma)^{-n}]$$

Donde θ es el factor de fase y n depende del tipo de punto crítico al que se aplica (los cuales se analizaron en la sección anterior).

VII.4 ACRÓNIMOS Y ABREVIATURAS USADOS

Ga – Galio	STM – Microscopia de exploración por tuneamiento
Si – Silicio	STE – Exciton auto atrapado
C – Carbono	FE – Exciton libre
N – Nitrógeno	FCC – Centrada en la cara cubica
O – Oxígeno	WBG – Banda prohibida ancha
GaN - Nitruro de galio	NH ₃ – Amoniac
AlN – Nitruro de aluminio	FKO – Oscilaciones Franz-Keldysh
AlAs – Arseniuro de aluminio	D^+ – Donor ionizado
GaAs - Arseniuro de galio	D^0 – Donor neutro
CdTe - Telurio de cadmio	A^- – aceptor ionizado
HgTe – Telurio de mercurio	A^0 – Aceptor neutro
InP – Fosfuro de indio	BZ – Zona de Brillouin
Ω – Ohm	Ω_m – Frecuencia de referencia
ML – Mono capa	V_{AC} – Voltaje de corriente alterna
UHV – Ultra alto vacío	V_{DC} – Voltaje de corriente directa
Torr – Unidad de presión	NM – nanómetros
PID – Proporcional, integral y derivativo	E_{gap} – Energía de banda prohibida
RHEED – Difracción de electrones de alta energía	E_A – Energía para el aceptor
PBN – Nitruro de boro pirolítico	PEH – Pares electrón hueco
	U.A. -Unidades Arbitrarias

eV – electrón volts

meV – milielectrón volts

Pa – Pascales (unidades de presión)

EM – Electro Modulada

\Re – Parte real

P_{Ga} – presión de galio

T_{sus} – Temperatura del sustrato

T_{si} – Temperatura de la celda de silicio

T_{Ga} – Temperatura de la celda de galio

PL – Fotoluminiscencia

PR – Fotorreflectancia

FDFD – Forma funcional de primera derivada

TDFD – Forma funcional de tercera derivada

MBE – Haz molecular epitaxial

MOCVD – Deposición química metalorgánica de vapor

HVPE – Epitaxia en fase vapor de hidruro

C_N – Carbono en un sitio de Nitrógeno

V_{Ga} – Vacancia de Galio

O_N – Oxígeno en un sitio de Nitrógeno

RL – línea de luminiscencia roja

YL – línea de luminiscencia amarilla

BL – línea de luminiscencia azul

GL – línea de luminiscencia verde

NBE – Emisión cercana al band gap

CER – Electro reflectancia sin contacto

MEF – Micro espectro fotómetro

PMT – Tubo fotomultiplicador

VIII REFERENCIAS

- [1] Y. T. X. Y. e. a. Di Zhao, «High-performance Al₂O₃-Ce:YAG ceramics for white LED and LD by the optimization of Ce³⁺ concentration,» *Optical Materials*, vol. 108, 2020.
- [2] N. S. I. A. e. a. H. Amano, «Metalorganic vapor phase epitaxial growth of a,» *Appl.Phys.Lett*, vol. 48, p. 353, 1986.
- [3] R. Doering, «Physics-to-technology partnerships in the semiconductor industry,» *Oxford Research Encyclopedia of Physics*, 2020.
- [4] J. B. P. a. M. C. C. W. C. Johnson, *Phys. Chem.*, 1932.
- [5] H. H. Robert Juza, «Über die Kristallstrukturen von Cu₃N, GaN und InN(1) Metallarnide und Metallnitride,» *Juza, R., & Hahn, H. (1938). Über die Kristallstrukturen von Cu₃N, GaN und Zeitschrift Für Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 1938.
- [6] H. P. & T. J. J. Maruska, «THE PREPARATION AND PROPERTIES OF VAPOR-DEPOSITED SINGLE-CRYSTAL-LINE GaN,» *Applied Physics Letters*, 1969.
- [7] E. A. M. D. R. a. J. E. B. J. I. Pankove, *Journal of Luminescence*, 1971.
- [8] D. S. J. I. P. H. P. Maruska, *Appl. Phys*, 1973.
- [9] S. Nakamura, «Gan Growth using GaN buffer Layer,» *Appl. Phys*, vol. 30, 1991.
- [10] .. I. A. T. K. H. A. K., «The growth of single crystalline GaN on a Si,» *Journal of Crystal Growth*,, vol. 128, 1993.
- [11] e. a. M. Bouzidi, *Materials Science in Semiconductor Processing*,, 2015.
- [12] S. G.-H. C. Y.-R. M. R.-L. Y. Casallas-Moreno, «M. Growth Mechanism and Properties of Self-Assembled,» *Materials*, vol. 12, nº 19, 2019.
- [13] J. Orton, *The Story of Semiconductors*, Oxford University Press, 2004.
- [14] B. G. Yacobi, *Semiconductor Materials An Introduction to Basic Principles*, 2003.
- [15] A. E. H. TUTTON, «The Crystal Space-Lattice Revealed by Röntgen Rays,» *Nature*, 1912.
- [16] C. Kittel, *Introduction To Solid State Physics*, 1953.
- [17] «University of South Carolina Beaufort Chem,» [En línea]. Available: people.chem.ucsb.edu.
- [18] wikimedia, «commons.wikimedia.org,» [En línea]. Available: https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Wurtzite_polyhedra.png.

- [19] P. Y. Manuel Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, 2010.
- [20] O. J. G. a. B. V. Shanabrook, «Photoreflectance Spectroscopy of Microstructures,» *Semiconductors and Semimentals*, vol. 36, pp. 221-292, 1992.
- [21] P. U. S. A. P. Y. Tevye Kuykendall, «Complete composition tunability of InGaN nanowires using a combinatorial approach,» *Nature materials*, vol. 6, n° 12, p. 915, 2007.
- [22] A. Y. C. a. J. R. Arthur, «Molecular beam epitaxy,» *Prog. Solid State Chem.*, vol. 10, p. 157–191, 1975.
- [23] J. R. Arthur, «Molecular beam epitaxy,» *Surf. Sci.*, vol. 500, p. 189–217, 2002.
- [24] M. Henini, *Molecular Beam Epitaxy: From Research to Mass Production*, Newnes, 2012.
- [25] H. G. Günther, «Three-temperature method as an origin of molecular beam epitaxy,» *Thin Solid Films*, vol. 88, pp. 291-307, 1982.
- [26] S. F. Garrido, *Crecimiento de nitruros del grupo III por epitaxia de haces moleculares para la fabricación de diodos electroluminiscentes en el rango visible-ultravioleta*, Madrid, 2009.
- [27] M. M. M. K.-H. L. B. J. R. A. A. H. S. T. K. N. B. S. O. I. S. R. a. X. L. Nasir Alfaraj, «Thermodynamic photoinduced disorder in AlGaIn nanowires,» *AIP Advances*, 2017.
- [28] M. T. R. D. I. C. C. E. R. Nabor Oswaldo Martínez Gracida, «Luminescent Materials applied in Diagnostic and Medical Treatment Techniques,» *Revista Científica de la Universidad Autónoma de Coahuila*, 2017.
- [29] J. Frenkel, «On the Transformation of light into heat in solids,» *Physical Review*, 1931.
- [30] I. a. V. J. Pelant, *Luminescence Spectroscopy of Semiconductors*, Oxford University Press, 2012.
- [31] C. Ronda, *Luminescence*, Wiley, 2008.
- [32] J. Singh, *Optical Properties of Materials and Their Applications*, Wiley, 2020.
- [33] H. a. W. E. Bebb, *Semiconductors and Semimetals* vol 8, New York: Acad. Press., 1972.
- [34] B. O. Seraphin, «Modulated Reflectance,» *Optical Properties of Solids*, p. 182, 1972.
- [35] R. Hendirk, *Optical characterization of semiconductors using photoreflectance spectroscopy*, Tesis: Faculty of natural and agricultural sciences, 2002 .
- [36] D. A. a. A. A. Studna, «Schottky-Barrier Electroreflectance,» *Physical Review B*, 1973.
- [37] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, 1999.

- [38] P. Y. Y. a. M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors Physics and Materials Properties* (Cuarta Edición), Springer, 2010.
- [39] M. Abramowitz y I. A. Stegun, « Applied Mathematics Series,» de *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Washington D.C., National Bureau of Standards; Dover Publications, 1964, p. 446.
- [40] D. Aspnes, «Direct Verification of the Third-Derivative Nature of Electroreflectance Spectra,» *PHYSICAL REVIEW LETTERS*, vol. 28, nº 3, pp. 168-170, 1972.
- [41] J. F. J. FRANCY NELLY JIMÉNEZ G. CARLOS VARGAS, «Photorefectance technique to analyze optical and mechanical properties of semiconductor samples,» *Scientia et Technica*, nº 39, 2008.
- [42] W. A. A. a. B. E. Y. Luang, «Proceedings International Conference on Physics of Semiconductors,» 1967.
- [43] R. K. K. e. a. P. Sitarek, «Photorefectance investigations of GaN epitaxial layers,» *Materials Science and Engineering*, 2001.
- [44] M. A. R. a. H. Morkoç, «Yellow and green luminescence in a freestanding GaN template,» *Applied Physics Letters*, vol. 78, 2001.
- [45] M. H. Z. J. C. P. V. F. Y. a. H. Michael A. Reshchikov, «Photoluminescence Study of Defects in GaN Grown by Molecular Beam Epitaxy,» *Materials Research Society*, vol. 639, 2001.
- [46] A. M. Stoneham, *Theory of Defects in Solids*, Clarendon Press, 1975.
- [47] E. o. G. b. p. measurement, «Fundamental energy gap of GaN from photoluminescence excitation spectra,» *Phys. Status Solidi C*, 2011.
- [48] G. A. G. C. J. C. P. B. J. C. P. G. N. H. S. a. M. W. A. V. Sampath, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, p. 1487, 2004.
- [49] M. S.-G. e. al, *Journal of Crystal Growth*, pp. 23-30, 1998.
- [50] R. D. a. M. Ilegems, *Solid State Commun*, vol. 9, 1971.
- [51] I. D. G. a. W. G. E. F. Schubert, *Applied Physics Letters* , vol. 71, 1997.
- [52] C. G. E. P. R. Seitz, «Time resolved spectroscopy of mid-band-gap emissions in Si-doped GaN,» *Journal of Crystal Growth*, Vols. %1 de %2189-190, pp. 546-550, 1998.
- [53] M. A. Reshchikov, «Measurement and analysis of photoluminescence in GaN,» *Journal of Applied Physics*, 2021.
- [54] B. A. M. Matys, «Mechanism of yellow luminescence in GaN at room temperature,» *Journal of Applied Physics* , 2017.

- [55] L. P. Eisenhart, A Treatise on the Differential Geometry of Curves and Surfaces, Schwarz Press, 2008.
- [56] P. C. Margarita Ruiz, «Use of the First Derivative of Spectral,» *American Society of Agricultural Engineers*, 1982.
- [57] Z. (. (Journal of Applied Physics 66 y <https://doi.org/10.1063/1.343882>), «<https://doi.org/10.1063/1.343882>,» *Journal of Applied Physics*, vol. 66, 1989.
- [58] H. & A. Lipsanen, «Lipsanen, Interference effects in photoreflectance of epitaxial layers grown on semi-insulating substrates,» *Applied Physics Letters*, 1993.
- [59] *Journal Applied Physics*, vol. 81, nº 10, 1997.
- [60] R. K. e. al., *Applied Surface Science*, 2006.
- [61] Y. C.-M. C. Y.-R. G. G.-P. J. S.-S. J. A.-H. C. V.-L. S. G.-H. J. H.-R. M. L.-L. BE Zendejas-Leal, «Interference and electro-optical effects in cubic GaN/GaAs heterostructures prepared by molecular beam epitaxy,» *Journal of Applied Physics*, p. 125706, 2020.
- [62] G. R. G. G. Shokhovets S, «Study of the linear electro-optic effect in α -GaN by electroreflectance,» *Materials Science and Engineering: B*, vol. 93, pp. 215-218, 2002.
- [63] T. a. Y. H. a. A. S. a. F. S. a. O. K. Kawashima, «Optical properties of hexagonal GaN,» *Journal of Applied Physics*, vol. 82, nº 7, pp. 3528-3535, 1997.
- [64] M. H. Reshchikov MA, «Luminescence properties of defects in GaN,» *Journal of applied physics*, vol. 97, nº 6, pp. 5-19, 2005.
- [65] M. B. a. E. Wolf, «Sect 7.6.1,» de *Principles of Optics*, Cambridge University Press, 1999.
- [66] F. Bloch, «Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern.,» *Zeitschrift fur Physik*, vol. 52, pp. 555-600, 1928.
- [67] A. A. M. B. e. a. J. Edmond, *Journal Crystal Growth* , 2004.
- [68] M. T. U. A. Y. Suzuki, «First-principles calculations of effective-mass parameters of AlN and GaN,» *Phys. Rev. B*, vol. 52, nº 1, 1995.
- [69] C. T. C. a. K. M. H. B. J. Min, «First-principles total-energy calculation of gallium nitride,» *PHYSICAL REVIEW B*, nº 45, 1992.
- [70] T. C. C. M. F. L. Y. C. Yeo, «Electronic band structures and effective-mass parameters of wurtzite GaN and InN,» *Journal of Applied Physics*, nº 83, 1998.
- [71] S.-J. C. W. L. K.-B. C. X. Zhang, «Photoreflectance study of Si-doped GaN grown by metal-organic chemical vapor,» *Applied Physics Letters*, 1998.

- [72] D. C. L. C. Q. C. J. Y. E. K. a. M. A. K. D. V. T. a. V. A. D. P. W. Y. a. J. D. Clark, «Below band gap photoreflectance transitions in epitaxial GaN,» *Applied Physics Letters*, 2004.
- [73] B. E. C.-M. Y. L. Y.-R. C. M. G.-P. G. I. S.-S. J. A.-H. J. R. L.-L. M. Zendejas-Leal, «Interference and electro-optical effects in cubic GaN/GaAs heterostructures prepared by molecular beam epitaxy,» *Interference and electro-optical effects in cubic GaN/GaAs heterostructures prepared by molecular beam epitaxy*, 2020.
- [74] S. S. Z. C. R. M. S. M. Bouzidi, «Time-resolved photoluminescence and photoreflectance spectroscopy of GaN layers grown on SiN-treated sapphire substrate: Optical properties evolution at different growth stages,» *optical materials*, 2017.
- [75] H. M. S. S. P. a. K. Y. L. M. A. Reshchikov, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 78, 2001.
- [76] U. J. O. B. H. Y. a. K. P. J. Menniger, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 69, 1996.
- [77] P. H. Daniel F. Blossey, «Chapter 3 Electroabsorption,» de *Semiconductors and semimentals*, 1972, pp. 257-314.
- [78] D. S. C. T. C. D. A. C. G. W. W. T. H. W. a. C. A. B. D. A. B. Miller, «Electric field dependence of optical absorption near the band gap of quantum-well structures,» *PHYSICAL REVIEW B*, 1985.
- [79] G. R. Fowles, «Sect 4.4,» de *Introduction to Modern Optics*, New York, Dover, 1975.
- [80] H.-J. B. J. B. Will Kleber, «Detlef Klimm: Einführung in die Kristallographie,» 2010.
- [81] M. I. R. N. S. K. H. A. a. I. A. Shinji Terao, «Fracture of Al_xGa_{1-x}N/GaN Heterostructure – Compositional and Impurity Dependence–,» *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 40, 2001.